Introduction
à
l'Analyse Numérique

Ernst Hairer

Travaux Pratiques

en collaboration avec

Assyr Abdulle

Université de Genève
Section de mathématiques
Case postale 240
CH-1211 Genève 24

Octobre 2001

Table des matières

Avant-propos

Cette brochure est une revision des polycopiés distribués pendant le cours “Analyse Numérique” (2 heures par semaine) donné en 2000/2001. Elle est une version corrigée des polycopiés distribués en 1991/92. Durant des années, ce cours a été donné alternativement par Gerhard Wanner et par l'auteur. Je remercie Gerhard pour avoir mis à ma disposition ses notes de cours (en particulier l'exemple de la section VI.4).

En ce lieu, j'aimerais remercier Laurent Jay, Luc Rey-Bellet, Stéphane Cirilli, Pierre Leone, Assyr Abdulle, Michael Hauth, mon fils Martin et des nombreux étudiants soit pour leur aide dans la préparation des exercices soit pour la correction des erreurs (typographiques et mathématiques).

Œuvres générales sur l'analyse numérique

Il y a un grand assortiment de livres qui introduisent le sujet d'analyse numérique (voir le rayon 65 à la bibliothèque de la section de mathématiques avec plus de 400 livres). En voici quelques reférences. Les numéros entre chrochets (p. ex. [MA 65/403]) vous permettent de trouver le livre facilement à la bibliothèque.

K.E. Atkinson (1978): *An Introduction to Numerical Analysis.* John Wiley & Sons. [MA 65/142]

W. Boehm & H. Pautzsch (1993): *Numerical Methods.* AK Peters. [Ma 65/332]

G. Dahlquist & A. Björck (1969): *Numeriska Metoder.* CWK Gleerup, Bokfoerlag, Lund, Sweden. Traduction anglaise: *Numerical Methods.* Prentice-Hall, 1974. [MA 65/84]

P. Deuflhard & A. Hohmann (1993): *Numerische Mathematik I. Eine algorithmisch orientierte Einführung.* Walter de Gruyter & Co. Traduction anglaise: *Numerical analysis. A first course in scientific computation.* Walter de Gruyter & Co., 1995. [MA 65/301, MA 65/309]

G. Evans (1995): *Practical Numerical Analysis.* John Wiley & Sons. [MA 65/374]

W. Gautschi (1997): *Numerical Analysis. An Introduction.* Birkhäuser. [MA 65/393]

G. Hämmerlin & K.-H. Hoffmann (1991): *Numerische Mathematik.* Zweite Auflage. Springer. [MA 65/303]

M.J. Maron (1982): *Numerical analysis: a practical approach.* Macmillan.

W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky & W.T. Vetterling (1986): *Numerical Recipes (FORTRAN). The Art of Scientific Computing.* Cambridge Univ. Press. [MA 65/239]

J. Rappaz & M. Picasso (1998): *Introduction à l'analyse numérique.* Presses polytechniques et universitaires romandes. [MA 65/404]

A. Quarteroni, R. Sacco & F. Saleri (2000): *Numerical Mathematics.* Springer. [MA 65/432]

M. Schatzman (1991): *Analyse numérique : cours et exercices pour la licence.* Paris : InterEditions. [MA E188]

H.R. Schwarz (1986): *Numerische Mathematik.* B.G. Teubner. [MA 65/249]

G.W. Stewart (1996): *Afternotes on Numerical Analysis.* SIAM. [MA 65/389]

J. Stoer & R. Bulirsch (1972): *Einführung in die Numerische Mathematik.* Heidelberger Taschenbücher, Springer. Traduction anglaise: *Introduction to Numerical Analysis.* Springer, 1980. [MA 65/48]

Ch. Überhuber (1995): *Computer-Numerik 1 und 2.* Springer.

Chapitre I

Intégration Numérique

Etant donné une fonction continue sur un intervalle borné

$$f : [a, b] \to I\!R, \tag{0.1}$$

on cherche à calculer l'intégrale

$$\int_a^b f(x)\, dx. \tag{0.2}$$

Dans ce chapitre, nous allons présenter la théorie des formules de quadrature (ordre, étude de l'erreur et de la convergence) et nous développerons les idées nécessaires à l'écriture d'un programme qui permette de calculer la valeur de (0.2) à une précision donnée, ceci pour n'importe quelle fonction $f(x)$.

Bibliographie sur ce chapitre

H. Brass (1977): *Quadraturverfahren.* Vandenhoeck & Ruprecht. [MA 65/124]

P.J. Davis & P. Rabinowitz (1975): *Methods of Numerical Integration.* Academic Press, New York.

H. Engels (1980): *Numerical Quadrature and Cubature.* Academic Press.

G. Evans (1993): *Practical Numerical Integration.* John Wiley & Sons. [MA 65/336]

V.I. Krylov (1959): *Priblizhennoe Vychislenie Integralov*. Goz. Izd. Fiz.-Mat. Lit., Moscow. Traduction anglaise: *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962. [MA 65/185]

R. Piessens, E. de Doncker-Kapenga, C.W. Überhuber & D.K. Kahaner (1983): QUADPACK. *A Subroutine Package for Automatic Integration.* Springer Series in Comput. Math., vol. 1. [MA 65/210]

A.H. Stroud (1974): *Numerical quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations.* Springer. [MA 65/89]

I.1 Formules de quadrature et leur ordre

La plupart des algorithmes numériques procèdent comme suit: on subdivise $[a, b]$ en plusieurs sous-intervalles ($a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N = b$) et on utilise le fait que

$$\int_a^b f(x)\, dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\, dx. \tag{1.1}$$

De cette manière, on est ramené au calcul de plusieurs intégrales pour lesquelles la longueur de l'intervalle d'intégration est relativement petite. Prenons une de ces intégrales et notons la longueur

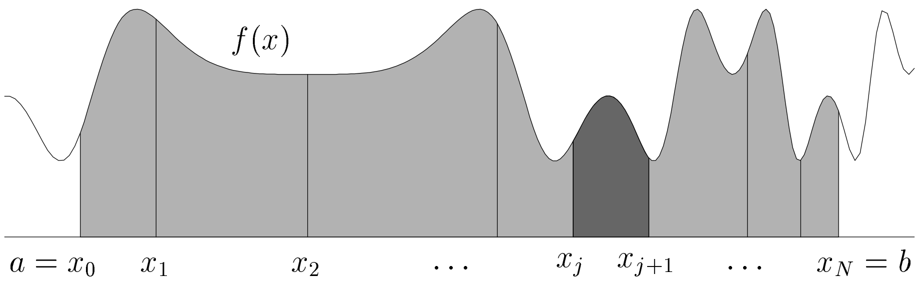


FIG. I.1 – *Une division d'un intervalle en sous-intervalles*

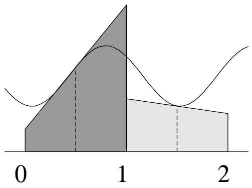
de l'intervalle par $h_j := x_{j+1} - x_j$. Un changement de variable nous donne alors

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)\,dx = h_j \int_0^1 f(x_j + th_j)\,dt.$$

Notons enfin $g(t) := f(x_j + th_j)$. Il reste alors à calculer une approximation de

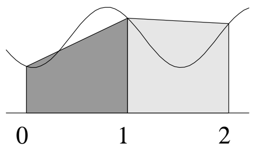
$$\int_0^1 g(t)\,dt. \tag{1.2}$$

Exemples. 1. La *formule du point milieu*



$$\int_0^1 g(t)\,dt \approx g(1/2).$$

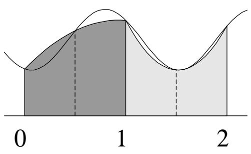
2. La *formule du trapèze*



$$\int_0^1 g(t)\,dt \approx \frac{1}{2}\Big(g(0) + g(1)\Big).$$

Ces deux formules (point milieu et trapèze) sont exactes si $g(t)$ représente une droite (polynôme de degré ≤ 1).

3. On obtient la *formule de Simpson* si l'on passe une parabole (polynôme de degré 2) par les trois points $(0, g(0))$, $(1/2, g(1/2))$, $(1, g(1))$ et si l'on approche l'intégrale (1.2) par l'aire sous la parabole:



$$\int_0^1 g(t)\,dt \approx \frac{1}{6}\Big(g(0) + 4g(1/2) + g(1)\Big).$$

4. En généralisant cette idée (passer un polynôme de degré $s-1$ par les s points équidistants $(i/(s-1), g(i/(s-1)))$, $i = 0, \ldots, s-1$), on obtient les *formules de Newton-Cotes* (Newton 1680, Cotes 1711). Pour $s \leq 7$ ces formules sont données dans le tableau I.1.

Définition 1.1 *Une formule de quadrature à s étages est donnée par*

$$\int_0^1 g(t)\,dt \approx \sum_{i=1}^{s} b_i\, g(c_i). \tag{1.3}$$

Les c_i sont les nœuds de la formule de quadrature et les b_i en sont les poids.

TAB. I.1 – *Formules de Newton-Cotes*

s	ordre	poids b_i							nom
2	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						trapèze
3	4	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$					Simpson
4	4	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$				Newton
5	6	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$			Boole
6	6	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$		—
7	8	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$	Weddle

Définition 1.2 *On dit que l'ordre de la formule de quadrature (1.3) est p, si la formule est exacte pour tous les polynômes de degré $p-1$, c.-à-d.,*

$$\int_0^1 g(t)\,dt = \sum_{i=1}^{s} b_i\, g(c_i) \qquad \textit{pour} \qquad \deg\, g \leq p-1. \tag{1.4}$$

On voit que les formules du point milieu et du trapèze sont d'ordre 2. La formule de Newton-Cotes à s étages a un ordre $p \geq s$ (par définition).

Théorème 1.3 *La formule de quadrature (1.3) a un ordre p si et seulement si*

$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q} \qquad \textit{pour} \qquad q = 1, 2, \ldots, p. \tag{1.5}$$

Démonstration. La nécessité de (1.5) est une conséquence de (1.4) si l'on pose $g(t) = t^{q-1}$. Pour en montrer la suffisance, on utilise le fait qu'un polynôme de degré $p-1$ est une combinaison linéaire de $1, t, \ldots, t^{p-1}$ et que l'intégrale $\int_0^1 g(t)\,dt$ ainsi que l'expression $\sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i)$ sont linéaires en g. □

En fixant les nœuds $c_1, \ldots, c_s$ (distincts), la condition (1.5) avec $p = s$ représente un système linéaire pour $b_1, \ldots, b_s$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ c_1 & c_2 & \ldots & c_s \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & \ldots & c_s^{s-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \\ \vdots \\ 1/s \end{pmatrix}. \tag{1.6}$$

Comme la matrice dans (1.6) est inversible (matrice de Vandermonde), la résolution de ce système nous donne une formule de quadrature d'ordre $p = s$.

Si l'on vérifie les conditions (1.5) pour la formule de Simpson, on fait une observation intéressante. Par définition, il est évident que la condition (1.5) est satisfaite pour $q = 1, 2, 3$, mais on remarque qu'elle satisfait aussi (1.5) pour $q = 4$:

$$\frac{1}{6} \cdot 0^3 + \frac{4}{6} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{1}{6} \cdot 1^3 = \frac{1}{4}$$
$$\frac{1}{6} \cdot 0^4 + \frac{4}{6} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^4 + \frac{1}{6} \cdot 1^4 = \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5}.$$

Elle est donc d'ordre 4. Par conséquent, elle n'est pas seulement exacte pour des polynômes de degré 2 mais aussi pour des polynômes de degré 3. Ceci est une propriété générale d'une formule symétrique.

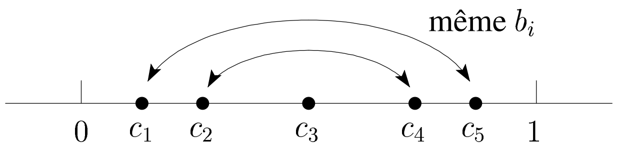


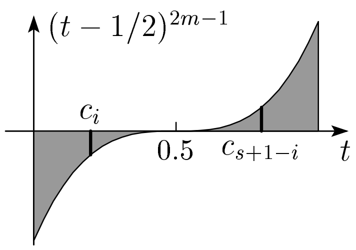
FIG. I.2 – *Coefficients et nœuds d'une formule de quadrature symetrique*

Théorème 1.4 *Une formule de quadrature symétrique ($c_i = 1 - c_{s+1-i}$, $b_i = b_{s+1-i}$ pour tout i; voir la fig. I.2) a toujours un ordre pair. C.-à-d., si elle est exacte pour les polynômes de degré $\leq 2m - 2$, elle est automatiquement exacte pour les polynômes de degré $2m - 1$.*

Démonstration. Chaque polynôme de degré $2m - 1$ peut être écrit sous la forme

$$g(t) = C \cdot (t - 1/2)^{2m-1} + g_1(t)$$

où $g_1(t)$ est de degré $\leq 2m-2$. Il suffit alors de montrer qu'une formule symétrique est exacte pour $(t - 1/2)^{2m-1}$. A cause de la symétrie de cette fonction, la valeur exacte vaut



$$\int_0^1 (t - 1/2)^{2m-1} \, dt = 0.$$

Pour une formule de quadrature symétrique on a $b_i(c_i - 1/2)^{2m-1} + b_{s+1-i}(c_{s+1-i} - 1/2)^{2m-1} = 0$. Donc, l'approximation numérique de $\int_0^1 (t - 1/2)^{2m-1} \, dt$ est également zéro. □

I.2 Etude de l'erreur

Afin d'étudier l'erreur commise en approchant l'intégrale par une formule de quadrature, commençons par une *expérience numérique* :

Prenons une fonction $f(x)$, définie sur $[a, b]$, divisons l'intervalle en plusieurs sous-intervalles équidistants ($h = (b - a)/N$) et appliquons une formule de quadrature du paragraphe précedent. Ensuite, étudions l'erreur (en échelle logarithmique)

$$err = \int_a^b f(x) \, dx - \sum_{j=0}^{N-1} h \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h) \tag{2.1}$$

en fonction de *fe* (nombre d'évaluations de la fonction $f(x)$; on a *fe* $= N \cdot (s - 1) + 1$ pour Newton-Cotes). Le nombre *fe* représente une mesure pour le travail (proportionnel au temps de calcul sur un ordinateur). La fig. I.3 montre les résultats (pour $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32, \ldots$) obtenus par les formules de Newton-Cotes pour les deux intégrales :

$$\int_0^3 \cos(x)\exp(\sin(x))\,dx \qquad \text{et} \qquad \int_0^2 \cos(x)\,dx.$$

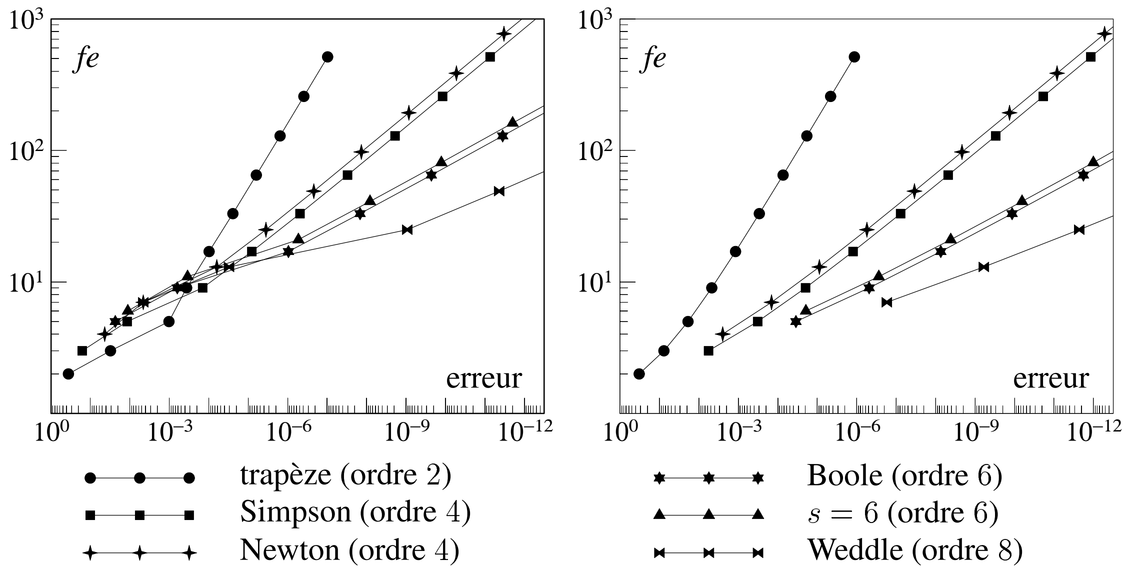


FIG. I.3 – *Le travail fe en fonction de l'erreur pour les formules de Newton-Cotes*

En étudiant les résultats de la fig. I.3, nous constatons que :

- $\log_{10}(fe)$ dépend linéairement du nombre de chiffres exacts, donné par $-\log_{10}(err)$;
- la pente de chaque droite est $1/p$ (où p est l'ordre de la formule);
- pour un travail équivalent, les formules avec un ordre élevé ont une meilleure précision.

Explication des résultats de la fig. I.3. Etudions d'abord l'erreur faite sur un sous-intervalle de longueur h

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,dx - h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0 + c_i h) \\ &= h\Big(\int_0^1 f(x_0 + th)\,dt - \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0 + c_i h)\Big). \end{aligned} \tag{2.2}$$

En supposant f suffisamment différentiable, on peut remplacer $f(x_0 + th)$ et $f(x_0 + c_i h)$ par les séries de Taylor (développées autour de x_0), et on obtient ainsi

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \sum_{q\geq 0} \frac{h^{q+1}}{q!}\Big(\int_0^1 t^q\,dt - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^q\Big) f^{(q)}(x_0) \\ &= \frac{h^{p+1}}{p!}\Big(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p\Big) f^{(p)}(x_0) + \mathcal{O}(h^{p+2}) \end{aligned} \tag{2.3}$$

(ici, on a bien supposé que la formule de quadrature ait l'ordre p mais pas l'ordre $p + 1$). La constante

$$C = \frac{1}{p!}\Big(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p\Big) \tag{2.4}$$

s'appelle *constante de l'erreur*. Supposons que h soit petit de manière à ce que le terme $\mathcal{O}(h^{p+2})$ dans (2.3) soit négligeable par rapport au terme Ch^{p+1}, alors on obtient

$$err = \sum_{j=0}^{N-1} E(f, x_j, h) \approx Ch^p \sum_{j=0}^{N-1} hf^{(p)}(x_j) \approx Ch^p \int_a^b f^{(p)}(x)\,dx = Ch^p\Big(f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a)\Big). \tag{2.5}$$

Cette formule nous permet de mieux comprendre les résultats de la fig. I.3. Comme $err \approx C_1 \cdot h^p$ et $fe \approx C_2/h$, nous avons

$$-\log_{10}(err) \approx -\log_{10}(C_1) - p \cdot \log_{10}(h) \approx Const + p \cdot \log_{10}(fe).$$

Ceci montre la dépendance linéaire entre $\log_{10}(fe)$ et $-\log_{10}(err)$, et aussi le fait que la pente soit de $1/p$.

Estimation rigoureuse de l'erreur. Notre but suivant est de trouver une estimation exacte de l'erreur d'une formule de quadrature. Une telle estimation nous permettra de démontrer des théorèmes de convergence et assurera une certaine précision du résultat numérique.

Théorème 2.1 *Considérons une formule de quadrature d'ordre p et un entier k satisfaisant $k \leq p$. Si $f : [x_0, x_0 + h] \to \mathbb{R}$ est k fois continûment différentiable, l'erreur (2.2) vérifie*

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 N_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau h)\,d\tau \tag{2.6}$$

où $N_k(\tau)$, le noyau de Peano, est donné par

$$N_k(\tau) = \frac{(1-\tau)^k}{k!} - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \qquad \textit{où} \qquad (\sigma)_+^{k-1} := \begin{cases} (\sigma)^{k-1} & \textit{si } \sigma > 0, \\ 0 & \textit{si } \sigma \leq 0. \end{cases}$$

Démonstration. Nous introduisons la série de Taylor avec reste[1]

$$f(x_0 + th) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h)\,d\tau \tag{2.7}$$

dans la formule (2.2) pour $E(f, x_0, h)$. En utilisant

$$\int_0^t (t-\tau)^{k-1} g(\tau)\,d\tau = \int_0^1 (t-\tau)_+^{k-1} g(\tau)\,d\tau$$

et le fait que la partie polynomiale de (2.7) ne donne pas de contribution à l'erreur (à cause de $p \geq k$), nous obtenons

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 \Big(\int_0^1 \frac{(t-\tau)_+^{k-1}}{(k-1)!}\,dt - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \Big) f^{(k)}(x_0 + \tau h)\,d\tau.$$

Une évaluation de l'intégrale intérieure donne le résultat. □

1. voir le paragraphe III.7 du livre de E. Hairer & G. Wanner (1995), *Analysis by Its History.* Undergraduate Texts in Mathematics, Springer.

Théorème 2.2 (Propriétés du noyau de Peano) *Considérons une formule de quadrature d'ordre p et un nombre k satisfaisant $1 \le k \le p$. Alors, on a:*

a) $N_k'(\tau) = -N_{k-1}(\tau)$ *pour* $k \ge 2$ *(pour* $\tau \ne c_i$ *si* $k = 2$*);*

b) $N_k(1) = 0$ *pour* $k \ge 1$ *si* $c_i \le 1$ *(*$i = 1, \ldots, s$*);*

c) $N_k(0) = 0$ *pour* $k \ge 2$ *si* $c_i \ge 0$ *(*$i = 1, \ldots, s$*);*

d) $\int_0^1 N_p(\tau)\,d\tau = \frac{1}{p!}\Big(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p\Big) = C$ *(constante de l'erreur (2.4));*

e) $N_1(\tau)$ *est linéaire par morceaux, de pente* -1 *et avec des sauts de hauteur* b_i *aux points* c_i *(*$i = 1, \ldots, s$*).* □

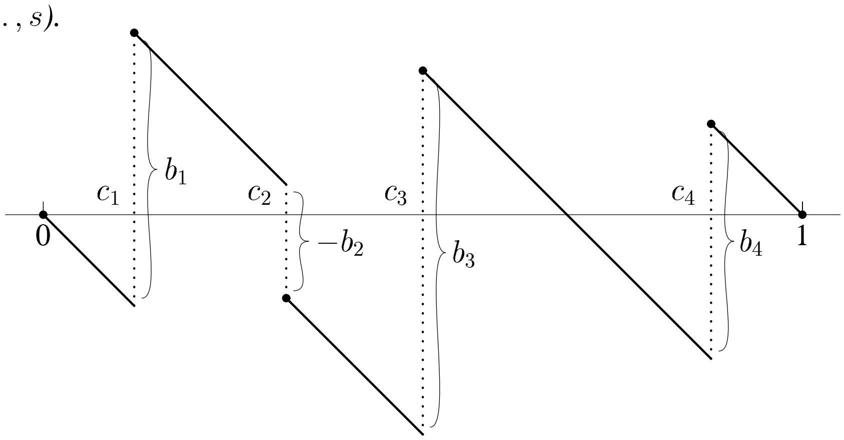


FIG. I.4 – *Le noyau de Peano $N_1(\tau)$ d'une formule de quadrature*

Les noyaux de Peano pour la formule du point milieu sont

$$N_1(\tau) = \begin{cases} -\tau & \text{si } \tau < 1/2 \\ 1-\tau & \text{si } \tau \ge 1/2 \end{cases} \qquad N_2(\tau) = \begin{cases} \tau^2/2 & \text{si } \tau \le 1/2 \\ (1-\tau)^2/2 & \text{si } \tau \ge 1/2 \end{cases}$$

(voir la fig. I.5). Pour la formule de Newton-Cotes ($s = 5$), ils sont dessinés dans la fig. I.6.

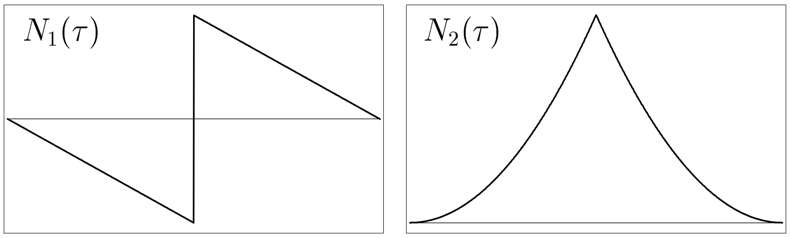


FIG. I.5 – *Noyaux de Peano pour la formule du point milieu*

Grâce au résultat du théorème précédent, on peut facilement estimer l'erreur pour l'intervalle entier $[a, b]$. Pour une division arbitraire (équidistante ou non; $h_j = x_{j+1} - x_j$), notons l'erreur par

$$err = \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{j=0}^{N-1} h_j \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_j). \tag{2.8}$$

Théorème 2.3 *Soit $f : [a, b] \to I\!R$ k fois continûment différentiable et soit l'ordre de la formule de quadrature égal à p ($p \ge k$). Alors, l'erreur (2.8) admet l'estimation*

$$|err| \le h^k \cdot (b-a) \cdot \int_0^1 |N_k(\tau)|\,d\tau \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(k)}(x)| \tag{2.9}$$

où $h = \max_j h_j$.

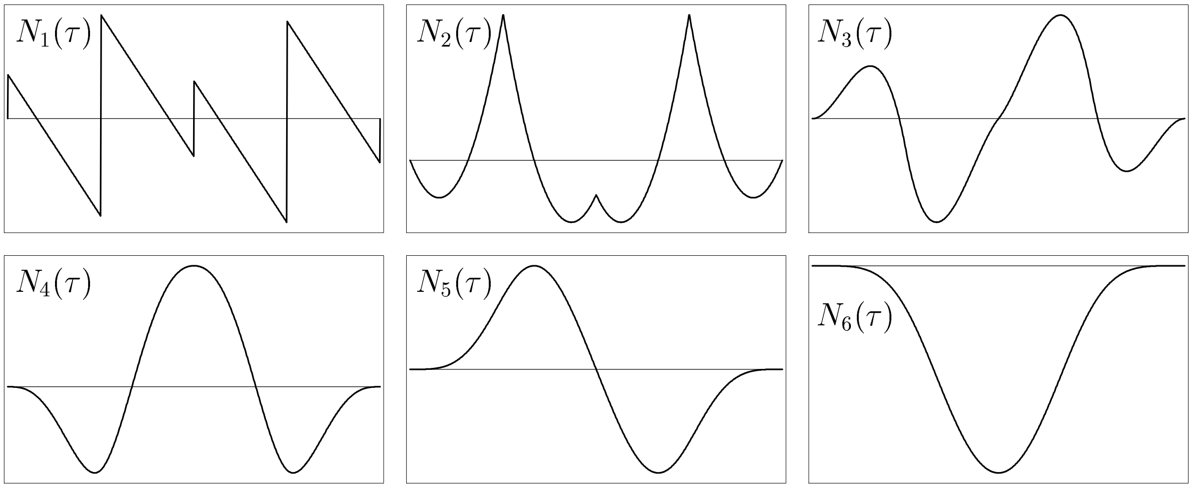


FIG. I.6 – *Noyaux de Peano pour la formule de Newton-Cotes avec* $s = 5$

Démonstration. La formule (2.6) donne

$$\begin{aligned} |E(f, x_0, h)| &\leq h^{k+1} \int_0^1 |N_k(\tau)| \cdot |f^{(k)}(x_0 + \tau h)| \, d\tau \\ &\leq h^{k+1} \int_0^1 |N_k(\tau)| \, d\tau \cdot \max_{x \in [x_0, x_0+h]} |f^{(k)}(x)|. \end{aligned}$$

Comme l'erreur (2.8) est la somme des erreurs sur les sous-intervalles de la division, on obtient

$$|err| \leq \sum_{j=0}^{N-1} |E(f, x_j, h_j)| \leq \sum_{j=0}^{N-1} \underbrace{h_j^{k+1}}_{\leq h^k \cdot h_j} \cdot \int_0^1 |N_k(\tau)| \, d\tau \cdot \underbrace{\max_{x \in [x_j, x_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|}_{\leq \max_{x \in [a,b]} |f^{(k)}(x)|}$$

ce qui montre l'assertion (2.9), car $\sum_{j=0}^{N-1} h_j = b - a$. □

Exemples. Pour la formule du point milieu, on a

$$|err| \leq h^2 \cdot (b-a) \cdot \frac{1}{24} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|;$$

pour la formule du trapèze

$$|err| \leq h^2 \cdot (b-a) \cdot \frac{1}{12} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|;$$

pour la formule de Simpson

$$|err| \leq h^4 \cdot (b-a) \cdot \frac{1}{2880} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|;$$

pour la formule de Newton-Cotes ($s = 5$)

$$|err| \leq h^6 \cdot (b-a) \cdot \frac{1}{1935360} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(6)}(x)|.$$

Le calcul de $\int_0^1 |N_p(\tau)|\,d\tau$ pour ces formules n'est pas difficile. Considérons par exemple la formule de Newton-Cotes ($s = 5$). On constate que $N_6(\tau)$ ne change pas de signe sur $[0,1]$ (voir fig. I.6) et on utilise la propriété (d) du théorème 2.2. Ceci donne

$$\int_0^1 |N_6(\tau)|\,d\tau = \Big|\int_0^1 N_6(\tau)\,d\tau\Big| = \frac{1}{6!}\Big|\frac{1}{7} - \Big(\frac{32}{90}\Big(\frac{1}{4}\Big)^6 + \frac{12}{90}\Big(\frac{1}{2}\Big)^6 + \frac{32}{90}\Big(\frac{3}{4}\Big)^6 + \frac{7}{90}1^6\Big)\Big| = \frac{1}{1935360}.$$

I.3 Superconvergence

Si l'on fixe les nœuds $c_1, \ldots, c_s$ (distincts), il existe une unique formule de quadrature (b_i, c_i) ayant un ordre $p \geq s$. On obtient les poids b_i soit par la résolution du système linéaire (1.6), soit par la formule de l'exercice 1.

Question. Y a-t-il un choix particulier des c_i permettant d'avoir un ordre supérieur?

Théorème 3.1 *Soit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ une formule de quadrature d'ordre $p \geq s$ et soit*

$$M(t) = (t - c_1) \cdot \ldots \cdot (t - c_s). \tag{3.1}$$

Alors, l'ordre est $\geq s + m$ si et seulement si

$$\int_0^1 M(t)g(t)\,dt = 0 \qquad \text{pour tout polynôme } g(t) \text{ de degré } \leq m - 1. \tag{3.2}$$

Démonstration. Soit $f(t)$ un polynôme de degré $s + m - 1$. L'idée, due à Jacobi (1826), est de diviser $f(t)$ par $M(t)$ et d'écrire $f(t)$ sous la forme

$$f(t) = M(t)g(t) + r(t)$$

où $\deg r \leq s-1$ et $\deg g \leq m-1$. Alors, l'intégrale exacte et l'approximation numérique satisfont

$$\int_0^1 f(t)\,dt = \int_0^1 M(t)g(t)\,dt + \int_0^1 r(t)\,dt$$
$$\sum_{i=1}^s b_i f(c_i) = \sum_{i=1}^s b_i \underbrace{M(c_i)}_{=0} g(c_i) + \sum_{i=1}^s b_i r(c_i).$$

Comme la formule de quadrature est exacte pour $r(t)$ (l'ordre est $\geq s$ par hypothèse), elle est exacte pour $f(t)$ si et seulement si $\int_0^1 M(t)g(t)\,dt = 0$. □

Exemple 3.2 Pour qu'une formule de quadrature à $s = 3$ étages ait un ordre ≥ 4, il faut que

$$0 = \int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3)\,dt = \frac{1}{4} - (c_1 + c_2 + c_3)\frac{1}{3} + (c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3)\frac{1}{2} - c_1c_2c_3,$$

ce qui est équivalent à

$$c_3 = \frac{1/4 - (c_1 + c_2)/3 + c_1c_2/2}{1/3 - (c_1 + c_2)/2 + c_1c_2}.$$

Corollaire 3.3 *Si p est l'ordre d'une formule de quadrature à s étages, alors*

$$p \leq 2s. \tag{3.3}$$

Démonstration. Supposons, par l'absurde, que l'ordre satisfasse $p \geq 2s+1$. Alors, l'intégrale dans (3.2) est nulle pour tout polynôme $g(t)$ de degré $\leq s$. Ceci contredit le fait que

$$\int_0^1 M(t)M(t)\,dt = \int_0^1 (t-c_1)^2 \cdot \ldots \cdot (t-c_s)^2\,dt > 0. \qquad \square$$

Pour construire une formule de quadrature d'ordre $2s$ (si elle existe), il faut trouver un polynôme $M(t)$ de degré s qui satisfasse (3.2) avec $m = s$. Ceci peut être réalisé à l'aide de polynômes orthogonaux, car la condition (3.2) signifie que $M(t)$ est orthogonal à tous les polynômes de degré $m-1$ pour le produit scalaire $\langle f, g\rangle = \int_0^1 f(t)g(t)\,dt$.

I.4 Polynômes orthogonaux

Nous nous mettons dans une situation un peu plus générale. Considérons une *fonction de poids* $\omega : (a,b) \to I\!R$ qui satisfasse les deux propriétés suivantes:

$$\omega(t) > 0 \qquad \text{pour} \qquad t \in (a,b) \tag{4.1}$$

$$\int_a^b \omega(t)|t|^k\,dt < \infty \qquad \text{pour} \qquad k = 0,1,2,\ldots \tag{4.2}$$

Des exemples typiques sont $\omega(t) = 1$ sur un intervalle borné, ou $\omega(t) = 1/\sqrt{1-t^2}$ sur $(-1,1)$, ou $\omega(t) = e^{-t}$ sur $(0,\infty)$.

Sur l'ensemble des polynômes (à coefficients réels), nous définissons un *produit scalaire* par

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b \omega(t) f(t) g(t)\,dt. \tag{4.3}$$

Les propriétés du produit scalaire (bilinéarité, symétrie et positivité) sont faciles à vérifier. A l'aide de ce produit scalaire, on peut parler d'orthogonalité. On dit que

$$f \quad \text{est orthogonal à} \quad g \qquad \Longleftrightarrow \qquad \langle f, g\rangle = 0. \tag{4.4}$$

Théorème 4.1 (existence et unicité des polynômes orthogonaux) *Il existe une suite de polynômes* $p_0, p_1, p_2, \ldots$ *telle que*

$$p_k(t) = t^k + \textit{ polynôme de degré } k-1 \qquad \text{(normalisation)}$$

$$\langle p_k, g\rangle = 0 \qquad \textit{pour tout polynôme de degré } \leq k-1. \qquad \text{(orthogonalité)}$$

Ces polynômes sont uniques et ils satisfont la formule de récurrence

$$\begin{aligned} p_{k+1}(t) &= (t-\beta_{k+1})\,p_k(t) - \gamma_{k+1}^2\,p_{k-1}(t) \\ p_{-1}(t) &= 0, \qquad p_0(t) = 1 \end{aligned} \tag{4.5}$$

où les coefficients β_{k+1}, γ_{k+1} *sont donnés par*

$$\beta_{k+1} = \frac{\langle tp_k, p_k\rangle}{\langle p_k, p_k\rangle}, \qquad \gamma_{k+1}^2 = \frac{\langle p_k, p_k\rangle}{\langle p_{k-1}, p_{k-1}\rangle}. \tag{4.6}$$

TAB. I.2 – *Polynômes orthogonaux*

notation	(a,b)	$\omega(t)$	nom	normalisation
$P_k(t)$	$(-1,1)$	1	Legendre	$P_k(1)=1$
$T_k(t)$	$(-1,1)$	$1/\sqrt{1-t^2}$	Chebyshev	$T_k(1)=1$
$P_k^{(\alpha,\beta)}(t)$	$(-1,1)$	$(1-t)^\alpha(1+t)^\beta$	Jacobi, $\alpha,\beta>-1$	$P_k^{(\alpha,\beta)}(1)=\binom{k+\alpha}{k}$
$L_k^{(\alpha)}(t)$	$(0,\infty)$	$t^\alpha e^{-t}$	Laguerre, $\alpha>-1$	$L_k^{(\alpha)}(0)=\binom{k+\alpha}{k}$
$H_k(t)$	$(-\infty,\infty)$	e^{-t^2}	Hermite	—

Démonstration. (Orthogonalisation de Gram-Schmidt). Le polynôme $p_0(t)=1$ satisfait les deux propriétés demandées. Supposons, par récurrence, qu'on connaisse déjà $p_0, p_1, \ldots, p_k$ et construisons le polynôme p_{k+1}. La normalisation choisie implique que $p_{k+1}(t)-tp_k(t)$ soit un polynôme de degré k, et on a

$$p_{k+1}(t) = tp_k(t) + \sum_{j=0}^{k} \alpha_j p_j(t), \tag{4.7}$$

car chaque polynôme de degré k peut être écrit comme une combinaison linéaire de $p_0, p_1, \ldots, p_k$. Il reste à montrer que l'orthogonalité détermine uniquement les α_j. Le produit scalaire de la formule (4.7) avec p_k donne

$$0 = \langle p_{k+1}, p_k\rangle = \langle tp_k, p_k\rangle + \alpha_k\langle p_k, p_k\rangle.$$

Cette relation nous permet de calculer α_k; on obtient $\alpha_k = -\beta_{k+1}$ avec β_{k+1} défini dans (4.6). Ensuite, nous prenons le produit scalaire de (4.7) avec p_{k-1}:

$$0 = \langle p_{k+1}, p_{k-1}\rangle = \langle tp_k, p_{k-1}\rangle + \alpha_{k-1}\langle p_{k-1}, p_{k-1}\rangle. \tag{4.8}$$

Nous reformulons $\langle tp_k, p_{k-1}\rangle$ comme suit

$$\langle tp_k, p_{k-1}\rangle = \langle p_k, tp_{k-1}\rangle = \langle p_k, p_k + \text{ pol. de degré } k-1\rangle = \langle p_k, p_k\rangle, \tag{4.9}$$

et nous insérons (4.9) dans (4.8) pour obtenir $\alpha_{k-1} = -\gamma_{k+1}^2$. Finalement, nous prenons le produit scalaire de (4.7) avec p_i où $i \in \{0,1,\ldots,k-2\}$

$$0 = \langle p_{k+1}, p_i\rangle = \underbrace{\langle tp_k, p_i\rangle}_{\langle p_k, tp_i\rangle = 0} + \alpha_i\langle p_i, p_i\rangle$$

et nous en déduisons que $\alpha_i = 0$. Avec les valeurs de α_i ainsi trouvées, la formule (4.7) devient la récurrence (4.5).

Cette construction des α_i ne nous laisse pas d'autre choix, d'où l'unicité de $p_{k+1}(t)$. □

Les fonctions de poids et les intervalles considérés pour quelques polynômes orthogonaux importants sont présentés dans le tableau I.2. Souvent, on utilise une autre normalisation (voir dernière colonne) que celle du théorème 4.1.

Les polynômes du théorème 4.1 vont jouer le rôle de $M(t)$ dans (3.2). Nous sommes fort intéressés à trouver de tels polynômes ayant uniquement des racines réelles.

Théorème 4.2 *Soit $p_k(t)$ un polynôme de degré k orthogonal à tous les polynômes de degré $k-1$. Alors, toutes les racines de $p_k(t)$ sont réelles, simples et dans l'intervalle ouvert (a,b).*

Démonstration. Notons par $t_1, \ldots, t_r$ les racines de $p_k(t)$ qui sont réelles, dans (a,b) et où $p_k(t)$ change de signe (voir la fig. I.7).

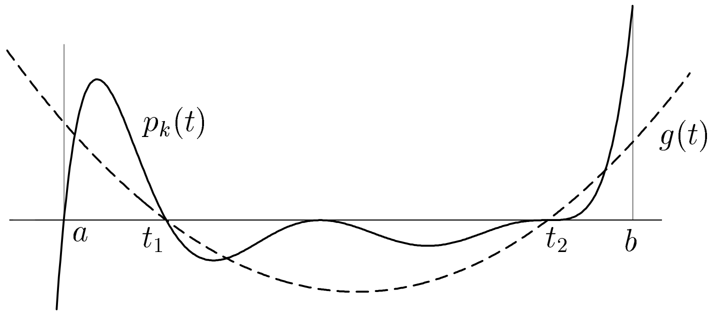


FIG. I.7 – *Illustration de la démonstration du théorème 4.2*

Le but est de montrer $r = k$. Supposons, par l'absurde, que $r < k$. Avec le polynôme $g(t) = (t-t_1) \cdot \ldots \cdot (t-t_r)$ de degré $r < k$, on a

$$0 \neq \int_a^b \underbrace{\omega(t)}_{>0} \quad \underbrace{p_k(t)\;\; g(t)}_{\substack{\text{ne change pas} \\ \text{de signe sur } (a,b)}} \quad dt = \langle p_k, g \rangle = 0,$$

d'où la contradiction. □

Théorème 4.3 (formule de Rodrigues) *Les polynômes orthogonaux du théorème 4.1 satisfont*

$$p_k(t) = C_k \cdot \frac{1}{\omega(t)} \cdot \frac{d^k}{dt^k}\Big(\omega(t)(t-a)^k(b-t)^k\Big), \tag{4.10}$$

si la partie droite de (4.10) est un polynôme de degré k. La constante C_k est déterminée par la normalisation de p_k.

Démonstration. Soit $g(t)$ un polynôme de degré $\leq k-1$. Il suffit de montrer que le polynôme, défini par (4.10), satisfait $\langle p_k, g \rangle = 0$. Plusieurs intégrations par parties donnent

$$\begin{aligned}
\langle p_k, g \rangle &= C_k \int_a^b \omega(t) \cdot \frac{1}{\omega(t)} \cdot \frac{d^k}{dt^k}\Big(\ldots\Big) \cdot g(t)\, dt \\
&= \underbrace{C_k \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}}\Big(\ldots\Big) \cdot g(t)\Big|_a^b}_{=0} - C_k \int_a^b \frac{d^{k-1}}{dt^{k-1}}\Big(\ldots\Big) \cdot g'(t)\, dt \\
&= \ldots = (-1)^k \cdot C_k \int_a^b \Big(\ldots\Big) \cdot g^{(k)}(t)\, dt = 0,
\end{aligned}$$

ce qui montre l'affirmation. □

Polynômes de Legendre $P_k(t)$. On considère l'intervalle $(-1, 1)$ et la fonction de poids $\omega(t) = 1$. Au lieu de supposer que le coefficient le plus haut de $P_k(t)$ soit 1 (voir le théorème 4.1), on demande que $P_k(1) = 1$ (voir le tableau I.2). Comme

$$\frac{d^k}{dt^k}\Big((1+t)^k(1-t)^k\Big)\Big|_{t=1} = (-1)^k \cdot k! \cdot 2^k,$$

la formule (4.10) pour $t = 1$ donne $1 = C_k \cdot (-1)^k \cdot k! \cdot 2^k$. Par conséquent, les polynômes de Legendre sont donnés par

$$P_k(t) = \frac{(-1)^k}{k! \cdot 2^k} \cdot \frac{d^k}{dt^k}\Big((1+t)^k(1-t)^k\Big). \tag{4.11}$$

Les premiers de ces polynômes sont

$$P_0(t) = 1, \qquad P_1(t) = t, \qquad P_2(t) = \frac{3}{2}t^2 - \frac{1}{2}, \qquad P_3(t) = \frac{5}{2}t^3 - \frac{3}{2}t. \tag{4.12}$$

Ils sont dessinés dans la fig. I.8.

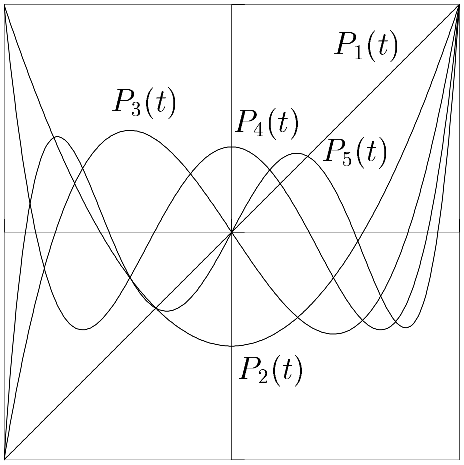


FIG. I.8 – *Polynômes de Legendre*

Une conséquence de $(1+t)^k(1-t)^k = (1-t^2)^k$ est que

$$\begin{aligned} P_k(t) &= P_k(-t) && \text{si } k \text{ est pair} \\ P_k(t) &= -P_k(-t) && \text{si } k \text{ est impair.} \end{aligned} \tag{4.13}$$

I.5 Formules de quadrature de Gauss

Dans ce paragraphe, nous construisons des formules de quadrature avec un ordre $p = 2s$. Selon le théorème 4.1, il existe un unique polynôme $M(t)$ de degré s qui soit orthogonal à tous les polynômes de degré $\leq s - 1$, c.-à-d.,

$$\int_0^1 M(t)g(t)\,dt = 0 \qquad \text{si} \quad \deg g \leq s - 1.$$

Ce polynôme est donné par

$$M(t) = C \cdot P_s(2t - 1), \tag{5.1}$$

où $P_s(x)$ est le $s^{\text{ème}}$ polynôme de Legendre, car

$$\int_0^1 P_s(2t-1)g(t)\,dt = \frac{1}{2}\int_{-1}^1 P_s(x)g((x+1)/2)\,dx = 0.$$

Toutes les racines de $P_s(2t-1)$ sont réelles et situées dans l'intervalle $(0,1)$ (théorème 4.2). Alors, le théorème 3.1 nous donne le résultat suivant.

Théorème 5.1 *Il existe une formule de quadrature unique d'ordre $2s$. Elle est donnée par:*
$c_1,\ldots,c_s$ *sont les racines de $P_s(2t-1)$;*
$b_1,\ldots,b_s$ *sont donnés par (1.6).* □

Exemple 5.2 (formules de Gauss) Les formules de quadrature du théorème précédent s'appellent *formules de Gauss*. Pour de petites valeurs de s, elles sont faciles à obtenir: il suffit de calculer les racines de (4.12) et de résoudre le système (1.6) tout en exploitant la symétrie de la formule. Pour $s \le 3$, on obtient ainsi:

$$
\begin{array}{lll}
s=1: & \displaystyle\int_0^1 g(t)\,dt \;\approx\; g\Big(\frac{1}{2}\Big) & \text{(formule du point milieu)} \\
s=2: & \displaystyle\int_0^1 g(t)\,dt \;\approx\; \frac{1}{2}g\Big(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{3}}{6}\Big)+\frac{1}{2}g\Big(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{3}}{6}\Big) & \\
s=3: & \displaystyle\int_0^1 g(t)\,dt \;\approx\; \frac{5}{18}g\Big(\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{15}}{10}\Big)+\frac{8}{18}g\Big(\frac{1}{2}\Big)+\frac{5}{18}g\Big(\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{15}}{10}\Big) &
\end{array}
$$

Si s est grand (disons $s \ge 10$), le calcul exact des racines de $P_s(x)$ n'est pas toujours possible et la résolution exacte du système (1.6) peut poser des problèmes. Décrivons alors leur calcul pratique.

Calcul de nœuds. En utilisant la formule de récurrence

$$(k+1)\,P_{k+1}(x) = (2k+1)\,x\,P_k(x) - k\,P_{k-1}(x), \tag{5.2}$$

(exercice 11) on peut facilement calculer la valeur de $P_s(x)$ pour un x donné. Le calcul des racines $\gamma_1,\ldots,\gamma_s$ du polynôme $P_s(x)$ peut alors être fait par bissection (voir exercice ??? 12), et on obtient les nœuds de la formule de Gauss à l'aide de $c_i = (1+\gamma_i)/2$.

Calcul de poids. Au lieu de résoudre le système (1.6), on peut aussi utiliser la formule explicite

$$b_i = \frac{1}{(1-\gamma_i^2)\big(P_s'(\gamma_i)\big)^2} = \frac{1-\gamma_i^2}{s^2\big(P_{s-1}(\gamma_i)\big)^2}, \tag{5.3}$$

qui est donnée ici sans démonstration[2]. La deuxième identité de (5.3) est une conséquence de l'exercice 11.

Théorème 5.3 *Une formule de quadrature a l'ordre $p \ge 2s-k$ (avec $1 \le k \le s$) si et seulement si les nœuds $c_1,\ldots,c_s$ sont les racines de*

$$M(t) = \alpha_0 P_s(2t-1) + \alpha_1 P_{s-1}(2t-1) + \ldots + \alpha_k P_{s-k}(2t-1) \tag{5.4}$$

(avec des nombres réels $\alpha_0,\ldots,\alpha_k$, $\alpha_0 \ne 0$) et si les poids $b_1,\ldots,b_s$ sont donnés par (1.6).

2. voir M. Abramowitz & I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ., page 887

Démonstration. Écrivons le polynôme $M(t) = (t - c_1) \cdot \ldots \cdot (t - c_s)$ sous la forme

$$M(t) = \alpha_0 P_s(2t-1) + \sum_{i=1}^{s} \alpha_i P_{s-i}(2t-1).$$

D'après le théorème 3.1, la formule de quadrature a l'order $s + (s - k)$ si et seulement si $M(t)$ est orthogonal aux polynômes de degré $s - k - 1$. Ceci est le cas si $\alpha_{k+1} = \ldots = \alpha_s = 0$, ce qui démontre (5.4). □

Exemple 5.4 (formules de Lobatto) Si $c_1, \ldots, c_s$ sont les racines de

$$M(t) = P_s(2t-1) - P_{s-2}(2t-1), \tag{5.5}$$

on obtient une formule de quadrature d'ordre $2s - 2$. Elle s'appelle *formule de Lobatto*. A cause de $P_k(1) = 1$ et de $P_k(-1) = (-1)^k$, on a $c_1 = 0$ et $c_s = 1$. Des cas particuliers sont la formule du trapèze ($s = 2$) et la formule de Simpson ($s = 3$). Pour $s = 4$, on obtient

$$\int_0^1 g(t)\,dt \;\approx\; \frac{1}{12}g(0) + \frac{5}{12}g\Big(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{5}}{10}\Big) + \frac{5}{12}g\Big(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{10}\Big) + \frac{1}{12}g(1).$$

Etudions encore la *positivité* de l'approximation numérique obtenue par une formule de quadrature. On sait que l'intégrale exacte satisfait

$$g(t) \geq 0 \quad \text{sur } (0,1) \qquad \Longrightarrow \qquad \int_0^1 g(t)\,dt \geq 0. \tag{5.6}$$

L'analogue numérique

$$g(t) \geq 0 \quad \text{sur } (0,1) \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{i=1}^{s} b_i g(c_i) \geq 0 \tag{5.7}$$

est vrai pour toute fonction $g(t)$ si et seulement si

$$b_i > 0 \qquad i = 1, \ldots, s \tag{5.8}$$

(on ne considère pas de formule de quadrature ayant des poids nuls).

Théorème 5.5 *Pour une formule de quadrature d'ordre $\geq 2s - 1$ (s étant le nombre d'étages), les poids b_i satisfont (5.8).*

Démonstration. Considérons le polynôme de degré $s - 1$

$$\ell_i(t) = \prod_{j \neq i} \frac{(t - c_j)}{(c_i - c_j)}$$

et intégrons son carré par la formule de quadrature. On obtient

$$b_i = \sum_{j=1}^{s} b_j \ell_i^2(c_j) = \int_0^1 \ell_i^2(t)\,dt > 0,$$

car la formule de quadrature est exacte pour $\ell_i^2(t)$. □

Remarque. Les formules de Gauss satisfont (5.8) pour tout s. Les formules de Newton-Cotes (voir le paragraphe I.1) ne satisfont (5.8) que pour $s \leq 8$ et pour $s = 10$.

I.6 Un programme adaptatif – TEGRAL

Posons-nous le problème d'écrire un programme

FUNCTION TEGRAL (FCN, A, B, TOL)

qui, pour une fonction $f : [a, b] \to I\!\!R$ donnée, calcule la valeur de $\int_a^b f(x)\,dx$ à une précision relative de TOL. Si l'on fixe la formule de quadrature (par exemple la formule de Gauss d'ordre 30 avec $s = 15$), il faut trouver une division $\Delta = \{a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b\}$ de l'intervalle (a, b) afin que l'approximation numérique I_Δ satisfasse

$$\Big| I_\Delta - \int_a^b f(x)\,dx \Big| \leq \text{TOL} \cdot \int_a^b |f(x)|\,dx. \tag{6.1}$$

Pour une fonction f ne changeant pas de signe sur (a, b), la condition (6.1) signifie que *l'erreur relative* est bornée par TOL. On a mis la valeur absolue sous l'intégrale de droite pour éviter des ennuis dans le cas où $\int_a^b f(x)\,dx$ est très petit ou nul.

Pour écrire un tel programme, on est confronté aux deux problèmes suivants:

- choix de la division pour que (6.1) soit satisfait;
- estimation de l'erreur $I_\Delta - \int_a^b f(x)\,dx$.

Détermination de la division. Pour un sous-intervalle $(x_0, x_0 + h)$ de (a, b), on sait calculer les valeurs

$$\textit{res}\,(x_0, x_0 + h) = h \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0 + c_i h), \tag{6.2}$$

$$\textit{resabs}\,(x_0, x_0 + h) = h \sum_{i=1}^{s} b_i |f(x_0 + c_i h)|. \tag{6.3}$$

Supposons, pour le moment, qu'on connaisse aussi une estimation de l'erreur

$$\textit{err}\,(x_0, x_0 + h) \approx \textit{res}\,(x_0, x_0 + h) - \int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,dx. \tag{6.4}$$

L'algorithme pour trouver une division convenable est le suivant:

i) on calcule *res* (a, b), *resabs* (a, b) et *err* (a, b). Si

$$|\textit{err}\,(a, b)| \leq \text{TOL} \cdot \textit{resabs}\,(a, b),$$

on accepte *res* (a, b) comme approximation de $\int_a^b f(x)\,dx$ et on arrête le calcul; sinon

ii) on subdivise (a, b) en deux sous-intervalles $I_1 = (a, (a + b)/2)$ et $I_2 = ((a + b)/2, b)$ et on calcule *res* (I_1), *resabs* (I_1), *err* (I_1) et *res* (I_2), *resabs* (I_2), *err* (I_2). On pose $N = 2$ et on regarde si

$$\sum_{j=1}^{N} |\textit{err}\,(I_j)| \leq \text{TOL} \cdot \Big(\sum_{j=1}^{N} \textit{resabs}\,(I_j) \Big). \tag{6.5}$$

Si (6.5) est vérifié, on accepte *res* (I_1) + *res* (I_2) comme approximation de $\int_a^b f(x)\,dx$; sinon

iii) on pose $N := N+1$ et on *subdivise l'intervalle où l'erreur est maximale* (disons I_k) en deux sous-intervalles équidistants qu'on denote par I_k et I_{N+1}. Ensuite, on calcule *res*, *resabs* et *err* pour ces deux intervalles. Si (6.5) est vérifié, on arrête le calcul et on accepte

$$\sum_{j=1}^{N} \mathit{res}\,(I_j) \approx \int_a^b f(x)\,dx \tag{6.6}$$

comme approximation de l'intégrale; sinon on répète la partie (iii) de cet algorithme.

Estimation de l'erreur (6.4). Malheureusement, les formules pour l'erreur, obtenues dans le paragraphe I.2, ne sont pas très utiles pour un programme général, car on ne connaît que très rarement la $p^{\text{ème}}$ dérivée de la fonction $f(x)$ (dans notre situation $p=30$).

L'idée est d'appliquer une deuxième formule de quadrature $(\widehat{b}_i, \widehat{c}_i)_{i=1}^{\widehat{s}}$ et d'utiliser la différence de deux approximations numériques comme estimation de l'erreur du moins bon résultat. Pour que le travail supplémentaire soit négligeable, on suppose $\widehat{s} \le s$ et on reprend les mêmes évaluations de f, c.-à-d., on suppose $\widehat{c}_i = c_i$ pour tous i. Une telle formule de quadrature s'appelle *formule emboîtée*, si pour au moins un indice i on a $\widehat{b}_i \neq b_i$.

Remarque. Si $(b_i, c_i)_{i=1}^{s}$ est une formule de quadrature d'ordre $p \ge s$, l'ordre d'une formule emboîtée est $\widehat{p} \le s-1$. Ce résultat découle du fait que, pour une formule de quadrature d'ordre $\ge s$, les poids b_i sont uniquement déterminés par ses nœuds c_i.

Pour la formule de Gauss ($s = 15$, $p = 30$), on obtient une formule emboîtée $(\widehat{b}_i, c_i)_{i=1}^{s}$ d'ordre 14 en enlevant le point milieu $c_8 = 1/2$ (voir fig. I.9), c.-à-d., on pose $\widehat{b}_8 = 0$. L'expression calculable

$$\text{ERR1} := h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0+c_ih) - h\sum_{i=1}^{s} \widehat{b}_i f(x_0+c_ih) \approx C_1 h^{15} \tag{6.7}$$

est une approximation de l'erreur de la formule emboîtée, car

$$\text{ERR1} = \underbrace{\Big(h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0+c_ih) - \int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,dx\Big)}_{=\,Ch^{31}+\mathcal{O}(h^{32})} + \underbrace{\Big(\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,dx - h\sum_{i=1}^{s} \widehat{b}_i f(x_0+c_ih)\Big)}_{=\,Ch^{15}+\mathcal{O}(h^{16})}.$$

Pour le programme TEGRAL, on considère encore une deuxième formule emboîtée qui a pour nœuds $\{c_2, c_4, c_6, c_{10}, c_{12}, c_{14}\}$ et un ordre 6 (voir la fig. I.9). On dénote les poids de cette formule de quadrature par $\widehat{\widehat{b}}_i$ et on définit

$$\text{ERR2} := h\sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0+c_ih) - h\sum_{i=1}^{s} \widehat{\widehat{b}}_i f(x_0+c_ih) \approx C_2 h^{7}. \tag{6.8}$$

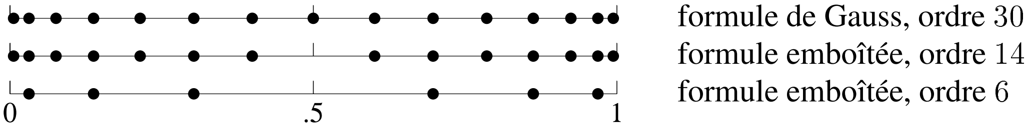


FIG. I.9 – *Formule de Gauss et ses formules emboîtées*

Il y a plusieurs possibilités pour définir $\mathit{err}\,(x_0, x_0+h)$.

– i) $\mathit{err}\,(x_0, x_0+h) :=$ ERR1; cette estimation est trop pessimiste. En général, la formule de Gauss donne un résultat largement meilleur que la formule emboîtée d'ordre 14.

– ii) dans le programme TEGRAL, on a choisi l'approximation

$$\textit{err}\,(x_0, x_0 + h) := \text{ERR1} \cdot \Big(\frac{\text{ERR1}}{\text{ERR2}}\Big)^2, \qquad\qquad \Big(\approx h^{15} \cdot \Big(\frac{h^{15}}{h^7}\Big)^2 \approx h^{31}\Big)$$

ce qui donne de bons résultats.

Exemples. 1) Si l'on applique le programme TEGRAL avec TOL $= 10^{-10}$ à la fonction de la fig. I.1, on obtient le résultat avec une erreur de $2.0 \cdot 10^{-14}$. La division choisie est donnée dans la fig. I.10.

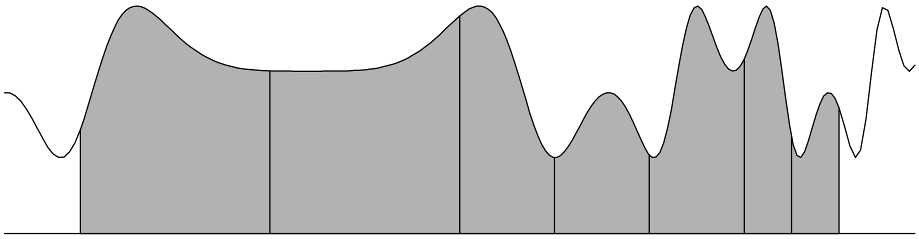


FIG. I.10 – *Division choisie par TEGRAL pour* $f(x) = 2 + \sin(3\cos(0.002(x-40)^2))$ *sur* $(10, 110)$

2) Appliquons le même programme à la fonction

$$f(x) = \sqrt{x} \cdot \log x \qquad\quad \text{sur} \quad (0, 1), \tag{6.9}$$

qui a une singularité au point 0 dans la dérivée. Les divisions successives de l'intervalle par l'algorithme sont présentées dans la fig. I.11. On voit que l'intervalle où l'erreur est maximale est toujours celui qui est tout à gauche. Les erreurs sont données dans le tableau I.3. La convergence est très lente et on se demande s'il n'y a pas de possibilité d'accélérer la convergence de la suite $\{S_N\}$.

TAB. I.3 – *Résultat de TEGRAL pour (6.9)*

N	S_N	$err_N = S_N - \int_0^1 f(x)\,dx$	err_N/err_{N-1}
1	-0.4446200164956040	$-0.176 \cdot 10^{-03}$	—
2	-0.4445133092592463	$-0.689 \cdot 10^{-04}$	0.392
3	-0.4444711927155809	$-0.267 \cdot 10^{-04}$	0.388
4	-0.4444547502264998	$-0.103 \cdot 10^{-04}$	0.385
5	-0.4444483881989293	$-0.394 \cdot 10^{-05}$	0.383
6	-0.4444459448772271	$-0.150 \cdot 10^{-05}$	0.380
.	$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
21	-0.4444444444449658	$-0.521 \cdot 10^{-12}$	0.366
22	-0.4444444444446352	$-0.191 \cdot 10^{-12}$	0.366

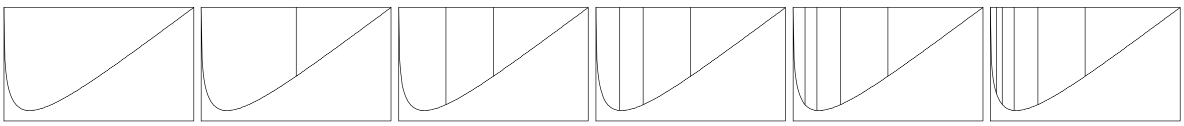


FIG. I.11 – *Division choisie par TEGRAL pour (6.9)*

I.7 L'epsilon-algorithme

Etant donnée une suite $\{S_0, S_1, S_2, \ldots\}$ qui converge lentement vers la valeur S. Le but est de trouver une autre suite avec la même limite, mais qui converge plus rapidement.

Souvent, on peut observer que la suite satisfait

$$S_{n+1} - S \approx \rho \cdot (S_n - S), \tag{7.1}$$

ou de façon équivalente

$$S_n \approx S + C \cdot \rho^n. \tag{7.2}$$

Par exemple, la suite S_n du tableau I.3 satisfait approximativement (7.1) avec $\rho = 0.366$. Un autre exemple fréquent est donné par la méthode des approximations successives $S_{n+1} = g(S_n)$ pour calculer un point fixe de $g(x)$, c.-à-d. un S satisfaisant $S = g(S)$. Si g est différentiable,

$$S_{n+1} - S = g(S_n) - g(S) \approx g'(S) \cdot (S_n - S).$$

Ceci est (7.1) avec $\rho = g'(S)$.

Le procédé Δ^2 d'Aitken (1926). L'idée est de remplacer "≈" par "=" dans (7.2) et de calculer ρ, C et S de trois formules consécutives. Avec la notation

$$\Delta S_n := S_{n+1} - S_n \qquad \text{(différence finie)}, \tag{7.3}$$

on obtient alors

$$\Delta S_n = C\rho^n(\rho - 1), \qquad \Delta S_{n+1} = C\rho^{n+1}(\rho - 1), \qquad \Delta^2 S_n = C\rho^n(\rho - 1)^2,$$

où $\Delta^2 S_n = \Delta(\Delta S_n) = \Delta S_{n+1} - \Delta S_n = S_{n+2} - 2S_{n+1} + S_n$ est la deuxième différence finie. On en déduit que

$$S = S_{n+1} - C\rho^{n+1} = S_{n+1} - \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta^2 S_n}. \tag{7.4}$$

Si (7.2) n'est pas satisfait exactement, la valeur de S dans (7.4) va dépendre de n. On obtient ainsi une autre suite $\{S_n'\}$ définie par (procédé Δ^2 d'Aitken)

$$S_n' = S_{n+1} - \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta^2 S_n}, \tag{7.5}$$

qui, en général, converge plus rapidement vers S que la suite originale $\{S_n\}$.

Exemple. Pour la suite $\{S_n\}$ du tableau I.3, le résultat est donné dans le tableau I.4.

TAB. I.4 – *Accélération de la convergence pour $\{S_n\}$ du tableau I.3*

n	S_n	S_n'	S_n''
1	-0.44462001649560	-0.44444373050429	-0.44444444444445
2	-0.44451330925925	-0.44444421992844	-0.44444444444444
3	-0.44447119271558	-0.44444437296661	-0.44444444444444
4	-0.44445475022650	-0.44444442146079	-0.44444444444444
5	-0.44444838819893	-0.44444443699301	-0.44444444444444
6	-0.44444594487723	-0.44444444201188	-0.44444444444444

Pour généraliser l'idée d'Aitken, on considère une suite $\{S_n\}$ pour laquelle on suppose, au lieu de (7.2),

$$S_n \approx S + C_1 \cdot \rho_1^n + C_2 \cdot \rho_2^n. \tag{7.6}$$

Cette fois, on a 5 paramètres à déterminer. Alors, on prend 5 formules consécutives de (7.6), on suppose égalité, et on calcule $S, C_1, \rho_1, C_2, \rho_2$. La valeur de S ainsi obtenue est dénotée par S_n''. Shanks (1955) a fait ce calcul et il a trouvé la formule (nous ajoutons une formule semblable pour S_n')

$$S_n' = \frac{\det\begin{pmatrix} S_n & S_{n+1} \\ S_{n+1} & S_{n+2} \end{pmatrix}}{\Delta^2 S_n}, \qquad S_n'' = \frac{\det\begin{pmatrix} S_n & S_{n+1} & S_{n+2} \\ S_{n+1} & S_{n+2} & S_{n+3} \\ S_{n+2} & S_{n+3} & S_{n+4} \end{pmatrix}}{\det\begin{pmatrix} \Delta^2 S_n & \Delta^2 S_{n+1} \\ \Delta^2 S_{n+1} & \Delta^2 S_{n+2} \end{pmatrix}}$$

(sans démonstration). Mais, pour un calcul numérique, ces formules ne sont pas très pratiques. Wynn (1956) a trouvé une formule beaucoup plus simple:

Théorème 7.1 (ϵ-algorithme) *Etant donnée la suite $\{S_0, S_1, S_2, \ldots\}$. Si l'on définit $\epsilon_k^{(n)}$ par*

$$\begin{aligned} &\epsilon_{-1}^{(n)} = 0, \qquad \epsilon_0^{(n)} = S_n, \\ &\epsilon_{k+1}^{(n)} = \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + \frac{1}{\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}}, \qquad k \geq 0,\ n \geq 0, \end{aligned} \tag{7.7}$$

alors, $\epsilon_2^{(n)} = S_n'$, $\epsilon_4^{(n)} = S_n''$, $\epsilon_6^{(n)} = S_n'''$, ...

La démonstration de $\epsilon_2^{(n)} = S_n'$ se fait par un simple calcul de $\epsilon_1^{(n)}$ et de $\epsilon_2^{(n)}$:

$$\begin{aligned} \epsilon_1^{(n)} &= 0 + \frac{1}{S_{n+1} - S_n} = \frac{1}{\Delta S_n}, \\ \epsilon_2^{(n)} &= S_{n+1} + \frac{1}{\dfrac{1}{\Delta S_{n+1}} - \dfrac{1}{\Delta S_n}} = S_{n+1} + \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta S_n - \Delta S_{n+1}} = S_n'. \end{aligned}$$

Le cas général est moins évident et est donné sans démonstration. Tous les détails (démonstration et autres propriétés) sont donnés dans un livre de Brezinski[3].

Exemple. Pour la suite

$$S_n = \sum_{i=1}^{n} \frac{(-1)^{i+1}}{i}, \tag{7.8}$$

qui converge vers $\log(2)$, les erreurs de $\epsilon_k^{(n)}$, $k = 0, 2, 4, 6, \ldots$ sont données dans la fig. I.12. L'amélioration de la convergence par l'ϵ-algorithme se voit clairement.

3. C. Brezinski (1977): *Accélération de la Convergence en Analyse Numérique.* Lecture Notes in Mathematics, Nr. 584, Springer-Verlag. [MA 00.04/3 584]

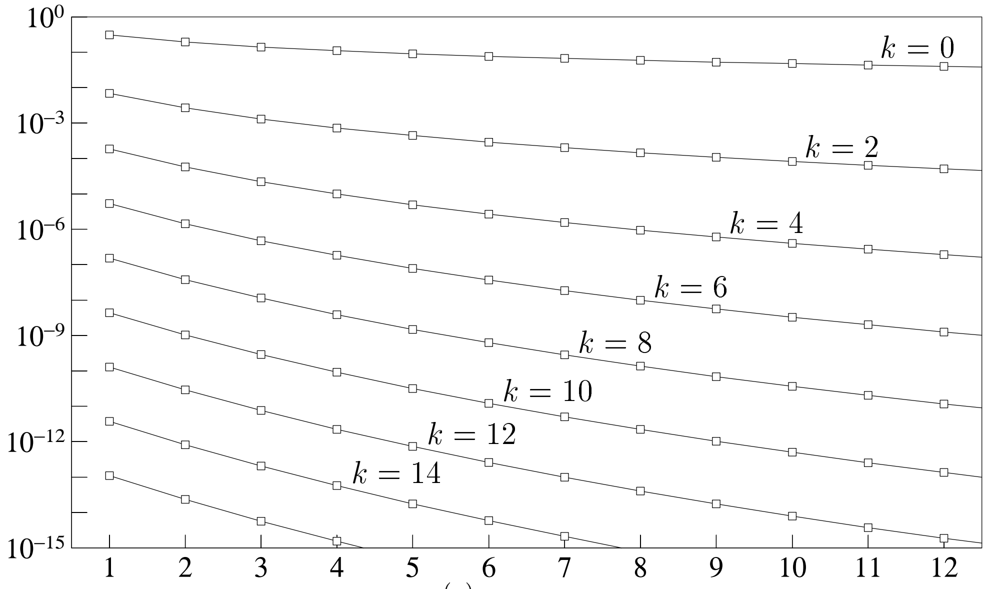


FIG. I.12 – *Erreur de $\epsilon_k^{(n)}$ en fonction de n pour la suite (7.8)*

I.8 Exercices

1. Soit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ une formule de quadrature d'ordre $\geq s$. Montrer que

$$b_i = \int_0^1 \ell_i(x)\, dx \qquad \text{où} \qquad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{s} \frac{(x - c_j)}{(c_i - c_j)}.$$

2. Si les nœuds d'une formule de quadrature satisfont $c_i = 1 - c_{s+1-i}$ (pour tous i) et si la formule a un ordre $p \geq s$, alors on a nécessairement $b_i = b_{s+1-i}$, c'est-à-dire la formule est symétrique.

3. Calculer les formules de Newton-Cotes pour

$$(c_i) = (0, 1/3, 2/3, 1), \qquad (c_i) = (0, 1/4, 2/4, 3/4, 1)$$

   et déterminer l'ordre de ces formules de quadrature.
   Indication. Les calculs se simplifient en utilisant l'exercice 2.

4. Calculer la constante d'erreur pour la formule de Simpson et de Newton. Expliquer pourquoi, malgré le fait que la méthode de Newton possède une constante d'erreur plus petite, la méthode de Simpson est meilleure si on compare l'erreur avec le travail *fe* (voir la fig. I.3).

5. Calculer les noyaux de Peano $N_k(\tau)$ $(k = 1, 2)$ pour la règle du trapèze et les dessiner. Remarquer une relation avec les polynômes de Bernoulli et la formule d'Euler-Maclaurin.[4]

6. Montrer que, pour une formule de quadrature symétrique, les noyaux de Peano satisfont

$$N_k(1 - \tau) = (-1)^k N_k(\tau).$$

7. Calculer les noyaux de Peano $N_k(\tau)$ $(k = 1, 2, 3, 4)$ pour la formule de Simpson. Les dessiner. Est-ce que $N_4(\tau)$ change de signe sur l'intervalle $[0, 1]$?

8. Soit p l'ordre d'une formule de quadrature et supposons que le noyau de Peano $N_p(\tau)$ ne change pas de signe sur $[0, 1]$. Montrer qu'avec un $\xi \in (x_0, x_0 + h)$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\, dx - h \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_0 + c_i h) = \frac{h^{p+1}}{p!} \Big(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^{s} b_i c_i^p \Big) f^{(p)}(\xi).$$

4. Hairer & Wanner, *Analysis by Its History*, Undergraduate Texts in Mathematics, Springer, 2nd printing 1997.

9. (Formule de Radau). Déterminer c_2, b_1, b_2 dans la formule de quadrature

$$\int_0^1 g(t)\,dt \approx b_1 g(0) + b_2 g(c_2)$$

afin que son ordre soit maximal.
Résultat. $c_2 = 2/3$, $b_1 = 1/4$, $b_2 = 3/4$ et $p = 3$.

10. Calculer la formule de quadrature de Gauss avec $s = 3$. Le résultat est donné dans l'exemple 5.2.

11. Pour les *polynômes de Legendre* démontrer les formules

$$(k+1)P_{k+1}(x) = (2k+1)xP_k(x) - kP_{k-1}(x), \tag{8.1}$$
$$(1-x^2)P_k'(x) = -kxP_k(x) + kP_{k-1}(x). \tag{8.2}$$

Indication. Pour (8.1), écrire $xP_k(x)$ comme combinaison linéaire de $P_0(x), \ldots, P_{k+1}(x)$ et utiliser l'orthogonalité de ces polynômes pour déterminer les coefficients qui multiplient $P_0(x), \ldots, P_{k-2}(x)$. Pour trouver les trois derniers coefficients, utiliser les valeurs de $P_j(1), P_j(-1)$ ainsi que le coefficient du terme dominant de $P_j(x)$.

12. Calculer pour $n = 1, 2, 3, \ldots$ les racines du polynôme de Legendre $P_n(x)$ en utilisant la *méthode de bissection*.

   (a) Localiser les racines de $P_n(x)$ en utilisant celles de $P_{n-1}(x)$ (les racines de $P_n(x)$ sont séparées par les racines de $P_{n-1}(x)$);

   (b) Si $[a, b]$ est un intervalle avec $P_n(a) \cdot P_n(b) < 0$ alors

```
10    CENTR=(A+B)/2.D0
      PC=P(N,CENTR)
      IF (CENTR.EQ.A.OR.CENTR.EQ.B) GOTO 40
      IF (PA*PC.LT.0.D0) THEN
          B=CENTR
          PB=PC
      ELSE
          A=CENTR
          PA=PC
      END IF
      GOTO 10
40    CONTINUE
      WRITE (6,*) CENTR,PC
```

   Pour écrire la `FUNCTION P(N,X)` qui calcule la valeur de la fonction $P_n(x)$, utiliser la formule de récurrence (1) et $P_0(x) = 1$, $P_1(x) = x$.

13. Calculer la constante d'erreur C_s pour la formule de Gauss avec s nœuds d'ordre $2s$.
Indication. C_s est l'erreur de la formule quand elle est appliquée à un polynôme de degré $2s$ de la forme $t^{2s}/(2s)! + \ldots$. Essayer $K \cdot P_s(2t-1))^2$, et utiliser la formule de récurrence de l'exercice 11 pour evaluer $\int_{-1}^{1} P_s(x)^2\,dx$. Le résultat est

$$C_s = \frac{(s!)^4}{(2s+1)(2s!)^3}.$$

14. Montrer que pour les formules de quadrature de Gauss (ordre $p = 2s$) le noyau de Peano $N_{2s}(\tau)$ ne change pas de signe.
Indication. Faire une démonstration par l'absurde et utiliser le théorème de Rolle.

15. Soient $c_1^{(s)}, c_2^{(s)}, \ldots, c_s^{(s)}$ les nœuds de la formule de quadrature de Gauss d'ordre $2s$ et $c_1^{(s+1)}, c_2^{(s+1)}$, …, $c_{s+1}^{(s+1)}$ ceux de la formule d'ordre $2s+2$. Montrer qu'on a alors
$$0 < c_1^{(s+1)} < c_1^{(s)} < c_2^{(s+1)} < c_2^{(s)} < \ldots < c_s^{(s)} < c_{s+1}^{(s+1)} < 1.$$
Indication. Procéder par récurrence en utilisant le fait que si $P_s(x) = 0$, alors $P_{s-1}(x)$ et $P_{s+1}(x)$ sont de signe opposé (voir formule (8.1).

16. (Formules de Radau). Montrer qu'il existe une unique formule de quadrature d'ordre $2s-1$ qui satisfait $c_s = 1$.
Indication. Vérifier d'abord que
$$(1-x)P_{s-1}^{(1,0)}(x) = Const \cdot (P_s(x) - P_{s-1}(x))$$
où $P_{s-1}^{(1,0)}(x)$ est le polynôme de Jacobi. Cette relation est utile pour montrer que toutes les racines de $P_s(x) - P_{s-1}(x)$ sont réelles et simples.

17. Considérons une formule de quadrature d'ordre $p \geq 1$ satisfaisant $0 \leq c_i \leq 1$. Montrer que, pour toute fonction $f : [a,b] \to I\!R$ intégrable au sens de Riemann, on a
$$\Big| \int_a^b f(x)\,dx - \sum_{j=0}^{N} h_j \sum_{i=1}^{s} b_i f(x_j + c_i h_j) \Big| \longrightarrow 0$$
lorsque $h = \max_j h_j$ tend vers zéro.
Indication. Pour un i fixé, l'expression $\sum_{j=0}^{N} h_j f(x_j + c_i h_j)$ est une somme de Riemann.

18. Soit $f : I\!R \to I\!R$, donnée par
$$f(x) = a_0 + \sum_{k=1}^{m} (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)), \qquad a_k, b_k \in I\!R.$$
    (a) Quelle est la valeur exacte de $\int_0^{2\pi} f(x)\,dx$?
    (b) Appliquer la règle du trapèze à $\int_0^{2\pi} f(x)\,dx$ avec $h = 2\pi/N$. A partir de quelle valeur de N, le résultat est exacte?
    (c) Appliquer une formule de quadrature d'ordre plus élevé (par exemple celle de Gauss d'ordre 6, voir exemple 5.2) et répondez à la même question que sous (b).
    (d) Quelle formule de quadrature proposez-vous pour l'intégration numérique d'une fonction périodique?

19. Considérons la suite $\{x_n\}$ donnée par $x_{n+1} = x_n + 1 - x_n^2/2,\ x_0 = 0$.
    (a) Quelle est sa limite?
    (b) Appliquer l'algorithme Δ^2 d'Aitken pour accélerer la convergence.
    (c) En utilisant $x_0, x_1, \ldots, x_8$ comparer l'erreur de la suite avec sa limite avec ou sans le Δ^2 d'Aitken.

20. Considérons une suite $\{S_n\}$ qui satisfait
$$(S_{n+1} - S) = \rho_n (S_n - S) \qquad \text{avec} \qquad \rho_n \longrightarrow \rho \quad \text{et} \quad \rho \neq 1\ .$$
a) Montrer que la suite $\{S'_n\}$, donnée par le procédé Δ^2 d'Aitken converge plus vite vers S que la suite originale, c.-à-d.,
$$\frac{S'_n - S}{S_n - S} \longrightarrow 0 \qquad \text{pour} \qquad n \longrightarrow \infty\ .$$
b) Donner une suite divergente $\{S_n\}$ pour laquelle la suite $\{S'_n\}$ converge.
Indication. Nous savons que $\Delta S_n = (\rho_n - 1)(S_n - S)$, trouver une formule similaire pour $\Delta^2 S_n$.

Chapitre II

Interpolation et Approximation

Le problème de l'*interpolation* consiste à chercher des fonctions "simples" (polynômes, polynômes par morceaux, polynômes trigonométriques) passant par des points donnés

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n), \tag{0.1}$$

c.-à-d., on cherche $p(x)$ avec $p(x_i) = y_i$ pour $i = 0, 1, \dots, n$. Si les valeurs de y_i satisfont $y_i = f(x_i)$ où $f(x)$ est une fonction donnée, il est intéressant d'étudier l'erreur de l'*approximation*

$$f(x) - p(x) = \ ? \tag{0.2}$$

Dans ce chapitre, nous allons commencer par l'interpolation avec des polynômes de degré n (formule de Newton, estimation de l'erreur, convergence, influence des erreurs d'arrondi). Ensuite, nous étudierons l'interpolation avec des polynômes trigonométriques (transformation de Fourier rapide) et nous terminerons ce chapitre avec les fonctions splines.

Bibliographie sur ce chapitre

J.H. Ahlberg, E.N. Nilson & J.L. Walsh (1967): *The Theory of Splines and Their Applications*. Academic Press, New York. [MA 65/4]

C. de Boor (1978): *A Practical Guide to Splines*. Springer-Verlag. [MA 65/141]

G.D. Knott (2000): *Interpolating Cubic Splines.* Birkhäuser. [MA 65/431]

H.J. Nussbaumer (1981): *Fast Fourier Transform and Convolution Algorithms*. Springer-Verlag.

H. Späth (1995): *One Dimensional Spline Interpolation.* AK Peters. [MA 65/362]

II.1 Différences divisées et formule de Newton

Etant donnés $n+1$ points

$$(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n), \tag{1.1}$$

où les x_i sont distincts, mais pas nécessairement ordonnés, on cherche un polynôme $p(x)$ de degré n qui satisfasse

$$p(x_i) = y_i \qquad \text{pour} \qquad i = 0, 1, \dots, n. \tag{1.2}$$

Pour un exemple voir la fig. II.1.

Cas $n = 1$. Le polynôme de degré 1 (une droite) qui passe par (x_0, y_0), (x_1, y_1) est donné par

$$p(x) = y_0 + (x - x_0)\,\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}. \tag{1.3}$$

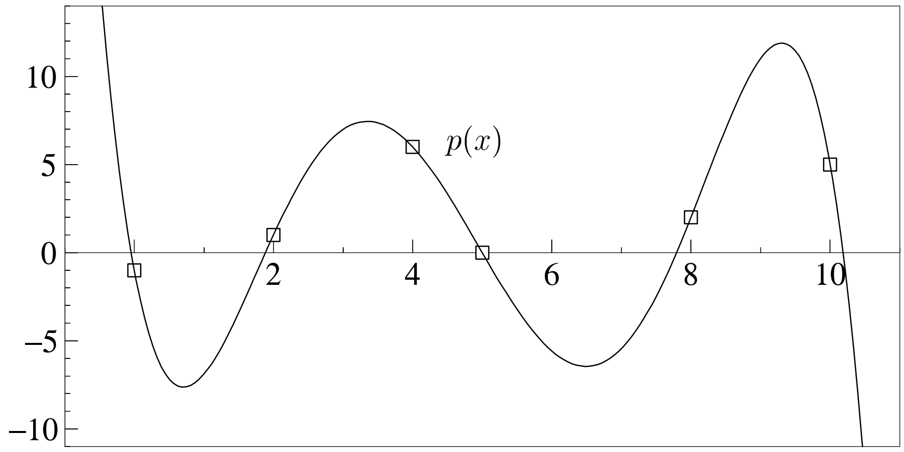


FIG. II.1 – *Polynôme d'interpolation de degré* 5

Cas $n = 2$. Pour obtenir un polynôme de degré 2 (une parabole) qui passe par les trois points (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), on ajoute un terme de correction (de degré 2) à la formule (1.3). Comme ce terme doit être zéro aux points x_0 et x_1, on a nécessairement

$$p(x) = y_0 + (x - x_0)\,\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + a \cdot (x - x_0)(x - x_1). \tag{1.4}$$

Le coefficient a est déterminé par $p(x_2) = y_2$. Un calcul simple (soustraire $p(x_1)$ de $p(x_2)$ et diviser par $(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$) nous donne

$$a = \frac{1}{x_2 - x_0}\Big(\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}\Big). \tag{1.5}$$

Avant de procéder au cas général, il est recommandé d'introduire une notation convenable pour simplifier les expressions dans (1.5).

Définition 1.1 (différences divisées) Pour (x_i, y_i) donnés (x_i distincts) on définit

$$\begin{aligned}
y[x_i] &:= y_i \\
\delta y[x_i, x_j] &:= \frac{y[x_j] - y[x_i]}{x_j - x_i} \\
\delta^2 y[x_i, x_j, x_k] &:= \frac{\delta y[x_j, x_k] - \delta y[x_i, x_j]}{x_k - x_i} \\
\delta^n y[x_{i_0}, x_{i_1}, \ldots, x_{i_n}] &:= \frac{\delta^{n-1} y[x_{i_1}, \ldots, x_{i_n}] - \delta^{n-1} y[x_{i_0}, \ldots, x_{i_{n-1}}]}{x_{i_n} - x_{i_0}}.
\end{aligned}$$

Théorème 1.2 (formule de Newton, 1669) *Le polynôme d'interpolation de degré n qui passe par les $n+1$ points $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, où les x_i sont distincts, est unique et donné par*

$$\begin{aligned}
p(x) = y[x_0] &+ (x - x_0)\,\delta y[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)\,\delta^2 y[x_0, x_1, x_2] \\
&+ \ldots + (x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1})\,\delta^n y[x_0, x_1, \ldots, x_n].
\end{aligned} \tag{1.6}$$

Démonstration. Pour $n = 1$ et $n = 2$ la formule (1.6) est équivalente à (1.3) et à (1.4), (1.5). Pour démontrer le cas général, nous procédons par induction. Supposons que

$$p_1(x) = y[x_0] + (x - x_0)\,\delta y[x_0, x_1] + \ldots + (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-2})\,\delta^{n-1} y[x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}]$$

soit le polynôme unique de degré $n-1$ qui passe par (x_i, y_i) pour $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Alors, comme dans (1.4), le polynôme $p(x)$ a nécessairement la forme

$$p(x) = p_1(x) + a \cdot (x - x_0)(x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1}),$$

où a est déterminé par $p(x_n) = y_n$. Il en résulte l'unicité du polynôme d'interpolation.

Pour montrer que $a = \delta^n y[x_0, x_1, \ldots, x_n]$, ce qui achève la démonstration, nous considérons également le polynôme de degré $n-1$

$$p_2(x) = y[x_1] + (x - x_1)\, \delta y[x_1, x_2] + \ldots + (x - x_1) \cdot \ldots \cdot (x - x_{n-1})\, \delta^{n-1} y[x_1, x_2, \ldots, x_n],$$

qui passe par (x_i, y_i) pour $i = 1, \ldots, n$. On observe que le polynôme $p(x)$ satisfait (idée d'Aitken - Neville, 1929, 1932)

$$p(x) = \frac{1}{x_n - x_0}\Big((x_n - x)p_1(x) + (x - x_0)p_2(x)\Big). \tag{1.7}$$

On voit facilement que les deux côtés de la formule (1.7) donnent la même valeur pour les points $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Comme ils sont tous deux des polynômes de degré n, l'identité est une conséquence de l'unicité du polynôme d'interpolation. En considérant le coefficient le plus haut dans (1.7), nous obtenons

$$a = \frac{1}{x_n - x_0}\Big(\delta^{n-1} y[x_1, \ldots, x_n] - \delta^{n-1} y[x_0, \ldots, x_{n-1}]\Big) = \delta^n y[x_0, \ldots, x_n],$$

ce qui démontre la formule (1.6). □

TAB. II.1 – *Différences divisées pour les données de la fig. II.1*

x_i	y_i	δy	$\delta^2 y$	$\delta^3 y$	$\delta^4 y$	$\delta^5 y$
0	-1					
		1				
2	1		$3/8$			
		$5/2$		$-77/120$		
4	6		$-17/6$		$167/960$	
		-6		$3/4$		$-287/9600$
5	0		$5/3$		$-1/8$	
		$2/3$		$-1/4$		
8	2		$1/6$			
		$3/2$				
10	5					

Exemple 1.3 Pour les données de la fig. II.1, les différences divisées sont présentées dans le tableau II.1. Le polynôme d'interpolation est alors donné par

$$\begin{aligned} p(x) = -1 + x + x(x-2)\frac{3}{8} - x(x-2)(x-4)\frac{77}{120} + x(x-2)(x-4)(x-5)\frac{167}{960} \\ - x(x-2)(x-4)(x-5)(x-8)\frac{287}{9600}. \end{aligned}$$

ou mieux encore pour la programmation (ou le calcul à la main)

$$p(x) = -1 + x\Big(1 + (x-2)\Big(\frac{3}{8} + (x-4)\Big(-\frac{77}{120} + (x-5)\Big(\frac{167}{960} - (x-8)\frac{287}{9600}\Big)\Big)\Big)\Big).$$

Remarque. L'ordre des $\{x_i\}$ n'a aucune importance pour la formule de Newton (1.6). Si l'on permute les données (x_i, y_i), on obtient évidemment le même polynôme. Pour l'exemple ci-dessus et pour les $\{x_i\}$ choisis dans l'ordre $\{4, 5, 2, 8, 0, 10\}$, on obtient ainsi

$$p(x) = 6 + (x-4)\Big(-6 + (x-5)\Big(-\frac{17}{6} + (x-2)\Big(\frac{3}{4} + (x-8)\Big(\frac{167}{960} - x\frac{287}{9600}\Big)\Big)\Big)\Big).$$

En observant que $\delta^n y[x_{i_0}, \dots, x_{i_n}]$ est une fonction symétrique de ses arguments (par exemple, $\delta^2 y[x_2, x_3, x_1] = \delta^2 y[x_1, x_2, x_3]$, voir l'exercice 1), on peut utiliser les valeurs calculées dans le tableau II.1.

Pour diminuer l'influence des erreurs d'arrondi, il est recommandé d'ordonner les $\{x_i\}$ de manière à ce que les valeurs situées au milieu soient prises d'abord et les valeurs aux extrémités à la fin. Pour ce choix, les expressions $(x-x_0)$, $(x-x_0)(x-x_1)$, $(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$, etc., sont en général plus petites que pour un autre choix et l'amplification des erreurs dans les différences divisées est moins importante.

II.2 Erreur de l'interpolation et polynômes de Chebyshev

Supposons que les points (x_i, y_i) soient sur le graphe d'une fonction $f : [a, b] \to I\!R$, c.-à-d.,

$$y_i = f(x_i), \qquad i = 0, 1, \dots, n, \tag{2.1}$$

étudions alors l'erreur $f(x) - p(x)$ du polynôme d'interpolation $p(x)$. Deux exemples sont donnés dans la fig. II.2. A gauche, on voit un polynôme d'interpolation pour la fonction $f(x) = \sin x$, et à droite pour la fonction $1/(1 + x^2)$. Pour mieux voir l'erreur, on a dessiné la fonction $f(x)$ en une courbe pointillée.

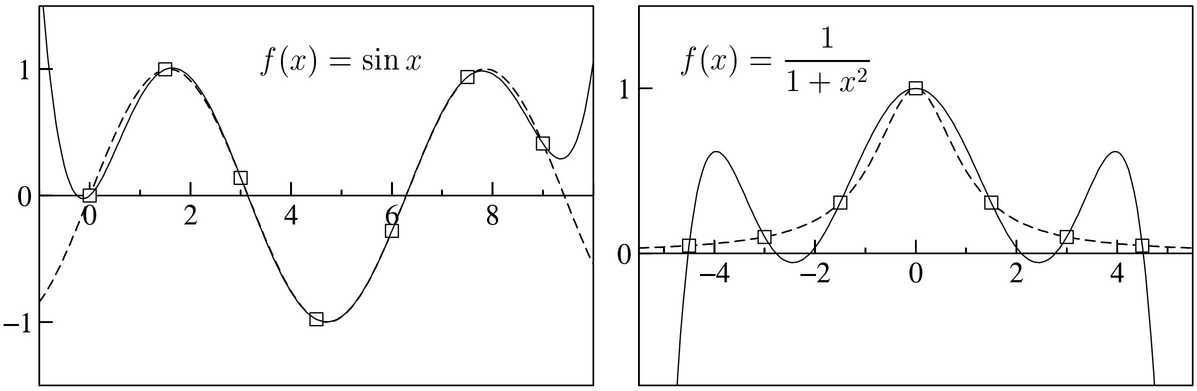


FIG. II.2 – *Polynôme d'interpolation pour* $\sin x$ *(gauche) et pour* $1/(1 + x^2)$ *(droite)*

Commençons par démontrer une relation intéressante entre les différences divisées pour (2.1) et les dérivées de la fonction $f(x)$.

Lemme 2.1 *Soit* $f(x)$ *n-fois différentiable et* $y_i = f(x_i)$ *pour* $i = 0, 1, \dots, n$ *(x_i distincts). Alors, il existe un* $\xi \in (\min x_i, \max x_i)$ *tel que*

$$\delta^n y[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}. \tag{2.2}$$

Démonstration. Soit $p(x)$ le polynôme d'interpolation de degré n passant par (x_i, y_i) et notons $d(x) = f(x) - p(x)$. Par définition de $p(x)$, la différence $d(x)$ s'annule en $n+1$ points distincts :

$$d(x_i) = 0 \qquad \text{pour} \qquad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Comme $d(x)$ est différentiable, on peut appliquer n fois le théorème de Rolle (voir le cours d'Analyse I) et on en déduit que

$$d'(x) \qquad \text{a } n \text{ zéros distincts dans } (\min x_i, \max x_i).$$

Le même argument appliqué à $d'(x)$ donne

$$d''(x) \qquad \text{a } n-1 \text{ zéros distincts dans } (\min_i x_i, \max_i x_i),$$

et finalement encore

$$d^{(n)}(x) \qquad \text{a 1 zéro dans } (\min_i x_i, \max_i x_i).$$

Notons ce zéro de $d^{(n)}(x)$ par ξ. Alors, on a

$$f^{(n)}(\xi) = p^{(n)}(\xi) = n! \cdot \delta^n y[x_0, x_1, \ldots, x_n]. \tag{2.3}$$

La deuxième identité dans (2.3) résulte du fait que $\delta^n y[x_0, x_1, \ldots, x_n]$ est le coefficient de x^n dans $p(x)$. □

Théorème 2.2 *Soit $f : [a, b] \to I\!R$ $(n+1)$-fois différentiable et soit $p(x)$ le polynôme d'interpolation de degré n qui passe par $(x_i, f(x_i))$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$. Alors, pour $x \in [a, b]$, il existe un $\xi \in (\min(x_i, x), \max(x_i, x))$ tel que*

$$f(x) - p(x) = (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_n) \cdot \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}. \tag{2.4}$$

Démonstration. Si $x = x_i$ pour un indice $i \in \{0, 1, \ldots, n\}$, la formule (2.4) est vérifiée car $p(x_i) = f(x_i)$. Fixons alors un $\bar{x}$ dans $[a, b]$ qui soit différent de x_i et montrons la formule (2.4) pour $x = \bar{x}$.

L'idée est de considérer le polynôme $\bar{p}(x)$ de degré $n+1$ qui passe par $(x_i, f(x_i))$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$ et par $(\bar{x}, f(\bar{x}))$. La formule de Newton donne

$$\bar{p}(x) = p(x) + (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_n) \cdot \delta^{n+1} y[x_0, \ldots, x_n, \bar{x}]. \tag{2.5}$$

Si l'on remplace la différence divisée dans (2.5) par $f^{(n+1)}(\xi)/(n+1)!$ (voir le lemme précédent) et si l'on pose $x = \bar{x}$, on obtient le résultat (2.4) pour $x = \bar{x}$ car $\bar{p}(\bar{x}) = f(\bar{x})$. Comme $\bar{x}$ est arbitraire, la formule (2.4) est vérifiée pour tout x. □

Exemple 2.3 Dans la situation de la fig. II.2, on a $n + 1 = 7$. Comme la 7ème dérivée de $\sin x$ est bornée par 1, on a que

$$|p(x) - \sin x| \le |x(x-1.5)(x-3)(x-4.5)(x-6)(x-7.5)(x-9)| \cdot \frac{1}{7!},$$

par exemple

$$|p(4) - \sin 4| \le 0.035 \qquad \text{ou} \qquad |p(1) - \sin 1| \le 0.181.$$

Pour le deuxième exemple, $f(x) = 1/(1+x^2)$, la $7^{\text{ème}}$ dérivée est donnée par

$$f^{(7)}(x) = -8! \cdot \frac{(x+1)(x-1)x(x^2-2x-1)(x^2+2x-1)}{(1+x^2)^8},$$

qui est maximale pour $x \approx \pm 0.17632698$. On obtient ainsi

$$\Big|p(x) - \frac{1}{1+x^2}\Big| \le |(x^2-20.25)(x^2-9)(x^2-2.25)x| \cdot \frac{4392}{7!}.$$

Alors, l'erreur peut être 4392 fois plus grande que pour l'interpolation de $\sin x$.

Question intéressante. La formule (2.4) montre que l'erreur de l'interpolation est un produit de la $(n+1)^{\text{ème}}$ dérivée de $f(x)$, évaluée à un point inconnu, avec l'expression $(x-x_0)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)$ qui ne dépend que de la division $\{x_0,\ldots,x_n\}$. Il est alors intéressant de chercher, pour un n donné, la division de $[a,b]$ pour laquelle

$$\max_{x\in[a,b]} |(x-x_0)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)| \qquad \text{est minimal.} \tag{2.6}$$

La réponse à ce problème peut être donnée à l'aide de polynômes de Chebyshev.[1]

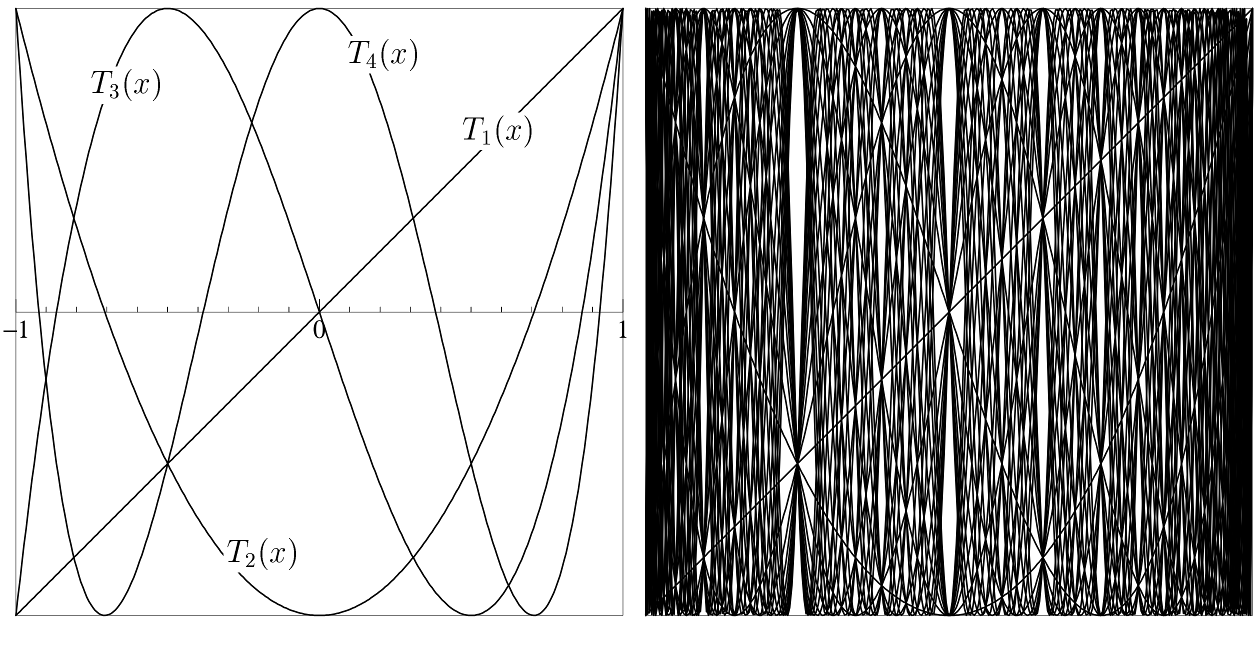


FIG. II.3 – *Les premiers 4 (à gauche) respectivement 30 (à droite) polynômes de Chebyshev*

Définition 2.4 (Polynômes de Chebyshev) *Pour $n = 0, 1, 2, \ldots$ et pour $x \in [-1, 1]$, on définit*

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x). \tag{2.7}$$

1. Pour une étude des "courbes blanches" dans la fig. II.3 (à droite) voir la page 209 du livre: Th.J. Rivlin, *Chebyshev Polynomials*. 2nd ed., John Wiley & Sons, 1990 [MA 41/36]

Propriétés des polynômes de Chebyshev.

a) *Les fonctions $T_n(x)$ satisfont la réccurrence*

$$\begin{aligned} T_0(x) = 1, \qquad\qquad & T_1(x) = x, \\ T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) & - T_{n-1}(x). \end{aligned} \tag{2.8}$$

Par conséquence, $T_n(x)$ est un polynôme de degré n dont le coefficient de x^n est 2^{n-1}, c.-à-d., $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \ldots$.

b) $|T_n(x)| \le 1$ *pour* $x \in [-1, 1]$.

c) $T_n\Big(\cos\big(\frac{k\pi}{n}\big)\Big) = (-1)^k$ *pour* $k = 0, 1, \ldots, n$.

d) $T_n\Big(\cos\big(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\big)\Big) = 0$ *pour* $k = 0, 1, \ldots, n-1$.

e) *Les polynômes $T_n(x)$ sont orthogonaux par rapport à la fonction de poids $1/\sqrt{1-x^2}$ (voir le tableau I.2)*

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\, T_n(x) T_m(x)\, dx = \begin{cases} \pi & \text{si } n = m = 0 \\ \pi/2 & \text{si } n = m \ne 0 \\ 0 & \text{si } n \ne m. \end{cases}$$

Démonstration. La formule (2.8) est une conséquence de

$$\cos((n+1)\varphi) + \cos((n-1)\varphi) = 2\cos\varphi \cdot \cos(n\varphi)$$

si l'on pose $\cos\varphi = x$ et $\varphi = \arccos x$. La même transformation donne

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\, T_n(x) T_m(x)\, dx = \int_0^{\pi} \cos(n\varphi)\cos(m\varphi)\, d\varphi$$

et la propriété (e) résulte de l'orthogonalité de $\cos(n\varphi)$. □

Revenons maintenant à la question de trouver une division satisfaisant (2.6).

Lemme 2.5 *Soit $q(x)$ un polynôme de degré n dont le coefficient de x^n est 2^{n-1} (comme pour le polynôme de Chebyshev) et soit $q(x) \not\equiv T_n(x)$. Alors,*

$$\max_{x\in[-1,1]} |q(x)| > \max_{x\in[-1,1]} |T_n(x)| = 1. \tag{2.9}$$

Démonstration. Supposons, par l'absurde, que

$$\max_{x\in[-1,1]} |q(x)| \le \max_{x\in[-1,1]} |T_n(x)|$$

(voir la fig. II.4 pour $n = 5$) et considérons la différence $d(x) = q(x) - T_n(x)$. Cette fonction s'annule au moins une fois dans chacun des intervalles fermés

$$\Big[\cos\Big(\frac{(k+1)\pi}{n}\Big), \cos\Big(\frac{k\pi}{n}\Big)\Big], \qquad k = 0, 1, \ldots, n-1. \tag{2.10}$$

Alors, $d(x)$ possède n zéros dans $[-1, 1]$ (si une racine $\alpha \in (-1, 1)$ est à l'extrémité de l'intervalle (2.10), elle doit être comptée deux fois car à un tel point $T_n'(\alpha) = 0$ et $q'(\alpha) = 0$). Comme $d(x)$ est un polynôme de degré $n-1$ (le coefficient de x^n est le même pour $q(x)$ et $T_n(x)$), ceci est une contradiction à $d(x) \not\equiv 0$. □

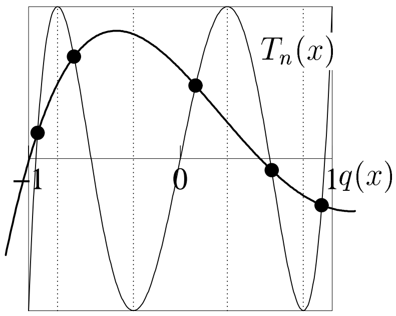


FIG. II.4 – *Esquisse pour la démonstration du Lemme*

Le lemme précédent montre que

$$\max_{x\in[-1,1]} |(x-x_0)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)| \qquad \text{est minimal}$$

si et seulement si $(x-x_0)\cdot\ldots\cdot(x-x_n) = 2^{-n}T_{n+1}(x)$, c.-à-d., si

$$x_k = \cos\Big(\frac{(2k+1)\pi}{2n+2}\Big), \qquad k = 0,1,\ldots,n \tag{2.11}$$

(points de Chebyshev). Pour répondre à la question (2.6), il faut encore utiliser la translation $x \mapsto \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$, qui envoie l'intervalle $[-1,1]$ sur $[a,b]$. On obtient alors

Théorème 2.6 *L'expression (2.6) est minimale parmi toutes les divisions* $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ *si et seulement si*

$$x_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\cdot\cos\Big(\frac{(2k+1)\pi}{2n+2}\Big), \qquad k = 0,1,\ldots,n. \tag{2.12}$$

Exemple 2.7 Comme dans la fig. II.2, nous considérons la fonction $f(x) = 1/(1+x^2)$ sur l'intervalle $[-4.5, 4.5]$. Dans la fig. II.5, on compare le polynôme d'interpolation basé sur des points équidistants avec celui basé sur les points de Chebyshev.

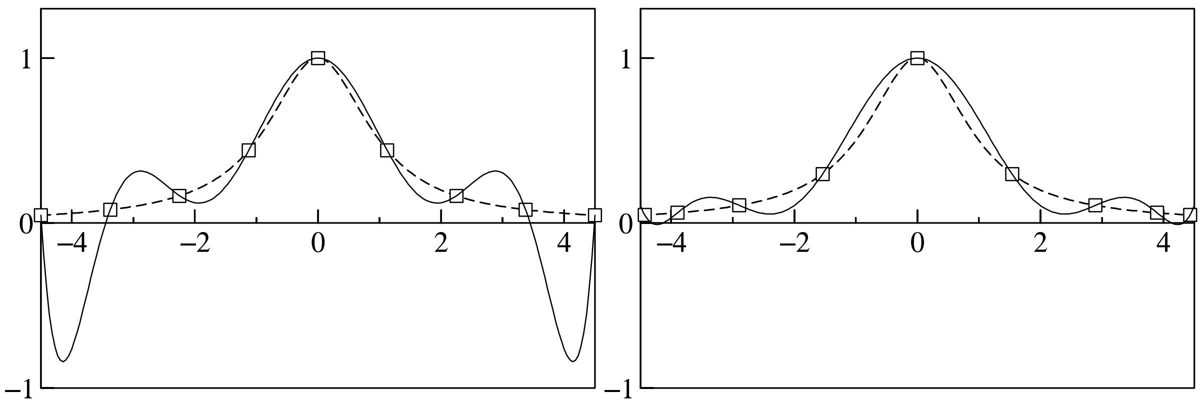


FIG. II.5 – *Interpolation avec des points équidistants (à gauche) et les points de Chebyshev (à droite)*

II.3 Convergence de l'interpolation

Pour améliorer la précision du polynôme d'interpolation, on augmente, en général, le nombre de points de la division. Considérons alors une suite de divisions

$$x_0^{(n)}, x_1^{(n)}, \ldots, x_n^{(n)}. \tag{3.1}$$

Si l'on dénote par $p_n(x)$ le polynôme d'interpolation satisfaisant $p_n(x_i^{(n)}) = f(x_i^{(n)})$ pour une fonction $f : [a,b] \to I\!R$ donnée, il est intéressant d'étudier sa convergence vers $f(x)$.

Théorème 3.1 *Soit* $f \in \mathcal{C}^\infty[a,b]$,

$$|f^{(n)}(x)| \le M \qquad \textit{pour} \quad x \in [a,b] \quad \textit{et} \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{3.2}$$

et soit (3.1) une suite arbitraire avec $x_i^{(n)} \in [a,b]$. *Alors,*

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - p_n(x)| \to 0 \qquad \textit{pour} \qquad n \to \infty. \tag{3.3}$$

Démonstration. L'hypothèse (3.2) appliquée à (2.4) donne

$$|f(x) - p_n(x)| \le (b-a)^{n+1} \cdot \frac{M}{(n+1)!}.$$

L'expression $(b-a)^{n+1}/(n+1)!$ tend vers zéro pour $n \to \infty$ car elle est un terme de la série convergente $e^{b-a} = \sum_{k\ge 0}(b-a)^k/k!$. □

L'hypothèse (3.2) est satisfaite, par exemple, pour e^x, $\sin x$, $\cos x$ et pour des polynômes, mais autrement elle est très rarement vérifiée. Par exemple, la fraction rationnelle $f(x) = 1/x$ satisfait $f^{(n)}(x) = \pm n!/x^{n+1}$. Elle ne vérifie pas (3.2) sur $[1,2]$.

Le phénomène de Runge (1901). Pour le reste de ce paragraphe nous allons considérer uniquement des *fonctions rationnelles* $f(x)$, définies sur l'intervalle *normalisé* $[-1,1]$, et la suite des divisions *équidistantes*

$$x_i^{(n)} = -1 + \frac{2i}{n}, \qquad i = 0,1,\ldots,n. \tag{3.4}$$

Le but est d'étudier la convergence de $p_n(x)$ vers $f(x)$. La fig. II.6 montre les polynômes d'interpolation pour la fonction $f(x) = 1/(1+25x^2)$ sur $[-1,1]$. On peut observer que, dans un certain intervalle autour de l'origine, $p_n(x)$ converge vers $f(x)$, mais au bord de l'intervalle considéré, on a divergence.

Pour pouvoir mieux comprendre ce phénomène, on a besoin de la formule de Cauchy (voir Analyse II)

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma \frac{f(z)}{z-x}\,dz. \tag{3.5}$$

Dans cette formule, γ est une courbe fermée autour de x, telle que $f(z)$ n'a pas de singularité à l'intérieur de la courbe. Si la courbe est donnée par la paramétrisation $\gamma : [a,b] \to \mathbb{C}$ avec $\gamma(a) = \gamma(b)$, l'intégrale dans (3.5) est définie par

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma \frac{f(z)}{z-x}\,dz = f(x) = \frac{1}{2\pi i}\int_a^b \frac{f(\gamma(t))}{\gamma(t)-x}\cdot\gamma'(t)\,dt.$$

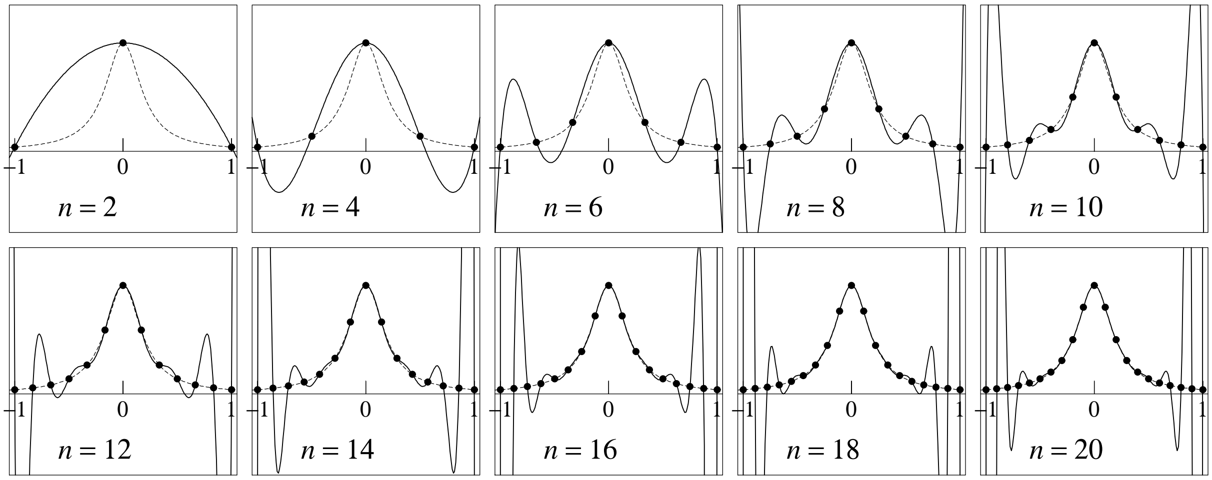


FIG. II.6 – *Le phénomène de Runge pour* $f(x) = 1/(1+25x^2)$

En utilisant la notation

$$\pi_n(x) := (x - x_0^{(n)}) \cdot (x - x_1^{(n)}) \cdot \ldots \cdot (x - x_n^{(n)}) \tag{3.6}$$

pour la division équidistante (3.4), nous obtenons la formule suivante pour le polynôme d'interpolation

$$p_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)}{z - x} \cdot \frac{\pi_n(z) - \pi_n(x)}{\pi_n(z)} \, dz. \tag{3.7}$$

Ici, γ est une courbe fermée autour du segment $[-1, 1]$ telle que $f(z)$ n'ait pas de singularité (pôle) à l'intérieur de la courbe (voir la fig. II.7).

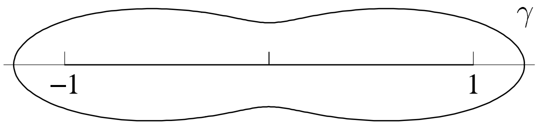


FIG. II.7 – *Courbe admissible pour la formule (3.7)*

En effet, la partie droite de (3.7) est un polynôme de degré n en x car $(\pi_n(z) - \pi_n(x))/(z - x)$ en est un. En posant $x = x_k^{(n)}$ pour un $k \in \{0, \ldots, n\}$, on a

$$\frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)}{z - x_k^{(n)}} \cdot \frac{\pi_n(z) - \pi_n(x_k^{(n)})}{\pi_n(z)} \, dz = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)}{z - x_k^{(n)}} \, dz = f(x_k^{(n)}),$$

ce qui montre la formule (3.7). La différence de (3.7) et de (3.5) nous donne une autre formule pour l'erreur de l'interpolation.

Théorème 3.2 *Soit* γ *une courbe fermée autour du segment* $[-1, 1]$ *(voir la fig. II.7) telle que* $f(z)$ *n'ait pas de singularité à l'intérieur de* γ. *Alors, pour* $x \in [-1, 1]$, *l'erreur de l'interpolation est donnée par*

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma \frac{f(z)}{z - x} \cdot \frac{\pi_n(x)}{\pi_n(z)} \, dz. \tag{3.8}$$

□

L'idée de l'étude de la convergence de $p_n(x)$ vers $f(x)$ est la suivante: si, pour un $x \in [-1,1]$, on peut choisir la courbe γ telle que

$$|\pi_n(x)| \leq \alpha^n |\pi_n(z)| \qquad \text{pour tout} \qquad z \in \gamma \tag{3.9}$$

avec un $\alpha < 1$, alors,

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{\alpha^n}{2\pi} \int_\gamma \frac{|f(z)|}{|z-x|} |dz| \tag{3.10}$$

et on a convergence pour $n \to \infty$. Il faut alors étudier la fonction $\sqrt[n]{|\pi_n(z)|}$ pour $n \to \infty$.

Lemme 3.3 *Pour la division équidistante (3.4) et pour le polynôme $\pi_n(z)$ de (3.6) on a*

$$\lim_{n\to\infty} \sqrt[n]{|\pi_n(z)|} = G(z)$$

où

$$G(z) = \exp\Big(\frac{1}{2}\Re((z+1)\log(z+1) - (z-1)\log(z-1)) - 1\Big). \tag{3.11}$$

Démonstration. En prenant le logarithme de $\sqrt[n]{|\pi_n(z)|}$, on obtient

$$\log \sqrt[n]{|\pi_n(z)|} = \frac{1}{n} \log|\pi_n(z)| = \frac{1}{n}\Big(\log|z - x_0^{(n)}| + \ldots + \log|z - x_n^{(n)}|\Big),$$

ce qui représente une somme de Riemann pour la fonction $s \mapsto \log|z-s|$, $x_{k+1}^{(n)} - x_k^{(n)} = 2/n$. On obtient ainsi (observer que $\log w = \log|w| + i \arg w$)

$$\lim_{n\to\infty} \log \sqrt[n]{|\pi_n(z)|} = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \log|z-s|\, ds = \frac{1}{2}\Re \int_{-1}^{1} \log(z-s)\, ds = \frac{1}{2}\Re \int_{z-1}^{z+1} \log t\, dt.$$

Une primitive de $\log t$ est $t\log t - t$. Ceci implique

$$\lim_{n\to\infty} \log \sqrt[n]{|\pi_n(z)|} = \frac{1}{2}\Re\Big((z+1)\log(z+1) - (z-1)\log(z-1) - (z+1) + (z-1)\Big),$$

et donne la formule du lemme. □

Pour un x réel et compris dans $(-1,1)$, on a

$$G(x) = e^{-1}\sqrt{(1+x)^{1+x}(1-x)^{1-x}},$$

en particulier $G(0) = 1/e$, $G(\pm 1) = 2/e$ (voir fig. II.8 à gauche). Les lignes de niveau $\{z \mid G(z) = \mathit{Const}\}$ sont dessinées dans la fig. II.8 (dessin à droite).

Théorème 3.4 (Runge 1901) *Si $f(z)$ n'a pas de singularité dans $\{z \mid G(z) \leq G(\beta)\}$, alors*

$$\lim_{n\to\infty} p_n(x) = f(x) \qquad \textit{pour} \qquad x \in [-\beta, \beta].$$

Démonstration. On considère une courbe γ autour de $[-1,1]$ qui est en dehors de l'ensemble $\{z \mid G(z) \leq G(\beta)\}$ et qui est telle que tous les pôles de $f(z)$ sont en dehors de γ. Ceci entraîne pour $x \in [-\beta, \beta]$ que

$$G(x) \leq G(\beta) \leq \alpha_0 \cdot \min_{z\in\gamma} G(z)$$

avec un $\alpha_0 < 1$. Pour un α satisfaisant $\alpha_0 < \alpha < 1$ et pour n suffisamment grand, on a

$$\sqrt[n]{|\pi_n(x)|} \leq \alpha \cdot \sqrt[n]{|\pi_n(z)|} \qquad \text{pour} \qquad z \in \gamma.$$

Ceci vérifie (3.9) pour $x \in [-\beta, \beta]$ et la convergence est une conséquence de (3.10). □

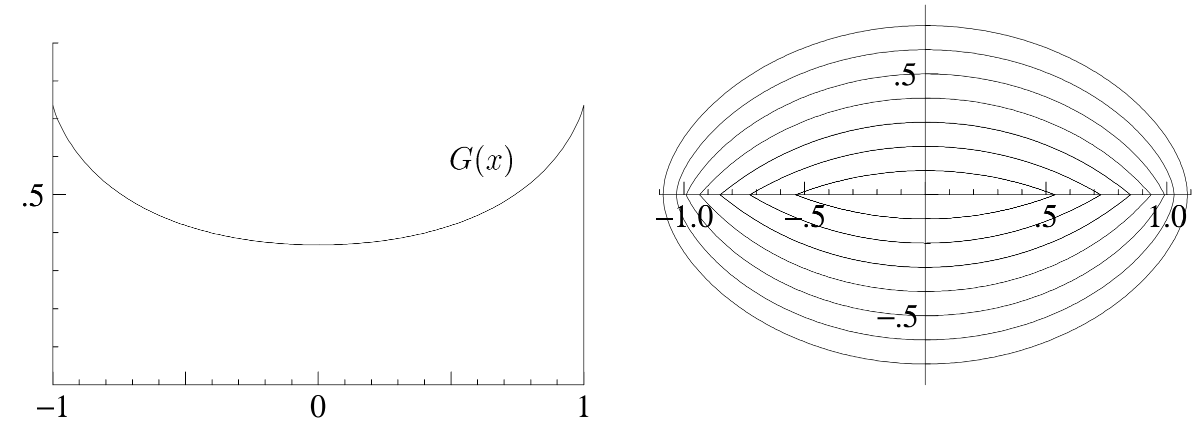


FIG. II.8 – *La fonction $G(x)$ (dessin à gauche) et les lignes de niveau de $G(z)$ (dessin à droite)*

Exemple. La fonction $f(x) = 1/(1+25x^2)$ possède une singularité en $\pm i/5$. La ligne de niveau de $G(z)$ qui passe par $\pm i/5$ coupe l'axe réel au point $\beta \approx 0.726$. Alors, la convergence du polynôme d'interpolation (avec des points équidistants) est établie pour $|x| < 0.726$ (voir fig. II.6).

Il est encore intéressant de mentionner que l'interpolation avec des points de Chebyshev a de meilleures propriétés de convergence.

Théorème 3.5 *Soit $f(x)$ une fois continûment différentiable sur $[-1,1]$ et soit $p_n(x)$ le polynôme d'interpolation passant par $(x_i, f(x_i))$ où $x_i = \cos(\frac{(2i+1)\pi}{2n+2})$, $i = 0, 1, \ldots, n$. Alors,*

$$\max_{x\in[-1,1]} |f(x) - p_n(x)| \to 0 \qquad \textit{pour} \qquad n \to \infty.$$

La *démonstration* utilise le théorème de Stone-Weierstraß (voir par exemple le chapitre II du livre de Werner & Schaback[2] pour plus de details).

II.4 Influence des erreurs d'arrondi sur l'interpolation

Représentation en virgule flottante. Chaque nombre réel $x \neq 0$ peut s'écrire sous la forme

$$x = \pm a \cdot 10^b \tag{4.1}$$

où a, la *mantisse*, satisfait $0.1 \leq a < 1$ et l'*exposant* b est un nombre entier. Cette représentation de x est unique. Supposons maintenant qu'on ait seulement un nombre fini de chiffres (disons ℓ) à disposition pour la mantisse, mais que l'on n'ait pas de restriction pour l'exposant. Si $\bar{a}$ dénote l'arrondi de a, on va calculer en fait avec le nombre

$$\text{arr}\,(x) = \pm\bar{a} \cdot 10^b$$

au lieu de x. Par exemple, le nombre $\pi = 3.141592653\ldots$ est représenté par

$$\text{arr}\,(\pi) = 0.31415927 \cdot 10^1 \tag{4.2}$$

si l'on calcule avec $\ell = 8$ chiffres en base 10.

Précision de l'ordinateur. On dénote par eps le plus petit nombre positif tel que

$$\text{arr}\,(1 + eps) > 1.$$

2. H. Werner & R. Schaback (1979), *Praktische Mathematik II.* Springer-Verlag, 2. Auflage. [MA 65/23]

Pour un calcul en base 10 avec ℓ chiffres dans la mantisse on a

$$\begin{aligned}
\text{arr}\,(0.\underbrace{10\ldots0}_{\ell}49\ldots\cdot 10^1) &= 1\\
\text{arr}\,(0.\underbrace{10\ldots0}_{\ell}50\ldots\cdot 10^1) &= 0.\underbrace{10\ldots1}_{\ell}\cdot 10^1 > 1.
\end{aligned}$$

Dans cette situation, on a alors

$$eps = 5\cdot 10^{-\ell}. \tag{4.3}$$

Si l'on fait le même calcul en base 2 (comme tous les ordinateurs le font) on obtient

$$eps = 2^{-\ell}. \tag{4.4}$$

Par exemple, sur une SUN workstation on a

$$\begin{aligned}
&\text{REAL}*4, && eps = 2^{-24}\approx 5.96\cdot 10^{-8}\\
&\text{REAL}*8, && eps = 2^{-53}\approx 1.11\cdot 10^{-16}\\
&\text{REAL}*16, && eps = 2^{-113}\approx 9.63\cdot 10^{-35}.
\end{aligned}$$

Théorème 4.1 *Pour un $x\neq 0$ on a*

$$\frac{|\text{arr}\,(x)-x|}{|x|}\le eps\,, \tag{4.5}$$

c.-à-d., l'erreur relative due à l'arrondissement est bornée par eps.

Démonstration. Soit $x = a\cdot 10^b$ et arr $(x) = \bar a\cdot 10^b$. Si l'on arrondit à ℓ chiffres significatifs, on a $|\bar a - a|\le 5\cdot 10^{-\ell-1}$. Il en résulte

$$\frac{|\text{arr}\,(x)-x|}{|x|} = \frac{|\bar a - a|\cdot 10^b}{|a|\cdot 10^b}\le \frac{5\cdot 10^{-\ell-1}}{10^{-1}} = 5\cdot 10^{-\ell} = eps$$

car $|a|\ge 1/10$. □

L'estimation (4.5) peut aussi être écrite sous la forme

$$\text{arr}\,(x) = x(1+\epsilon) \qquad \text{où} \qquad |\epsilon|\le eps\,. \tag{4.6}$$

Cette formule est la base pour toute étude d'erreurs d'arrondi.

Influence des erreurs dans y_i sur le polynôme d'interpolation. Supposons que les données y_i soient erronées et qu'on calcule en fait avec

$$\widehat{y}_i = y_i(1+\epsilon_i) \qquad \text{où} \qquad |\epsilon_i|\le eps\,. \tag{4.7}$$

Pour étudier la différence entre le polynôme qui passe par (x_i, y_i) et celui qui passe par $(x_i,\widehat{y}_i)$, on utilise la formule du lemme suivant.

Lemme 4.2 (formule de Lagrange) *Le polynôme d'interpolation $p(x)$ qui passe par (x_i, y_i) pour $i = 0,1,\ldots,n$ est donné par*

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i\ell_i(x) \qquad \textit{où} \qquad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n}\frac{x-x_j}{x_i-x_j}. \tag{4.8}$$

Démonstration. Le polynôme $\ell_i(x)$ satisfait $\ell_i(x_i) = 1$ et $\ell_i(x_k) = 0$ si $k \neq i$. Ainsi, les deux côtés de la formule (4.8) valent y_k pour $x = x_k$ ($k = 0, 1, \ldots, n$). Comme $p(x)$ et $\sum_{i=0}^n y_i \ell_i(x)$ sont des polynômes de degré n, cette formule est une conséquence de l'unicité du polynôme d'interpolation (voir le théorème 1.2). □

Les polynômes passant par (x_i, y_i) et $(x_i, \widehat{y}_i)$ sont respectivement

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \ell_i(x) \qquad \text{et} \qquad \widehat{p}(x) = \sum_{i=0}^{n} \widehat{y}_i \ell_i(x).$$

Si $\widehat{y}_i$ est donné par (4.7), la différence satisfait

$$\widehat{p}(x) - p(x) = \sum_{i=0}^{n} \epsilon_i y_i \ell_i(x)$$

et on obtient

$$|\widehat{p}(x) - p(x)| \leq eps \cdot \max_{i=0,\ldots,n} |y_i| \cdot \sum_{i=0}^{n} |\ell_i(x)|. \tag{4.9}$$

La fonction $\sum_{i=0}^n |\ell_i(x)|$ décrit l'amplification de l'erreur dans les données. Sa valeur maximale

$$\Lambda_n := \max_{x \in [a,b]} \sum_{i=0}^{n} |\ell_i(x)| \tag{4.10}$$

s'appelle la *constante de Lebesgue* associée aux points $x_0, x_1, \ldots, x_n$ et à l'intervalle $[a, b]$. Cette constante peut être calculée numériquement (voir exercice 5).

Points équidistants. Pour la division $x_i = a + \frac{i}{n}(b-a)$ de l'intervalle $[a, b]$, on a

$$\Lambda_{20} \approx 3 \cdot 10^4, \qquad \Lambda_{40} \approx 10^{10}, \qquad \Lambda_n \approx \frac{2^{n+1}}{e \cdot n \cdot \log n}.$$

Points de Chebyshev. Si l'on choisit $x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{(2i+1)\pi}{2n+2}\right)$, on a

$$\begin{aligned} &\Lambda_n \leq 3 && \text{pour } n \leq 20 \\ &\Lambda_n \leq 4 && \text{pour } n \leq 100 \\ &\Lambda_n \approx \frac{2}{\pi} \log n && \text{si } n \text{ est grand.} \end{aligned}$$

Expérience numérique. Considérons la fonction $f(x) = \sin x$ sur l'intervalle $[0, 5]$. Pour $n \geq 25$, l'erreur de l'interpolation est bornée par $5^{26}/26! \approx 3.69 \cdot 10^{-9}$ quelle que soit la division choisie.

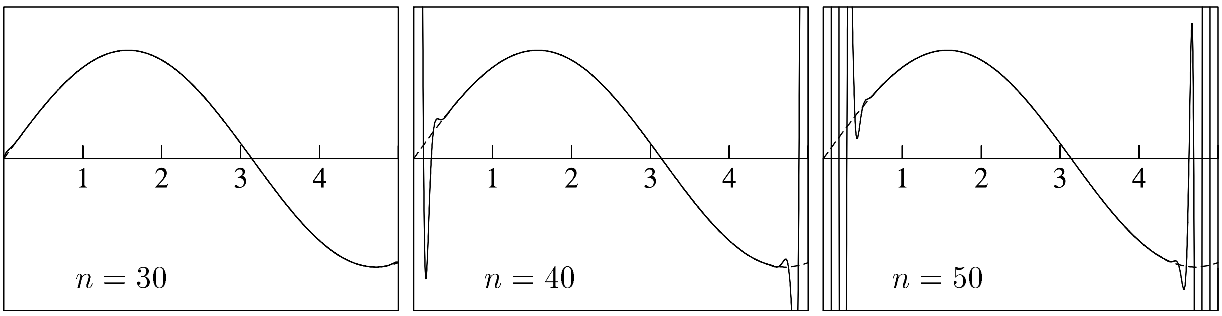


FIG. II.9 – *Influence des erreurs dans les y_i sur l'interpolation*

Prenons les $y_i = \sin x_i$ en simple précision (erreur relative $\approx$ $eps \approx 5.96 \cdot 10^{-8}$) et faisons le calcul de $p(x)$ en double précision. Dans la fig. II.9 nous voyons le polynôme d'interpolation obtenu de cette manière (avec des points équidistants). Son erreur devient bien visible à partir de $n = 32$, la valeur où $eps \cdot \Lambda_n$ dépasse 1. Evidemment, l'interpolation avec les points de Chebyshev ne montrera pas ce phénomène.

II.5 Transformation de Fourier discrète et interpolation trigonométrique

Dans le traitement de signaux, on est confronté à la situation suivante: beaucoup (plusieurs milliers ou des millions) de valeurs (t_i, y_i) sont données où les $\{t_i\}$ représentent une division équidistante du temps. Typiquement, les y_i satisfont une certaine périodicité. La fig. II.10 montre la digitalisation d'un son. On a enregistré 22000 impulsions par seconde, dont 1024 sont dessinées (ceci correspond à $1024/22 \approx 46.5$ millisecondes). On est souvent intéressé à l'étude du spectre d'un signal (c.-à-d., la transformée de Fourier ou les coefficients de la série de Fourier).

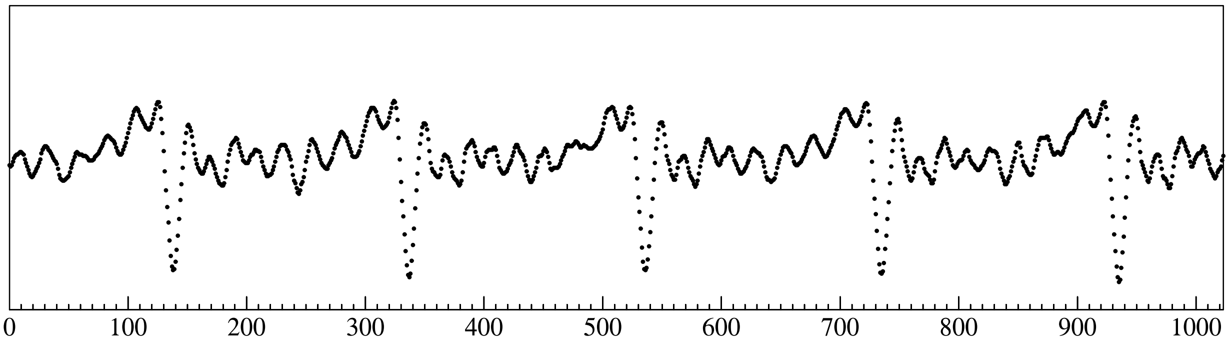


FIG. II.10 – *Digitalisation du son "a" prononcé par Martin*

Rappelons que, pour une fonction 2π-périodique $f(x)$ à valeurs dans $\mathbb{R}$ ou dans $\mathbb{C}$, la série de Fourier est

$$f(x) \sim \sum_{k\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(k)e^{ikx}, \tag{5.1}$$

où les coefficients de Fourier sont définis par

$$\widehat{f}(k) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(x)e^{-ikx}\,dx \tag{5.2}$$

(voir le cours d'Analyse II pour les conditions entraînant l'égalité dans (5.1)). Supposons maintenant que la fonction $f(x)$ est seulement connue pour les x de la division équidistante

$$x_\ell = \frac{2\pi\ell}{N}, \qquad \ell = 0, 1, \ldots, N. \tag{5.3}$$

Comme $f(x_N) = f(x_0)$ par hypothèse, la formule du trapèze appliquée à (5.2) nous donne l'approximation

$$\widehat{f}_N(k) = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} f(x_\ell)e^{-ikx_\ell}. \tag{5.4}$$

Ceci motive les définitions suivantes.

Considérons l'espace de suites N-périodiques

$$P_N = \{(y_k)_{k\in\mathbb{Z}} \mid y_k \in \mathbb{C},\ y_{k+N} = y_k\}. \tag{5.5}$$

Définition 5.1 *La transformée de Fourier discrète* (DFT) de $y \in P_N$ est la suite $(z_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ où

$$z_k = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell e^{-ikx_\ell} = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \omega^{-k\ell} \qquad \text{avec} \qquad \omega = e^{2\pi i/N}.$$

On la dénote $z = \mathcal{F}_N y$.

Propriétés de la DFT.

a) Pour $y \in P_N$ on a que $\mathcal{F}_N y \in P_N$.

b) L'application $\mathcal{F}_N : P_N \to P_N$ est linéaire et bijective.

c) L'application inverse de $\mathcal{F}_N$ est donnée par

$$\mathcal{F}_N^{-1} = N \cdot \overline{\mathcal{F}}_N \tag{5.6}$$

où

$$(\overline{\mathcal{F}}_N z)_k := \overline{(\mathcal{F}_N \overline{z})_k} = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} z_\ell \omega^{k\ell}. \tag{5.7}$$

Démonstration. En utilisant $\omega^N = e^{2\pi i} = 1$ et $\omega^{-\ell N} = (\omega^N)^{-\ell} = 1$, on obtient

$$z_{k+N} = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \omega^{-(k+N)\ell} = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \omega^{-k\ell} = z_k,$$

ce qui montre la périodicité de la suite (z_k).

La linéarité de $\mathcal{F}_N$ est triviale. Pour montrer sa bijectivité et en même temps la formule (5.6), nous calculons

$$\begin{aligned}(\overline{\mathcal{F}}_N \mathcal{F}_N y)_j &= \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} (\mathcal{F}_N y)_k \omega^{kj} = \frac{1}{N^2}\sum_{k=0}^{N-1}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \omega^{-k\ell}\omega^{kj} \\ &= \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \Big(\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} \omega^{k(j-\ell)}\Big) = \frac{1}{N} y_j.\end{aligned}$$

La dernière égalité de ce calcul est une conséquence de

$$\sum_{k=0}^{N-1} \omega^{km} = \sum_{k=0}^{N-1} (\omega^m)^k = \begin{cases} N & \text{si} m = 0 \pmod N \\ \frac{\omega^{mN}-1}{\omega^m - 1} = 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

en observant que $\omega^m = 1$ si $m = 0 \pmod N$. □

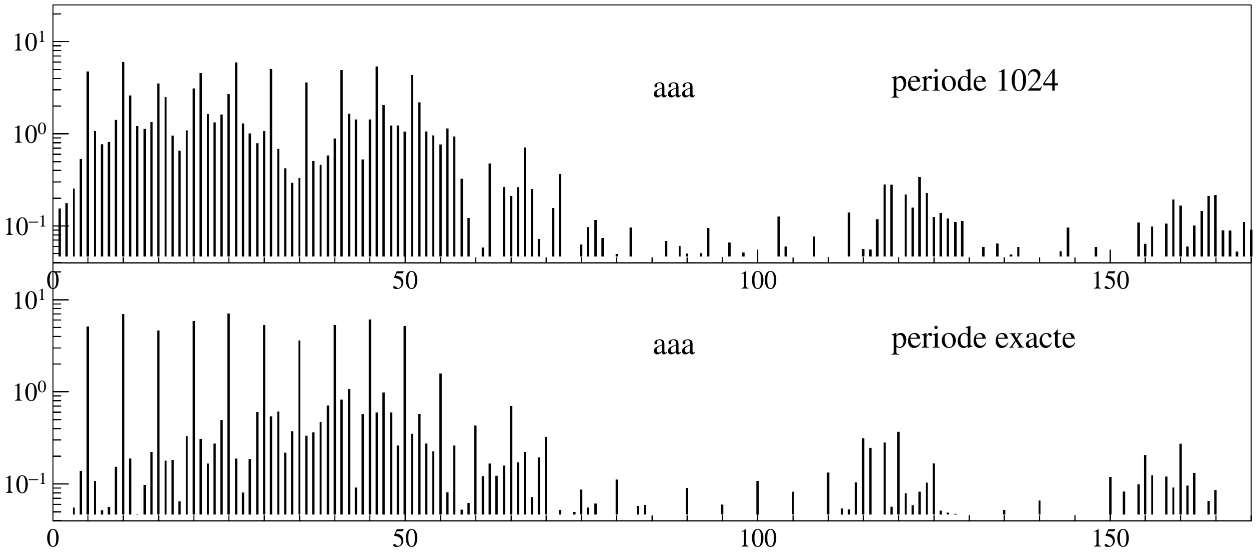


FIG. II.11 – *Le spectrogramme pour le son de la fig. II.10*

Exemple. Pour les $N = 1024$ données de la fig. II.10, on a calculé la transformée de Fourier discrète $z = \mathcal{F}_N y$. La suite $\{|z_k|\}$ est dessinée dans l'image du dessus de la fig. II.11 pour $k = 1, \ldots, 170$ (comme les y_i sont réels, on a $z_{-k} = \bar{z}_k$; pour $170 < k < N/2$ les $|z_k|$ sont plus petits que 0.072). On voit bien que les fréquences dominantes du son sont situées dans l'intervalle $|k| \leq 60$ (parce que la longueur de l'intervalle dans la fig. II.10 est de $1024/22000$ secondes, la valeur $k = 60$ correspond à $60 * 22000/1024 \approx 1390$Hz).

La théorie de ce paragraphe est basée sur le fait que $f(x)$ est une fonction périodique. Mais, la période du signal de la fig. II.10 n'est visiblement pas égale à $N = 1024$. Elle est plutôt proche de $N = 997$. Si l'on calcule 1024 valeurs de $f(x)$ sur une période exacte (par interpolation linéaire) et leur transformée de Fourier discrète on obtient l'image du dessous de la fig. II.11. Cette fois, on peut beaucoup mieux observer la fréquence principale ($5 * 22000/997 \approx 110$Hz) ainsi que les harmoniques (multiples de la fréquence principale).

Etude de l'erreur. Supposons maintenant que

$$y_\ell = f(x_\ell), \qquad x_\ell = \frac{2\pi\ell}{N}, \qquad \ell = 0, 1, \ldots, N$$

pour une fonction $f : I\!R \to C\!\!\!\!I$ qui est 2π-périodique. La formule suivante décrit comment la transformée de Fourier discrète (5.4) approche les coefficients de Fourier.

Théorème 5.2 *Si la série $\sum_{k\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(k)$ est absolument convergente,*

$$\widehat{f}_N(k) - \widehat{f}(k) = \sum_{\substack{j\in\mathbb{Z} \\ j\neq 0}} \widehat{f}(k + jN). \tag{5.8}$$

Démonstration. L'hypothèse sur les coefficients de Fourier implique qu'on ait égalité dans (5.1) (voir le cours d'Analyse II). Par conséquent, on a

$$\widehat{f}_N(k) = \frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1}\Big(\sum_{n\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(n)e^{inx_\ell}\Big)\omega^{-k\ell} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(n) \underbrace{\Big(\frac{1}{N}\sum_{\ell=0}^{N-1}\omega^{(n-k)\ell}\Big)}_{= \begin{cases} 1 & \text{si } n = k \,(\mathrm{mod}\, N) \\ 0 & \text{sinon}\end{cases}} = \sum_{j\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(k + jN)$$

□

Corollaire 5.3 *Soit $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ p fois continûment différentiable ($p \geq 2$) et 2π-périodique. Alors,*

$$\widehat{f}_N(k) - \widehat{f}(k) = \mathcal{O}(N^{-p}) \qquad \textit{pour} \qquad |k| \leq N/2. \tag{5.9}$$

En particulier, avec $h = 2\pi/N$, on a

$$h \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j) - \int_0^{2\pi} f(x)\,dx = \mathcal{O}(h^p), \tag{5.10}$$

ce qui signifie que, pour des fonctions lisses et périodiques, la formule de trapèze est très précise.

Démonstration. Montrons d'abord que les coefficients de Fourier satisfont

$$|\widehat{f}(k)| \leq C \cdot |k|^{-p} \qquad \text{pour} \quad k \neq 0. \tag{5.11}$$

En effet, plusieurs intégrations par parties nous donnent

$$\begin{aligned}\widehat{f}(k) &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(x)e^{-ikx}\,dx = \underbrace{f(x)\frac{e^{-ikx}}{-ik}\Big|_0^{2\pi}}_{0} + \frac{(ik)^{-1}}{2\pi}\int_0^{2\pi} f'(x)e^{-ikx}\,dx \\ &= \ldots = \frac{(ik)^{-p}}{2\pi}\int_0^{2\pi} f^{(p)}(x)e^{-ikx}\,dx\end{aligned}$$

et il en résulte (5.11) avec $C = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |f^{(p)}(x)|\,dx$.

Pour $|k| \leq N/2$ et $j \neq 0$ on a que $|k + jN| \geq (|j| - 1/2)N$ et on obtient de (5.8) que

$$|\widehat{f}_N(k) - \widehat{f}(k)| \leq 2\sum_{j\geq 1} C(j-1/2)^{-p}N^{-p} = C_1 \cdot N^{-p}.$$

Observons que la série dans cette formule converge pour $p > 1$. □

Attention. On sait que $\widehat{f}_N(k)$ est une suite N-périodique (propriété de la DFT) et que $\widehat{f}(k)$ converge très rapidement vers zéro (voir (5.11)). Ainsi, pour k grand (disons $k \approx N$), $\widehat{f}_N(k)$ est une mauvaise approximation de $\widehat{f}(k)$. Pour $|k| \leq N/2$, elle est en général très bonne.

Interpolation trigonométrique. Pour la division équidistante (5.3) de l'intervalle $[0, 2\pi]$ et pour $y_0, y_1, \ldots, y_{N-1}$ donnés, on cherche un polynôme trigonométrique (une combinaison linéaire finie de fonctions e^{ikx}) passant par (x_ℓ, y_ℓ) pour $\ell = 0, 1, \ldots, N-1$.

Théorème 5.4 *Soit $y \in P_N$ et $z = \mathcal{F}_N y$ sa transformée de Fourier discrète. Si N est pair, le polynôme trigonométrique*

$$p_N(x) = {\sum_{k=-N/2}^{N/2}}' z_k e^{ikx} := \frac{1}{2}\Big(z_{-N/2}e^{-iNx/2} + z_{N/2}e^{iNx/2}\Big) + \sum_{|k|<N/2} z_k e^{ikx} \tag{5.12}$$

satisfait $p_N(x_\ell) = y_\ell$ pour $\ell = 0, 1, \ldots, N-1$.

Remarque. Si les y_k sont réels, $\{z_k\}$ est une suite hermitienne (c.-à-d., $z_{-k} = \overline{z}_k$) et le polynôme $p_N(x)$ est une fonction réelle.

Démonstration. Pour ℓ fixé, la suite $\{z_k e^{ikx_\ell}\}$ est N-périodique en k. Ainsi,

$$p_N(x_\ell) = \sum_{k=0}^{N-1} z_k e^{ikx_\ell} = N \cdot (\overline{\mathcal{F}}_N z)_\ell = N \cdot (\overline{\mathcal{F}}_N \mathcal{F}_N y)_\ell = y_\ell. \qquad □$$

Théorème 5.5 (Erreur de l'interpolation trigonométrique) *Soit $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ une fonction 2π-périodique telle que $\sum_{k\in\mathbb{Z}} \widehat{f}(k)$ soit absolument convergente. Alors, le polynôme trigonométrique (5.12) pour $y_\ell = f(x_\ell)$ satisfait pour tout $x \in \mathbb{R}$*

$$|f(x) - p_N(x)| \leq 2 \sum_{|k|\geq N/2}{}' \, |\widehat{f}(k)|. \tag{5.13}$$

Démonstration. On soustrait (5.1) de (5.12):

$$f(x) - p_N(x) = \sum_{k=-N/2}^{N/2}{}' \, (\widehat{f}(k) - \widehat{f}_N(k))e^{ikx} + \sum_{|k|\geq N/2}{}' \, \widehat{f}(k)e^{ikx}.$$

L'assertion est donc une conséquence de (5.8) et de l'inégalité de triangle. □

Ce théorème permet une interprétation intéressante. Considérons une fonction 2π-périodique de fréquence maximale M (c.-à-d., $\widehat{f}(k) = 0$ pour $|k| > M$). Alors, le polynôme trigonométrique $p_N(x)$ donne le résultat exact ($p_N(x) = f(x)$ pour tout x) si

$$N > 2M. \tag{5.14}$$

Ce résultat – le *théorème d'échantillonnage* – nous donne une formule pour le nombre d'échantillons nécessaires pour une représentation exacte d'une telle fonction.

Pour notre exemple (fig. II.10 et fig. II.11), la fréquence maximale est d'environ 1390Hz (c.-à-d., $M \approx 60$). Alors, $N = 128$ échantillons sont suffisants pour représenter correctement le

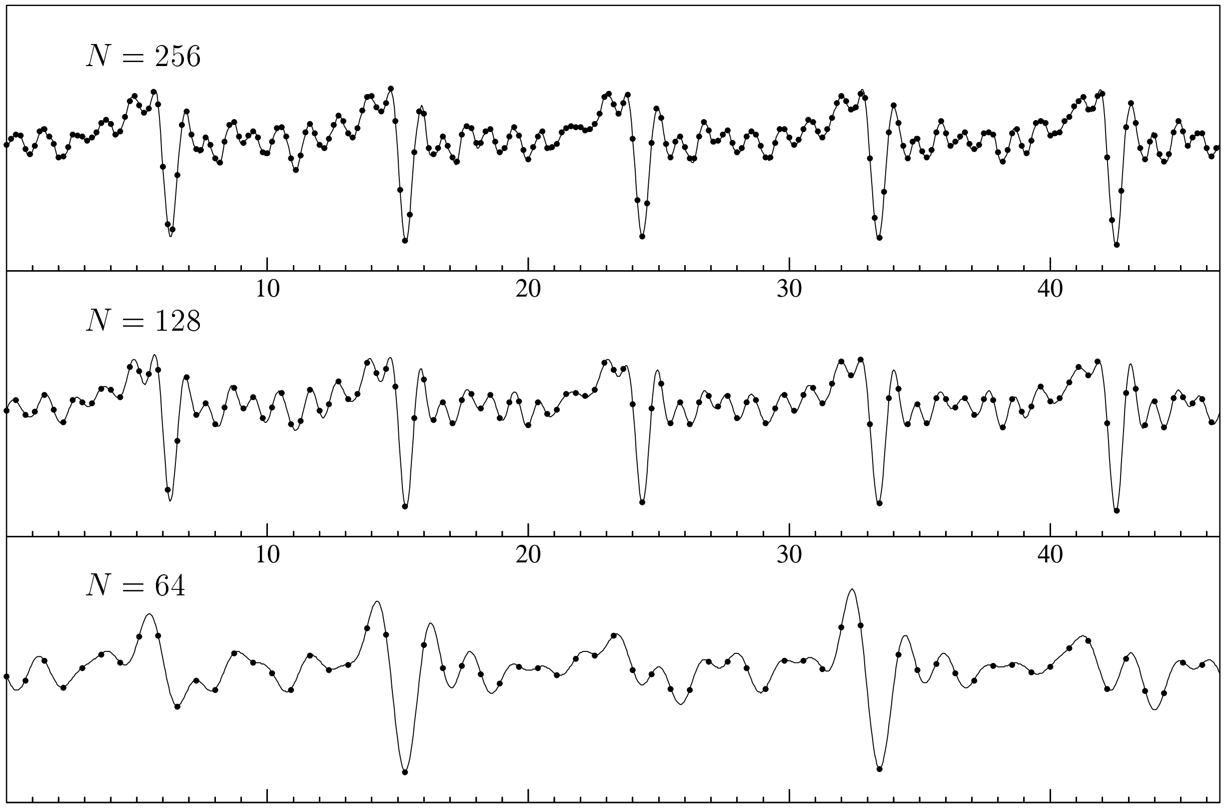


FIG. II.12 – *Interpolation trigonométrique* signal de la fig. II.10. Dans la fig. II.12 sont dessinés les polynômes trigonométriques $p_N(x)$ (pour $N = 64$, 128 et 256) passant par

$$y_\ell \qquad \text{pour} \qquad \ell = 0 \,(\operatorname{mod} 1024/N)$$

où y_ℓ sont les données de la fig. II.10. On voit bien la bonne représentation à partir de $N = 128$. Il suffit alors d'utiliser chaque $8^{\text{ème}}$ échantillon (compression des données).

II.6 Transformation de Fourier rapide (FFT)

Un calcul direct de $\mathcal{F}_N y$ nécessite N^2 multiplications et additions. Dans ce paragraphe, nous présentons un algorithme qui fait le même travail en $N \log_2 N$ opérations. Cet algorithme est dû à Cooley & Tukey (1965); il est basé sur des idées de Runge (1925).

Lemme 6.1 *Soient $u = (u_0, u_1, \ldots, u_{N-1}) \in P_N$, $v = (v_0, v_1, \ldots, v_{N-1}) \in P_N$ et définissons*

$$y = (u_0, v_0, u_1, v_1, \ldots, u_{N-1}, v_{N-1}) \in P_{2N}. \tag{6.1}$$

Alors, pour $k = 0, 1, \ldots, N-1$, on a ($\omega_{2N} = e^{2\pi i/2N} = e^{\pi i/N}$)

$$\begin{aligned} 2N(\mathcal{F}_{2N} y)_k &= N(\mathcal{F}_N u)_k + \omega_{2N}^{-k}\, N(\mathcal{F}_N v)_k \\ 2N(\mathcal{F}_{2N} y)_{k+N} &= N(\mathcal{F}_N u)_k - \omega_{2N}^{-k}\, N(\mathcal{F}_N v)_k. \end{aligned} \tag{6.2}$$

Démonstration. En utilisant $\omega_{2N}^2 = \omega_N$, un calcul direct nous donne (k arbitraire)

$$\begin{aligned} 2N(\mathcal{F}_{2N} y)_k &= \sum_{j=0}^{2N-1} y_j e^{-2\pi i jk/2N} = \sum_{j=0}^{2N-1} y_j \omega_{2N}^{-jk} \\ &= \sum_{\ell=0}^{N-1} \underbrace{y_{2\ell}}_{u_\ell} \underbrace{\omega_{2N}^{-2\ell k}}_{\omega_N^{-\ell k}} + \sum_{\ell=0}^{N-1} \underbrace{y_{2\ell+1}}_{v_\ell} \underbrace{\omega_{2N}^{-(2\ell+1)k}}_{\omega_{2N}^{-k} \cdot \omega_N^{-\ell k}} = N(\mathcal{F}_N u)_k + \omega_{2N}^{-k}\, N(\mathcal{F}_N v)_k. \end{aligned}$$

La deuxième formule de (6.2) résulte de $\omega_{2N}^N = -1$. □

La formule (6.2) nous permet de calculer (avec N multiplications et $2N$ additions) la transformée de Fourier discrète de $y \in P_{2N}$ à partir de $\mathcal{F}_N u$ et $\mathcal{F}_N v$. La même procédure peut être appliquée récursivement aux suites u et v si elles ont une longueur paire. Si l'on suppose que

$N = 2^m$, on obtient l'algorithme présenté dans le schéma suivant (pour $N = 8 = 2^3$)

$$
N \cdot \mathcal{F}_N \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \end{pmatrix}
\begin{array}{l} / \\ \\ \backslash \end{array}
\begin{array}{l}
(N/2) \cdot \mathcal{F}_{N/2} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_2 \\ y_4 \\ y_6 \end{pmatrix}
\begin{array}{l} / \\ \backslash \end{array}
\begin{array}{l}
(N/4) \cdot \mathcal{F}_{N/4} \begin{pmatrix} y_0 \\ y_4 \end{pmatrix} \begin{array}{l} / \ \mathcal{F}_{N/8} y_0 = y_0 \\ \backslash \ \mathcal{F}_{N/8} y_4 = y_4 \end{array} \\
(N/4) \cdot \mathcal{F}_{N/4} \begin{pmatrix} y_2 \\ y_6 \end{pmatrix} \begin{array}{l} / \ \mathcal{F}_{N/8} y_2 = y_2 \\ \backslash \ \mathcal{F}_{N/8} y_6 = y_6 \end{array}
\end{array} \\
(N/2) \cdot \mathcal{F}_{N/2} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_3 \\ y_5 \\ y_7 \end{pmatrix}
\begin{array}{l} / \\ \backslash \end{array}
\begin{array}{l}
(N/4) \cdot \mathcal{F}_{N/4} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_5 \end{pmatrix} \begin{array}{l} / \ \mathcal{F}_{N/8} y_1 = y_1 \\ \backslash \ \mathcal{F}_{N/8} y_5 = y_5 \end{array} \\
(N/4) \cdot \mathcal{F}_{N/4} \begin{pmatrix} y_3 \\ y_7 \end{pmatrix} \begin{array}{l} / \ \mathcal{F}_{N/8} y_3 = y_3 \\ \backslash \ \mathcal{F}_{N/8} y_7 = y_7 \end{array}
\end{array}
\end{array}
\tag{6.3}
$$

La programmation de cet algorithme se fait en deux étapes. D'abord, on met les $\{y_i\}$ dans l'ordre exigé par l'algorithme (6.3), c.-à-d. qu'il faut inverser les bits dans la représentation binaire des indices:

$$
\begin{array}{ccc}
0 \doteq (0,0,0) & & 0 \doteq (0,0,0) \\
1 \doteq (0,0,1) & & 4 \doteq (1,0,0) \\
2 \doteq (0,1,0) & & 2 \doteq (0,1,0) \\
3 \doteq (0,1,1) & & 6 \doteq (1,1,0) \\
4 \doteq (1,0,0) & \longleftrightarrow & 1 \doteq (0,0,1) \\
5 \doteq (1,0,1) & & 5 \doteq (1,0,1) \\
6 \doteq (1,1,0) & & 3 \doteq (0,1,1) \\
7 \doteq (1,1,1) & & 7 \doteq (1,1,1)
\end{array}
$$

Après, on effectue les opérations de (6.2) comme indiqué dans le schéma (6.3). Pour une explication détaillée de la programmation voir le livre “Numerical Recipies”.[3]

Pour passer d'une colonne à une autre (dans le schéma (6.3)) on a besoin de $N/2$ multiplications complexes et de N additions (ou soustractions). Comme $m = \log_2 N$ passages sont nécessaires, on a

Théorème 6.2 *Pour $N = 2^m$, le calcul de $\mathcal{F}_N y$ peut être effectué en* $\dfrac{N}{2}\log_2 N$ *multiplications complexes et* $N \log_2 N$ *additions complexes.* □

Pour mieux illustrer l'importance de cet algorithme, nous comparons dans le tableau II.2 le nombre d'opérations nécessaires pour le calcul de $\mathcal{F}_N y$ – avec ou sans FFT.

Applications de la FFT. A part le calcul d'un spectrogramme (voir la fig. II.11), la transformation de Fourier rapide a encore beaucoup d'autres applications.

a) La propriété (voir exercice 6)

$$
\mathcal{F}_N(y * z) = N \cdot \mathcal{F}_N y \cdot \mathcal{F}_N z \tag{6.4}
$$

3. W.H. Press, B.R. Flannery, S.A. Teukolsky & W.T. Vetterling (1989): *Numerical Recipies. The Art of Scientific Computing* (FORTRAN Version). Cambridge University Press.

TAB. II.2 – *Comparaison de nombres d'opérations*

N	N^2	$N\log_2 N$	quotient
$2^5=32$	$\approx 10^3$	160	≈ 6.4
$2^{10}\approx 10^3$	$\approx 10^6$	$\approx 10^4$	≈ 100
$2^{20}\approx 10^6$	$\approx 10^{12}$	$\approx 2\cdot 10^7$	$\approx 5\cdot 10^4$

pour la *convolution*

$$(y*z)_k=\sum_{\ell=0}^{N-1} y_{k-\ell}\, z_\ell \tag{6.5}$$

de deux suites N-périodiques implique que $y*z=N\cdot\mathcal{F}_N^{-1}(\mathcal{F}_N y\cdot\mathcal{F}_N z)$ peut être calculé en $\mathcal{O}(N\log_2 N)$ opérations.

b) Résolution d'un système linéaire avec une matrice de Toeplitz circulaire

$$\begin{pmatrix} a_0 & a_{N-1} & a_{N-2} & \cdots & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_{N-1} & \cdots & a_2 \\ a_2 & a_1 & a_0 & \cdots & a_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1} & a_{N-2} & a_{N-3} & \cdots & a_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-1}\end{pmatrix}. \tag{6.6}$$

Evidemment, le système linéaire (6.6) est équivalent à $a*x=b$ si l'on considère (a_i), (x_i) et (b_i) comme des suites dans P_N. On obtient la solution de (6.6) en $\mathcal{O}(N\log_2 N)$ opérations avec la formule

$$x=N^{-1}\cdot\mathcal{F}_N^{-1}(\mathcal{F}_N b/\mathcal{F}_N a) \tag{6.7}$$

où la division est effectuée élément par élément.

c) Multiplication d'une matrice de Toeplitz arbitraire avec un vecteur

$$\begin{pmatrix} a_0 & a_{-1} & a_{-2} & \cdots & a_{-N+1} \\ a_1 & a_0 & a_{-1} & \cdots & a_{-N+2} \\ a_2 & a_1 & a_0 & \cdots & a_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1} & a_{N-2} & a_{N-3} & \cdots & a_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1}\end{pmatrix}. \tag{6.8}$$

En considérant les suites dans P_{2N}

$$\begin{aligned} a &=(a_0,a_1,\ldots,a_{N-1},0,a_{-N+1},a_{-N+2},\ldots,a_{-1}) \\ x &=(x_0,x_1,\ldots,x_{N-1},0,0,\ldots,0) \end{aligned}$$

on vérifie facilement que le résultat du produit (6.8) est la première moitié de la convolution $a*x$. Le calcul de la convolution avec FFT donne alors un algorithme rapide pour effectuer le produit (6.8).

II.7 Interpolation par fonctions spline

Le mot "spline" (anglais) signifie "languette élastique". On s'intéresse à la courbe décrite par une languette forcée de passer par un nombre fini de points donnés (disons par (x_i,y_i) pour $i=$

$0, 1, \ldots, n$). La fig. II.13 montre le spline passant par les mêmes données que pour la fig. II.1 (pour pouvoir le comparer avec le polynôme d'interpolation).

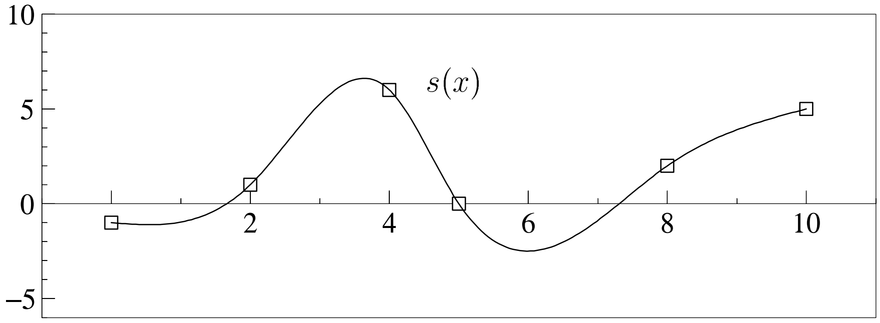


FIG. II.13 – *Spline cubique (à comparer avec fig. II.1)*

Mathématiquement, ce problème peut être formulé comme suit: on cherche une fonction $s : [a, b] \to I\!R$ ($a = x_0$, $b = x_n$) satisfaisant

(S1) $s(x_i) = y_i$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$;

(S2) $s(x)$ est 2 fois continûment différentiable;

(S3) $\displaystyle\int_a^b (s''(x))^2\, dx \to \min.$

L'intégrale dans (S3) représente l'énergie de la languette déformée qui, par le principe de Maupertius, est supposée minimale.

Théorème 7.1 *Soit* $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ *une division donnée,* $s : [a, b] \to I\!R$ *et* $f : [a, b] \to I\!R$ *deux fonctions qui vérifient (S1) et (S2). Supposons que*

$$s''(b)\Big(f'(b) - s'(b)\Big) = s''(a)\Big(f'(a) - s'(a)\Big) \tag{7.1}$$

et que $s(x)$ *soit un polynôme de degré* 3 *sur chaque sous-intervalle* $[x_{i-1}, x_i]$*. Alors, on a*

$$\int_a^b (s''(x))^2\, dx \le \int_a^b (f''(x))^2\, dx. \tag{7.2}$$

Démonstration. Cherchons des conditions suffisantes pour $s(x)$ afin de satisfaire (S3). Pour ceci nous considérons des fonctions voisines $f(x) = s(x) + \epsilon h(x)$ où $\epsilon \in I\!R$ et $h(x)$ est de classe $\mathcal{C}^2$ et vérifie

$$h(x_i) = 0 \qquad \text{pour} \quad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{7.3}$$

Chaque fonction $f(x)$ satisfaisant (S1) et (S2) peut être obtenue de cette manière. La condition (S3) s'écrit alors

$$\begin{aligned}\int_a^b (s''(x))^2\, dx &\le \int_a^b (s''(x) + \epsilon h''(x))^2\, dx \\ &= \int_a^b (s''(x))^2\, dx + 2\epsilon \int_a^b s''(x)h''(x)\, dx + \epsilon^2 \int_a^b (h''(x))^2\, dx\end{aligned}$$

(pour tout $\epsilon \in I\!R$), ce qui est équivalent à

$$\int_a^b s''(x)h''(x)\, dx = 0 \tag{7.4}$$

pout tout $h \in \mathcal{C}^2$ vérifiant (7.3). En supposant $s(x)$ 3 fois différentiable sur chaque sous-intervalle de la division, on obtient par intégration par parties que

$$s''(x)h'(x)\,\Big|_a^b - \int_a^b s'''(x)h'(x)\,dx = 0. \tag{7.5}$$

L'hypothèse (7.1) implique que la première expression de (7.5) est nulle. Comme $s'''(x)$ est constant sur (x_{i-1}, x_i), disons égal à α_i, la deuxième expression de (7.5) devient

$$\int_a^b s'''(x)h'(x)\,dx = \sum_{i=1}^n \alpha_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} h'(x)\,dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i(h(x_i) - h(x_{i-1})) = 0$$

par (7.3). Ainsi, (7.4) et par conséquent (7.2) aussi sont vérifiés. □

Le théorème précédent montre que les candidats à la solution de (S1-S3) sont des fonctions de classe $\mathcal{C}^2$ qui sont des polynômes de degré 3 par morceaux.

Définition 7.2 *Soit $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ une division de $[a, b]$. Une fonction $s \in \mathcal{C}^2[a, b]$ s'appelle spline (cubique) si, sur chaque intervalle $[x_{i-1}, x_i]$, elle est un polynôme de degré 3.*

Pour satisfaire la condition (7.1), on a plusieurs possibilités:

– *spline naturel:* on suppose que

$$s''(a) = 0 \qquad \text{et} \qquad s''(b) = 0. \tag{7.6}$$

– *spline scellé:* on suppose données les pentes aux extrémités

$$s'(a) = p_0 \qquad \text{et} \qquad s'(b) = p_n. \tag{7.7}$$

– *spline périodique:* on suppose que

$$s'(a) = s'(b) \qquad \text{et} \qquad s''(a) = s''(b). \tag{7.8}$$

Evidemment, pour le spline scellé, la condition (7.1) est seulement satisfaite si la fonction $f(x)$ vérifie aussi la condition (7.7). Alors, $s(x)$ minimise l'intégrale de (S3) seulement dans la classe de fonctions dont les pentes sont fixées aux extrémités. Pour le spline périodique, la situation est analogue.

Le but suivant est de dériver une construction du spline vérifiant $s(x_i) = y_i$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$ et une des conditions (7.6)-(7.8).

Interpolation d'Hermite. Considérons un seul sous-intervalle $[x_{i-1}, x_i]$ et cherchons un polynôme $s_i(x)$ de degré 3 vérifiant

$$s_i(x_{i-1}) = y_{i-1}, \qquad s_i(x_i) = y_i, \qquad s_i'(x_{i-1}) = p_{i-1}, \qquad s_i'(x_i) = p_i. \tag{7.9}$$

La solution peut être obtenue par la formule de Newton en remplaçant les deux dernières conditions de (7.9) par $s_i(x_{i-1} + \epsilon) = y_{i-1} + \epsilon p_{i-1}$ et $s_i(x_i - \epsilon) = y_i - \epsilon p_i$, et en considérant la limite $\epsilon \to 0$. Les différences divisées corresponadant aux données (7.9) sont présentées dans le tableau II.3 ($h_{i-1} := x_i - x_{i-1}$). En utilisant les valeurs encadrées pour la formule de Newton, on obtient

$$s_i(x) = y_{i-1} + (x - x_{i-1})\,\delta y[x_i, x_{i-1}] \tag{7.10}$$

TAB. II.3 – *Différences divisées pour l'interpolation d'Hermite*

$$
\begin{array}{c|ccccc}
x_{i-1} & y_{i-1} & & & & \\
 & & p_{i-1} & & & \\
x_{i-1} & \boxed{y_{i-1}} & & \boxed{h_{i-1}^{-1}(\delta y[x_i,x_{i-1}]-p_{i-1})} & & \\
 & & \boxed{\delta y[x_i,x_{i-1}]} & & & \boxed{h_{i-1}^{-2}(p_i+p_{i-1}-2\delta y[x_i,x_{i-1}])} \\
x_i & y_i & & h_{i-1}^{-1}(p_i-\delta y[x_i,x_{i-1}]) & & \\
 & & p_i & & & \\
x_i & y_i & & & &
\end{array}
$$

$$
+\ \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{h_{i-1}^2}\Big((p_i-\delta y[x_i,x_{i-1}])(x-x_{i-1})+(p_{i-1}-\delta y[x_i,x_{i-1}])(x-x_i)\Big).
$$

Construction du spline interpolant. Pour chaque choix de $p_0,p_1,\ldots,p_n$, la fonction $s:[a,b]\to I\!R$, définie par $s(x)=s_i(x)$ pour $x\in[x_{i-1},x_i]$, satisfait

a) $s(x_i)=y_i$ pour $i=0,1,\ldots,n$;

b) $s(x)$ est de classe $\mathcal{C}^1$ et $s'(x_i)=p_i$ pour $i=0,1,\ldots,n$;

c) sur chaque intervalle $[x_{i-1},x_i]$, $s(x)$ est un polynôme de degré 3.

Pour construire le spline interpolant, il reste à déterminer les pentes $p_0,p_1,\ldots,p_n$ de manière à ce que $s''(x)$ soit continue, c.-à-d.,

$$
s_i''(x_i)=s_{i+1}''(x_i),\qquad i=1,\ldots,n-1, \tag{7.11}
$$

et qu'une des conditions (7.6)-(7.8) soit satisfaite. En dérivant (7.10) deux fois, on obtient

$$
\begin{aligned}
s_i''(x_i)&=\frac{2}{h_{i-1}}(2p_i+p_{i-1}-3\,\delta y[x_i,x_{i-1}])\\
s_i''(x_{i-1})&=-\frac{2}{h_{i-1}}(p_i+2p_{i-1}-3\,\delta y[x_i,x_{i-1}]).
\end{aligned}
$$

La condition (7.11) devient alors

$$
\frac{p_{i-1}}{h_{i-1}}+p_i\cdot 2\cdot\Big(\frac{1}{h_{i-1}}+\frac{1}{h_i}\Big)+\frac{p_{i+1}}{h_i}=3\Big(\frac{\delta y[x_i,x_{i-1}]}{h_{i-1}}+\frac{\delta y[x_{i+1},x_i]}{h_i}\Big)\qquad \text{pour}\quad i=1,\ldots,n-1. \tag{7.12}
$$

Ceci donne $n-1$ équations linéaires pour les $n+1$ inconnues $p_0,p_1,\ldots,p_n$. Les deux dernières conditions sont données par le type du spline.

Pour le *spline naturel*, la condition (7.6) donne

$$
\begin{aligned}
2p_0+p_1&=3\,\delta y[x_1,x_0]\\
p_{n-1}+2p_n&=3\,\delta y[x_n,x_{n-1}].
\end{aligned} \tag{7.6'}
$$

Pour le *spline scellé*, les valeurs de p_0 et p_n sont explicitement données et, pour le *spline périodique*, on ajoute les conditions $p_n=p_0$ et

$$
\frac{p_{n-1}}{h_{n-1}}+p_0\cdot 2\cdot\Big(\frac{1}{h_{n-1}}+\frac{1}{h_0}\Big)+\frac{p_1}{h_0}=3\Big(\frac{\delta y[x_n,x_{n-1}]}{h_{n-1}}+\frac{\delta y[x_1,x_0]}{h_0}\Big). \tag{7.8'}
$$

Le système linéaire ainsi obtenu s'écrit matriciellement (pour le spline scellé)

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2\left(\frac{1}{h_0}+\frac{1}{h_1}\right) & \frac{1}{h_1} & & & \\ \frac{1}{h_1} & 2\left(\frac{1}{h_1}+\frac{1}{h_2}\right) & \frac{1}{h_2} & & \\ & \frac{1}{h_2} & 2\left(\frac{1}{h_2}+\frac{1}{h_3}\right) & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \frac{1}{h_{n-2}} \\ & & & \frac{1}{h_{n-2}} & 2\left(\frac{1}{h_{n-2}}+\frac{1}{h_{n-1}}\right) \end{pmatrix}}_{A} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ \vdots \\ p_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix} \tag{7.13}$$

avec dec c_i convenables. Pour $i = 2, \ldots, n-2$, on a

$$c_i = 3\Big(\frac{\delta y[x_i, x_{i-1}]}{h_{i-1}} + \frac{\delta y[x_{i+1}, x_i]}{h_i}\Big),$$

et pour $i = 1$ et $i = n-1$, il faut encore soustraire le terme $f'(x_0)/h_0$ et $f'(x_n)/h_{n-1}$, respectivement. La matrice A est symétrique et tridiagonale.

Théorème 7.3 *Soit $Ap = c$ avec des c_i satisfaisant $|c_i| \leq \gamma$ pour tout i. Alors,*

$$|p_i| \leq \frac{h}{2}\gamma \qquad \textit{où} \qquad h = \max_{i=0,\ldots,n-1} h_i. \tag{7.14}$$

En particulier, A est inversible (poser $\gamma = 0$).

Démonstration. Soit p une solution de $Ap = c$ et choisissons l'indice ℓ de manière à ce que $|p_\ell| \geq |p_j|$ pour tout j. La ligne ℓ du système $Ap = c$ donne

$$p_\ell \cdot 2 \cdot \Big(\frac{1}{h_{\ell-1}} + \frac{1}{h_\ell}\Big) = -\frac{p_{\ell-1}}{h_{\ell-1}} - \frac{p_{\ell+1}}{h_\ell} + c_\ell$$

et, en prenant sa valeur absolue,

$$|p_\ell| \cdot 2 \cdot \Big(\frac{1}{h_{\ell-1}} + \frac{1}{h_\ell}\Big) \leq |p_\ell| \cdot \Big(\frac{1}{h_{\ell-1}} + \frac{1}{h_\ell}\Big) + \gamma.$$

On en déduit

$$|p_\ell| \leq \frac{h_\ell \cdot h_{\ell-1}}{h_\ell + h_{\ell-1}}\gamma \leq \frac{\max(h_\ell, h_{\ell-1})}{2}\gamma \leq \frac{h}{2}\gamma$$

car $h_\ell + h_{\ell-1} \geq 2 \cdot \min(h_\ell, h_{\ell-1})$. □

Conclusion. Le spline scellé *existe* toujours et il est *unique*. La même démonstration s'applique aussi au spline naturel et au spline périodique.

La résolution du système linéaire (7.13) se fait par élimination. On élimine la variable p_1 dans la ligne 2 à l'aide de la ligne 1, puis la variable p_2 dans la ligne 3 à l'aide de la ligne 2, etc. On obtient alors un système bidiagonal qui est facile à résoudre.

II.8 L'erreur du spline

Soient une fonction différentiable $f : [a, b] \to I\!R$ et une division $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. Considérons le spline $s(x)$ satisfaisant (spline scellé)

$$s(x_i) = f(x_i), \qquad i = 0, 1, \ldots, n \tag{8.1a}$$

$$s'(x_0) = f'(x_0), \qquad s'(x_n) = f'(x_n). \tag{8.1b}$$

Ce spline est donné par (7.10) où les coefficients p_i satisfont (7.12), $p_0 = f'(x_0)$ et $p_n = f'(x_n)$. Le but est d'étudier l'erreur $f(x) - s(x)$ pour $x \in [a, b]$.

L'idée importante est de considérer (sur $[x_{i-1}, x_i]$) également le polynôme d'interpolation d'Hermite $q_i(x)$, défini par

$$q_i(x_{i-1}) = f(x_{i-1}), \qquad q_i(x_i) = f(x_i), \qquad q_i'(x_{i-1}) = f'(x_{i-1}), \qquad q_i'(x_i) = f'(x_i). \tag{8.1}$$

Il est aussi donné par (7.10) si l'on remplace p_j par $f'(x_j)$. On va estimer séparément les deux termes dans la formule

$$f(x) - s_i(x) = (f(x) - q_i(x)) + (q_i(x) - s_i(x)). \tag{8.2}$$

Théorème 8.1 *Soit $f(x)$ de classe $\mathcal{C}^4$ et $q_i(x)$ le polynôme de degré 3 satisfaisant (8.1) (interpolation d'Hermite). Alors, pour $x \in [x_{i-1}, x_i]$, on a*

$$|f(x) - q_i(x)| \leq \frac{h_{i-1}^4}{384} \cdot \max_{\xi \in [x_{i-1}, x_i]} |f^{(4)}(\xi)|. \tag{8.3}$$

Démonstration. Si l'on calcule le polynôme d'interpolation de degré 3 passant par

$$(x_{i-1}, f(x_{i-1})), \qquad (x_{i-1} + \epsilon, f(x_{i-1} + \epsilon)), \qquad (x_i - \epsilon, f(x_i - \epsilon)), \qquad (x_i, f(x_i))$$

avec la formule de Newton, on obtient pour $\epsilon \to 0$ exactement le polynôme $q_i(x)$ (voir le tableau II.3 des différences divisées). L'erreur de ce polynôme d'interpolation peut être estimée par (voir le paragraphe II.2)

$$|(x - x_{i-1})(x - x_{i-1} - \epsilon)(x - x_i + \epsilon)(x - x_i)| \cdot \frac{|f^{(4)}(\xi)|}{4!} .$$

Donc, pour $\epsilon \to 0$,

$$|f(x) - q_i(x)| \leq (x - x_{i-1})^2 (x - x_i)^2 \cdot \frac{1}{4!} \cdot \max_{\xi \in [x_{i-1}, x_i]} |f^{(4)}(\xi)| .$$

Comme la fonction $(x - x_{i-1})^2 (x - x_i)^2$ possède son maximum au milieu de l'intervalle $[x_{i-1}, x_i]$, on obtient l'estimation (8.3). □

Pour estimer la deuxième expression de (8.2), nous soustrayons la formule (7.10) pour $s_i(x)$ de la formule analogue pour $q_i(x)$ et nous obtenons

$$q_i(x) - s_i(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h_{i-1}^2} \Big((f'(x_i) - p_i)(x - x_{i-1}) + (f'(x_{i-1}) - p_{i-1})(x - x_i) \Big). \tag{8.4}$$

Il nous faut encore une estimation de $f'(x_i) - p_i$.

Lemme 8.2 *Soit $f(x)$ de classe $\mathcal{C}^4$ sur $[a,b]$ et notons $h = \max_i h_i$ où $h_i = x_{i+1} - x_i$. Si les p_i satisfont (7.12), $p_0 = f'(x_0)$ et $p_n = f'(x_n)$,*

$$|f'(x_i) - p_i| \le \frac{h^3}{24} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|. \tag{8.5}$$

Si la division est équidistante et si $f \in \mathcal{C}^5[a,b]$,

$$|f'(x_i) - p_i| \le \frac{h^4}{60} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(5)}(x)|. \tag{8.6}$$

Démonstration. (cas équidistant). Les p_i sont définis par (voir (7.12))

$$\frac{1}{h}\Big(p_{i-1} + 4p_i + p_{i+1}\Big) - \frac{3}{h^2}\Big(f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})\Big) = 0. \tag{8.7}$$

Pour estimer la différence $f'(x_i) - p_i$, nous calculons le défaut qu'on obtient en remplaçant p_i par $f'(x_i)$ dans (8.7):

$$\frac{1}{h}\Big(f'(x_{i-1}) + 4f'(x_i) + f'(x_{i+1})\Big) - \frac{3}{h^2}\Big(f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})\Big) =: d_i. \tag{8.8}$$

En utilisant la formule de Taylor (voir le cours d'Analyse I) pour $f(x_i \pm h)$ et $f'(x_i \pm h)$, par exemple

$$f(x_i \pm h) = f(x_i) \pm hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!}f''(x_i) \pm \frac{h^3}{3!}f'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x_i) \pm h^5\int_0^1 \frac{(1-t)^4}{4!}\, f^{(5)}(x_i \pm th)\, dt,$$

on obtient

$$d_i = h^3\int_0^1 \Big(\frac{(1-t)^3}{3!} - 3\frac{(1-t)^4}{4!}\Big)\Big(f^{(5)}(x_i + th) + f^{(5)}(x_i - th)\Big)\, dt.$$

Comme la fonction $(1-t)^3/3! - 3(1-t)^4/4!$ ne change pas de signe sur $[0,1]$, ceci nous donne l'estimation

$$|d_i| \le h^3 \underbrace{\int_0^1 \Big(\frac{(1-t)^3}{3!} - 3\,\frac{(1-t)^4}{4!}\Big)\, dt \cdot 2}_{=\,1/30} \cdot \max_{x\in[x_{i-1},x_{i+1}]} |f^{(5)}(x)|\,.$$

Notons $d = (d_1, \ldots, d_{n-1})^T$ et $e = (e_1, \ldots, e_{n-1})^T$ où $e_i = f'(x_i) - p_i$. En prenant la différence entre (8.8) et (8.7), on obtient $Ae = d$ où A est la matrice de (7.13). Le théorème du paragraphe II.7 implique

$$|e_i| \le \frac{h}{2}\,\max_j |d_j| \le \frac{h^4}{60} \cdot \max_{x\in[a,b]} |f^{(5)}(x)|,$$

ce qu'il fallait démontrer. □

Théorème 8.3 (Erreur du spline scellé) *Soit $f : [a,b] \to I\!R$ de classe $\mathcal{C}^4$, $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$ une division arbitraire et $s(x)$ le spline qui passe par $(x_i, f(x_i))$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$ et qui satisfait $s'(x_0) = f'(x_0)$ et $s'(x_n) = f'(x_n)$. Alors, avec $h_i = x_{i+1} - x_i$ et $h = \max_i h_i$ on a*

$$|f(x) - s(x)| \le \frac{5}{384} \cdot h^4 \cdot \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|. \tag{8.9}$$

Si de plus la division est équidistante et si $f \in \mathcal{C}^5[a,b]$,

$$|f(x) - s(x)| \le \frac{h^4}{384} \cdot \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)| + \frac{h^5}{240} \cdot \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(5)}(\xi)|. \tag{8.10}$$

Démonstration. (cas équidistant). Pour $x \in [x_{i-1}, x_i]$, nous estimons séparément les deux termes dans (8.2). L'estimation du premier terme résulte de (8.3). Pour le deuxième terme, nous utilisons (8.4) et (8.6). Ceci donne

$$|q_i(x) - s_i(x)| \le \frac{(x - x_{i-1})(x_i - x)}{h_{i-1}^2} \cdot h_{i-1} \cdot \frac{h^4}{60} \cdot \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(5)}(\xi)| \le \frac{h^5}{4 \cdot 60} \cdot \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(5)}(\xi)|.$$

□

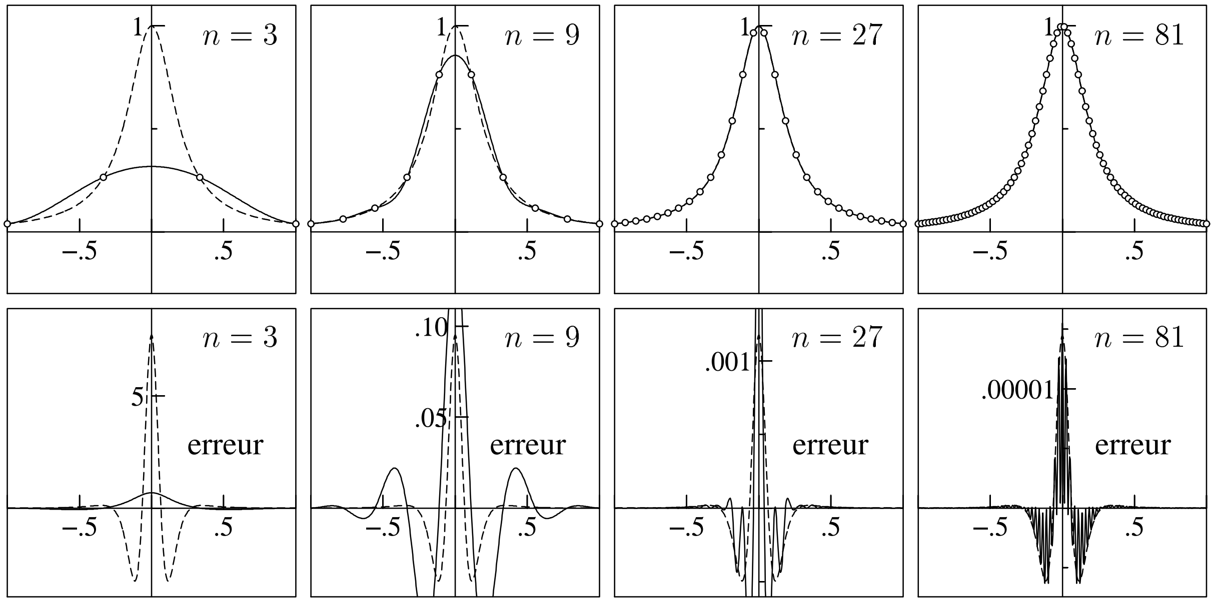


FIG. II.14 – *Spline interpolant (scellé) pour la fonction (8.11)*

Exemple. Considérons encore une fois (voir les fig. II.5 et II.6) la fonction

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2} \qquad \text{sur} \qquad [-1, 1] \tag{8.11}$$

et calculons le spline interpolant (scellé) pour la division équidistante $x_i = -1 + 2i/n$, $i = 0, 1, \ldots, n$. Dans la fig. II.14, les 4 dessins du haut montrent le spline $s(x)$ pour $n = 3$, $n = 9$, $n = 27$ et $n = 81$. La fonction $f(x)$ est dessinée en pointillés. Les 4 dessins du bas montrent les erreurs. Cette fois, la fonction $h^4 \cdot f^{(4)}(x)/384$ ($h = 2/n$) est inclue en pointillés (on a choisi l'échelle sur l'axe y de manière à ce que $h^4 \cdot f^{(4)}(0)/384$ soit toujours au même endroit). Pour des petits h, quand le deuxième terme de (8.10) est négligeable, on peut très bien observer la validité de l'estimation (8.10).

II.9 Exercices

1. Calculer le polynôme d'interpolation passant par les points
$$(0,0), \quad (1,3), \quad (3,1), \quad (5,2), \quad (8,2),$$
en utilisant la formule de Newton.

2. Démontrer (par induction) que
$$\delta^n y[x_0,\ldots,x_n] = \sum_{j=0}^{n} y_j \prod_{i\neq j} \frac{1}{x_j - x_i},$$
et en déduire que la différence divisée $\delta^n y[x_0,x_1,\ldots,x_n]$ est une fonction symétrique; c.-à-d. que, pour toute permutation σ de $\{0,1,\ldots,n\}$
$$\delta^n y[x_{\sigma(0)},x_{\sigma(1)},\ldots,x_{\sigma(n)}] = \delta^n y[x_0,x_1,\ldots,x_n].$$

3. Nous savons que l'erreur pour l'interpolation linéaire de f aux points x_0, x_1 est
$$f(x) - p(x) = (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\zeta(x))}{2}, \; x_0 < x < x_1,$$
si $f \in \mathcal{C}^2[x_0,x_1]$. Déterminer la fonction $\zeta(x)$ explicitement dans le cas où $f(x) = \frac{1}{x}$, $x_0 = 1$, $x_1 = 2$, et trouver $\max_{1\leq x\leq 2}\zeta(x)$ et $\min_{1\leq x\leq 2}\zeta(x)$.

4. On veut tabuler la fonction $y = \sin x$ aux points équidistants $x_j = jh, \; j \geq 0$.
   (a) Majorer l'erreur d'interpolation dans l'intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ lorsqu'on fait passer un polynôme de degré 3 par $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$.
   (b) Quel h peut-on prendre pour que cette erreur soit $\leq 10^{-8}$ pour tout $i > 0$?

5. (a) Montrer que la formule de quadrature
$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\,dx \approx \frac{\pi}{s}\sum_{k=1}^{s} f(c_k), \qquad c_k = \cos\Big(\frac{(2k-1)\pi}{2s}\Big) \tag{9.1}$$
   est exacte pour tout polynôme $f(x)$ de degré $\leq 2s-1$.
   Indication. Vérifier (9.1) pour les polynômes de Chebyshev $T_0(x),\ldots,T_{2s-1}(x)$.
   (b) Effectuez le changement de variables $x = \cos(t)$ dans (1), à quelle formule de quadrature se ramène t'on?

6. Considérer la fonction $f(x) = x^3$ sur l'intervalle $[-1,1]$.
   (a) Déterminer p tel que la droite $d(x) = px$ satisfait
$$\max_{x\in[-1,1]} |f(x) - d(x)| \to min.$$
   (b) Pour quels x_i, la droite trouvée peut être interprétée comme un polynôme d'interpolation pour $f(x)$?
   (c) Y-a-t'il une relation avec les points de Chebyshev? Si oui, expliquer laquelle.

7. Pour un polynôme $p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n$, l'algorithme de Horner permet de calculer $b_0 = p(x_0)$ par:
$$\begin{aligned} b_n &= a_n \\ b_i &= a_i + x_0 b_{i+1}, \qquad i = n-1,\ldots,1,0. \end{aligned}$$
   Notons $q(x) = b_1 + b_2 x + \ldots + b_n x^{n-1}$.
   a) Montrer que $p(x) = b_0 + (x-x_0)q(x)$ et que $p'(x_0) = q(x_0)$.
   b) Généraliser l'algorithme de Horner pour calculer $p(x_0)$ et $p'(x_0)$ en même temps.

8. Sur l'intervalle $[-1,1]$, considérons la fonction

$$f(x) = \frac{3x-4}{(x^2-9)(5x^2-8x+4)}.$$

Représenter graphiquement $f(x)$ et calculer ces pôles. Trouver (à l'aide de la figure II.8) l'intervalle maximal $[\alpha,\beta] \subset [-1,1]$ où la suite des polynômes d'interpolations (pour les divisions équidistantes $x_i = -1 + 2i/n$) converge (quand $n \to \infty$).

9. Pour une division $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ $(n \geq 2)$, étudier la fonction

$$\Lambda(x) = \sum_{i=0}^{n} |\ell_i(x)| , \qquad \ell_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{(x-x_j)}{(x_i - x_j)} . \tag{9.2}$$

a) Dessiner $\Lambda(x)$ pour $n = 2$ en considérant la division $\{-1, 0, 1\}$.
b) Montrer que, sur l'intervalle $[x_{j-1}, x_j]$, on a l'identité

$$\Lambda|_{[x_{j-1},x_j]}(x) = \sum_{i=0}^{n} \epsilon_i \ell_i(x) , \qquad \text{avec} \qquad \epsilon_i = \begin{cases} (-1)^{j-i+1} & \text{si } i \leq j-1 \\ (-1)^{i-j} & \text{si } i \geq j. \end{cases} \tag{9.3}$$

c) Montrer que la fonction $\Lambda(x)$ de (9.2) ne possède qu'un seul maximum local sur chaque intervalle $[x_{j-1}, x_j]$.
Indication. Etudier les extréma du polynôme (9.3).

10. Calculer les constantes de Lebesgue

$$\Lambda_n = \max_{x \in [-1,1]} \sum_{i=0}^{n} |\ell_i(x)| , \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

a) pour la division équidistante $x_k = -1 + 2k/n$,
b) pour les points de Chebyshev $x_k = -\cos((2k+1)\pi/(2n+2))$.
Pour calculer le maximum de la fonction $f(x) = \sum_{i=0}^{n} |\ell_i(x)|$ sur $[x_{j-1}, x_j]$ utiliser la recherche de Fibonacci.

11. Calculer à la main la transformée de Fourier discrète de la suite $\{0, 1, 2, 3, 0, -3, -2, -1\}$.

12. (a) Calculer les coefficients $\hat{f}(k)$ de la série de Fourier pour la fonction 2π-périodique

$$f(x) = \begin{cases} 4x/\pi & \text{pour } |x| < \pi, \\ 0 & \text{pour } x = \pi. \end{cases}$$

(b) Calculer la transformée de Fourier discrète pour $\{y_k\}_{k=0}^{N}$ où $y_l = f(2\pi l/N),\ l = 0, \ldots, N$ avec f, la fonction de l'exercice précédent.

(c) Vérifier le résultat obtenu dans l'exercice 11 pour $N = 8$.

(d) Estimer la différence $|z_k - \hat{f}_N(k)|$.

13. Pour deux suites périodiques $y \in P_N$ et $z \in P_N$ on définit la *convolution* $y * z$ par

$$(y * z)_k = \sum_{j=0}^{N-1} y_{k-j} z_j .$$

Montrer que $y * z \in P_N$ et que

$$\frac{1}{N} \mathcal{F}_N(y * z) = \mathcal{F}_N y \cdot \mathcal{F}_N z \tag{9.4}$$

où la multiplication dans (9.4) est effectuée élément par élément.

14. Démontrer l'égalité de Parseval (1806) pour la transformée de Fourier discrète ($z = \mathcal{F}_N y$).

$$N \sum_{k=0}^{N-1} |z_k|^2 = \sum_{k=0}^{N-1} |y_k|^2.$$

15. Soit N un nombre pair et $p_N(x)$ le polynôme trigonométrique qui passe par (x_ℓ, y_ℓ) pour $\ell = 0, 1, \ldots, N-1$ (voir la formule (5.12) des polycopies). Montrer que

$$p_N(x) = \sum_{\ell=0}^{N-1} y_\ell \, S_N(x - x_\ell) \tag{9.5}$$

où

$$S_N(x) = \frac{\sin(xN/2)}{N} \cdot \frac{\cos(x/2)}{\sin(x/2)}. \tag{9.6}$$

16. La fonction $S_N(x)$ de (9.6) permet d'étudier l'influence des erreurs dans les y_ℓ sur le polynôme trigonométrique interpolant. Montrer que $S_N(x)$ est 2π-périodique et que pour tout $x \in [-\pi, \pi]$

$$\Big| S_N(x) - \frac{\sin(xN/2)}{xN/2} \Big| \le \frac{2}{\pi \cdot N}.$$

17. Calculer à la main le spline naturel ($s''(x_0) = s''(x_n) = 0$) qui passe par les points

$$(-3,0), \quad (-2,0), \quad (-1,0), \quad (0,1), \quad (1,0), \quad (2,0), \quad (3,0).$$

Dessiner les graphes (si possible avant les calculs!) de $s(x)$, $s'(x)$, $s''(x)$, $s'''(x)$.
Indication. Pour des données symétriques par rapport à $x = 0$, le spline naturel est une fonction paire. Avec cette observation, on peut réduire la dimension du système des p_i.

18. Pour la fonction

$$f(x) = \begin{cases} x^3 & \text{si } x \ge 0 \\ 0 & \text{si } x \le 0, \end{cases}$$

calculer les différences

$$\Delta f(x), \qquad \Delta^2 f(x), \qquad \Delta^3 f(x), \qquad \text{et} \qquad B(x) = \Delta^4 f(x)$$

où $\Delta g(x) := g(x+1) - g(x)$ et $\Delta^2 g := \Delta(\Delta g)$, etc.
Montrer que $B(x)$ est une fonction "spline" (appelée "B-spline") à support compact, c.-à-d. qu'elle est nulle en dehors d'un intervalle borné.
Calculer les valeurs de $B(x)$ pour $x \in \mathbb{Z}$ et dessiner $B(x)$.

19. (*Spline périodique*). Soient donnés (x_i, y_i) pour $i = 0, 1, \ldots, n$ avec $y_n = y_0$. Montrer l'existence et l'unicité d'un spline qui passe par tous les (x_i, y_i) et qui satisfait

$$s'(x_n) = s'(x_0)\,, \qquad\qquad s''(x_n) = s''(x_0)\,.$$

20. (Formule de *Newton-Gregory*). Soit $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ une fonction différentiable et $x_i = a + ih$, (avec $h = (b-a)/n$) une division équidistante de $[a, b]$. Montrer que l'intégration du spline, défini par $s(x_i) = f(x_i)$ pour $i = 0, 1, \ldots, n$, $s'(a) = f'(a)$ et $s'(b) = f'(b)$, donne la formule de quadrature suivante:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\Big(\frac{1}{2} f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2} f(x_n)\Big) - \frac{h^2}{12}\left(f'(x_n) - f'(x_0)\right).$$

Pourquoi cette formule est-elle exacte pour tout polynôme de degré 3?

Chapitre III

Equations Différentielles Ordinaires

Ce chapitre est consacré à la résolution numérique d'un système d'équations différentielles ordinaires

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, \ldots, y_n), \qquad y_1(x_0) = y_{10}, \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, \ldots, y_n), \qquad y_n(x_0) = y_{n0}. \end{aligned} \tag{0.1}$$

En notation vectorielle ce système s'écrit

$$y' = f(x, y), \qquad y(x_0) = y_0 \tag{0.2}$$

où $y = (y_1, \ldots, y_n)^T$ et $f : I\!R \times I\!R^n \to I\!R^n$. Voici quelques livres qui traitent de ce sujet.

Bibliographie sur ce chapitre

J.C. Butcher (1987): *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons. [MA 65/276]

M. Crouzeix & A.L. Mignot (1984): *Analyse Numérique des Equations Différentielles.* Masson. [MA 65/217]

J.-P. Demailly (1996): *Analyse Numérique et Équations Différentielles.* Presses Univ. de Grenoble. [MA 65/386]

P. Deuflhard & F. Bornemann (1994): *Numerische Mathematik II. Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen.* Walter de Gruyter. [MA 65/309]

J.R. Dormand (1996): *Numerical Methods for Differential Equations. A Computational Approach.* CRC Press. [MA 65/395]

E. Hairer, S.P. Nørsett & G. Wanner (1993): *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems*. Springer Series in Comput. Math., vol. 8, 2nd edition. [MA 65/245]

E. Hairer & G. Wanner (1996): *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer Series in Comput. Math., vol. 14, 2nd edition. [MA 65/245]

P. Henrici (1962): *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons. [MA 65/50]

A. Iserles (1996): *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*. Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press.

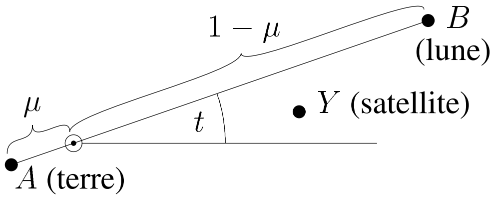
J.D. Lambert (1991): *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations.* John Wiley & Sons. [MA 65/367]

A.M. Stuart & A.R. Humphries (1996): *Dynamical Systems and Numerical Analysis.* Cambridge Univ. Press. [MA 65/377]

III.1 Un exemple: problème restreint à trois corps

Considérons les trois corps suivants

la terre	masse	$\mu' = 1 - \mu$
la lune	masse	$\mu = 0.012277471$
un satellite	masse	$\epsilon \to 0$ (négligeable)



et supposons que

- la terre et la lune soient en *rotation circulaire* (dans un plan, vitesse constante) autour du centre de gravité du système. Si le centre de gravité est supposé être à l'origine, on a $A = -\mu e^{it}$ pour la terre et $B = (1-\mu)e^{it}$ pour la lune (voir la figure).
- le mouvement du satellite soit dû à la *force d'attraction* des deux corps. Celle-ci est proportionnelle à $m_1 m_2 / r^2$ où m_1, m_2 sont les masses et r la distance entre eux.

En appliquant la *loi de Newton* (masse $\times$ accélération $=$ force), on obtient pour le mouvement du satellite ($Y \in \mathbb{C}$)

$$\epsilon Y'' = \underbrace{\frac{\epsilon(1-\mu)}{\|A-Y\|^2} \cdot \frac{A-Y}{\|A-Y\|}}_{\text{attraction de la terre}} + \underbrace{\frac{\epsilon\mu}{\|B-Y\|^2} \cdot \frac{B-Y}{\|B-Y\|}}_{\text{attraction de la lune}}. \tag{1.1}$$

Pour éliminer le facteur e^{it} dans $A = -\mu e^{it}$ et $B = (1-\mu)e^{it}$, introduisons la variable $y = e^{-it}Y = y_1 + iy_2$. Dans le système de coordonnées (y_1, y_2), la terre et la lune ne se meuvent plus. Si nous insérons $Y = e^{it}y$ et $Y'' = -e^{it}y + 2ie^{it}y' + e^{it}y''$ dans l'équation (1.1) nous obtenons

$$y'' + 2iy' - y = (1-\mu) \cdot \frac{(-\mu - y)}{\|\mu + y\|^3} + \mu \cdot \frac{(1-\mu-y)}{\|1-\mu-y\|^3}. \tag{1.2}$$

En séparant les parties réelles et imaginaires et en introduisant de nouvelles variables pour la vitesse ($y_3 = y_1'$, $y_4 = y_2'$) nous obtenons le système

$$\begin{aligned} y_1' &= y_3 \\ y_2' &= y_4 \\ y_3' &= y_1 + 2y_4 - (1-\mu)(y_1+\mu)/r_1^3 - \mu(y_1 - 1 + \mu)/r_2^3 \\ y_4' &= y_2 - 2y_3 - (1-\mu)y_2/r_1^3 - \mu y_2/r_2^3 \end{aligned} \tag{1.3}$$

où

$$r_1 = \sqrt{(y_1+\mu)^2 + y_2^2}, \qquad r_2 = \sqrt{(y_1 - 1 + \mu)^2 + y_2^2}.$$

Pour les valeurs initiales

$$\begin{aligned} &y_1(0) = 0.994, \qquad y_2(0) = 0, \qquad y_3(0) = 0, \\ &y_4(0) = -2.00158510637908252240537862224, \end{aligned} \tag{1.4}$$

la solution est périodique (voir la fig. III.1, trait continu) de période

$$T = 17.0652165601579625588917206249. \tag{1.5}$$

Les figures de ce chapitre sont toutes tirées du livre de Hairer, Nørsett & Wanner.

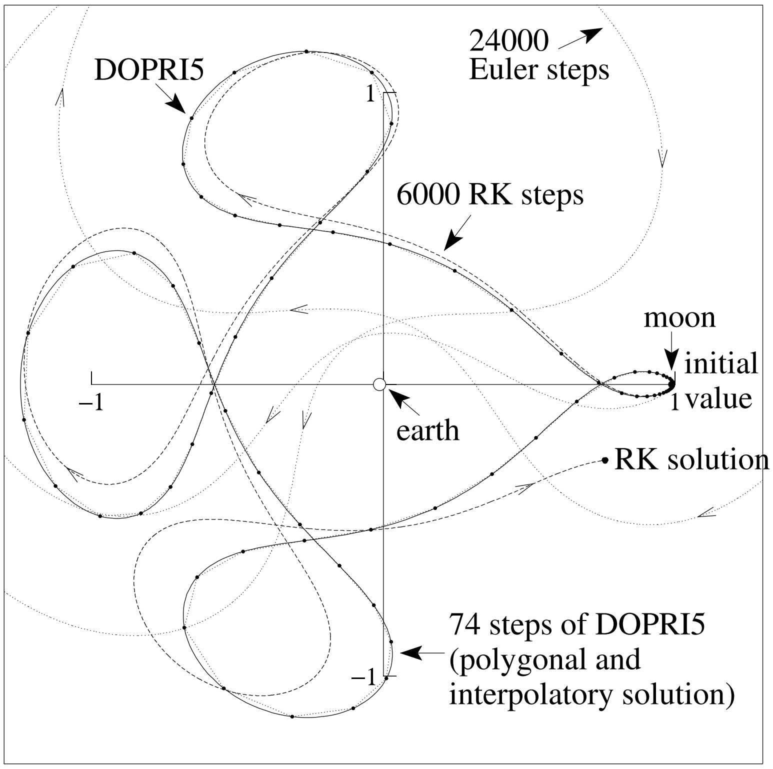


FIG. III.1 – *Solution de (1.3) (orbite d'Arenstorf)*

Avant de discuter la résolution numérique des équations différentielles, nous rappelons un théorème sur l'existence et l'unicité de la solution (pour une démonstration, voir le cours d'Analyse II).

Théorème 1.1 *Soit $f(x, y)$ de classe $\mathcal{C}^1$ dans un voisinage de (x_0, y_0). Alors, il existe $\alpha > 0$ tel que le problème $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ possède exactement une solution sur $(x_0 - \alpha, x_0 + \alpha)$.* □

III.2 Méthodes de Runge-Kutta

Pour calculer une approximation de la solution de

$$y' = f(x, y), \qquad y(x_0) = y_0 \tag{2.1}$$

sur l'intervalle $[x_0, \bar{x}]$, on procède comme suit: on subdivise $[x_0, \bar{x}]$ en sous-intervalles d'extrémités $x_0 < x_1 < \ldots < x_N = \bar{x}$, on dénote $h_n = x_{n+1} - x_n$ et on calcule l'approximation $y_n \approx y(x_n)$ par une formule de type

$$y_{n+1} = y_n + h_n \Phi(h_n, x_n, y_n). \tag{2.2}$$

Une telle formule s'appelle "méthode à *un* pas", car le calcul de y_{n+1} utilise uniquement les valeurs h_n, x_n, y_n et non $h_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}, \ldots$.

Méthode d'Euler (1768). La méthode la plus simple est donnée par

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) \tag{2.3}$$

(pour simplifier la notation nous considérons uniquement le premier pas ($n = 0$ dans (2.2)) et nous notons $h_0 = h$). Elle est obtenue en remplaçant la solution $y(x)$ par sa tangente au point (x_0, y_0). L'expérience numérique de la fig. III.1 montre que cette méthode n'est pas assez précise.

Pour la dérivation d'autres méthodes numériques, intégrons (2.1) de x_0 à $x_0 + h$

$$y(x_0 + h) = y_0 + \int_{x_0}^{x_0+h} f(t, y(t))\, dt. \tag{2.4}$$

Si l'on remplace l'intégrale de (2.4) par $hf(x_0, y_0)$, on obtient la méthode d'Euler. L'idée évidente est d'approcher l'intégrale de (2.4) par une formule de quadrature ayant un ordre plus élevé.

Méthode de Runge (1895). On prend la formule du point milieu

$$y(x_0 + h) \approx y_0 + hf\Big(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0 + \frac{h}{2})\Big) \tag{2.5}$$

et on remplace la valeur inconnue $y(x_0 + h/2)$ par la méthode d'Euler. Ceci nous donne

$$y_1 = y_0 + hf\Big(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} f(x_0, y_0)\Big). \tag{2.6}$$

En généralisant cette idée à une formule de quadrature d'un ordre plus élevé, on est conduit à la définition suivante (Kutta 1901).

Définition 2.1 *Une méthode de Runge-Kutta à s étages est donnée par*

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_0, y_0)\\
k_2 &= f(x_0 + c_2 h, y_0 + h a_{21} k_1)\\
k_3 &= f(x_0 + c_3 h, y_0 + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2))\\
&\quad \ldots\\
k_s &= f(x_0 + c_s h, y_0 + h(a_{s1} k_1 + \ldots + a_{s,s-1} k_{s-1}))\\
y_1 &= y_0 + h(b_1 k_1 + \ldots + b_s k_s)
\end{aligned} \tag{2.7}$$

où c_i, a_{ij}, b_j sont des coefficients. On la représente à l'aide du schéma

$$\begin{array}{c|c} c_i & a_{ij} \\ \hline & b_i \end{array}$$

Exemples. La méthode d'Euler ainsi que des méthodes de Runge et de Heun sont données dans le tableau III.1.

TAB. III.1 – *Les premières méthodes de Runge-Kutta*

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1/2 & 1/2 & \\ \hline & 0 & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ 1/3 & 1/3 & & \\ 2/3 & 0 & 2/3 & \\ \hline & 1/4 & 0 & 3/4 \end{array}$$

Par la suite nous supposerons toujours que les c_i satisfont

$$c_1 = 0, \qquad c_i = \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}, \quad i = 2, \ldots, s. \tag{2.8}$$

Ceci signifie que $k_i = f(x_0 + c_i h, y(x_0 + c_i h)) + \mathcal{O}(h^2)$. Motivés par la relation (I.2.3) pour les formules de quadrature, nous étendons la notion de l'ordre aux méthodes de Runge-Kutta.

Définition 2.2 *On dit que la méthode (2.7) a l'ordre p si, pour chaque problème $y' = f(x,y)$, $y(x_0) = y_0$ (avec $f(x,y)$ suffisamment différentiable), l'erreur après un pas satisfait*

$$y_1 - y(x_0 + h) = \mathcal{O}(h^{p+1}) \qquad \textit{pour} \qquad h \to 0. \tag{2.9}$$

La différence (2.9) s'appelle erreur locale de la méthode.

La méthode d'Euler est une méthode d'ordre 1, car

$$y(x_0 + h) = y_0 + hy'(x_0) + \mathcal{O}(h^2) = y_0 + hf(x_0, y_0) + \mathcal{O}(h^2) = y_1 + \mathcal{O}(h^2).$$

La méthode de Runge est basée sur la formule du point milieu qui est une formule de quadrature d'ordre 2:

$$y(x_0 + h) = y_0 + hf\Big(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0 + \frac{h}{2})\Big) + \mathcal{O}(h^3).$$

En remplaçant $y(x_0 + h/2)$ par la valeur $y_0 + (h/2)f(x_0, y_0)$ de la méthode d'Euler, on ajoute un autre terme d'erreur de grandeur $\mathcal{O}(h^3)$. Ainsi, cette méthode a l'ordre $p = 2$. La méthode de Heun (tableau III.1) est obtenue à partir de la formule de quadrature

$$y(x_0 + h) = y_0 + \frac{h}{4}\Big(f(x_0, y_0) + 3f(x_0 + \frac{2h}{3}, y(x_0 + \frac{2h}{3}))\Big) + \mathcal{O}(h^4)$$

si l'on remplace $y(x_0 + 2h/3)$ par l'approximation de la méthode de Runge. La méthode de Heun a donc l'ordre $p = 3$.

Expérience numérique. Considérons les trois méthodes du tableau III.1 ainsi que deux méthodes d'ordre 4 (voir le paragraphe III.3) et comparons leurs performances pour le problème (Van der Pol, voir Analyse I, Poly II, p. 68-70)

$$\begin{aligned} y_1' &= y_2 & \qquad y_1(0) &= 2.00861986087484313650940188 \\ y_2' &= (1 - y_1^2)y_2 - y_1 & \qquad y_2(0) &= 0 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Nous subdivisons l'intervalle $[0, 6.66328685932313018969968 20305]$ (sur celui-ci la solution est périodique) en n parties équidistantes et appliquons n fois la méthode. Le travail (nombre total d'évaluations de f) est alors dessiné en fonction de l'erreur à la fin de l'intervalle (fig. III.2). Comme dans la fig. I.3 (intégration numérique), on peut constater que $\log_{10}(fe)$ dépend linéairement de $-\log_{10}(err)$ et que cette droite est de pente $1/p$, où p est l'ordre de la méthode. Il est donc important d'utiliser des méthodes d'ordre élevé.

III.3 Construction de méthodes d'ordre 4

Le but est de déterminer les coefficients a_{ij}, b_j (les c_i sont donnés par (2.8)) afin que l'erreur locale satisfasse (2.9) avec $p = 4$. Pour cela, on va d'abord calculer les séries de Taylor de la solution exacte $y(x_0 + h)$ et de l'approximation numérique $y_1 = y_1(h)$. Ensuite, on va comparer leurs coefficients.

Simplification. Si la condition (2.8) est vérifiée, il suffit de considérer des problèmes *autonomes*, c.-à-d. des problèmes où f ne dépend pas de x. Pour voir ceci, on écrit le système $y' = f(x,y)$ sous la forme équivalente

$$Y' = F(Y), \qquad \text{où} \qquad Y = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \qquad F(Y) = \begin{pmatrix} 1 \\ f(x,y) \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

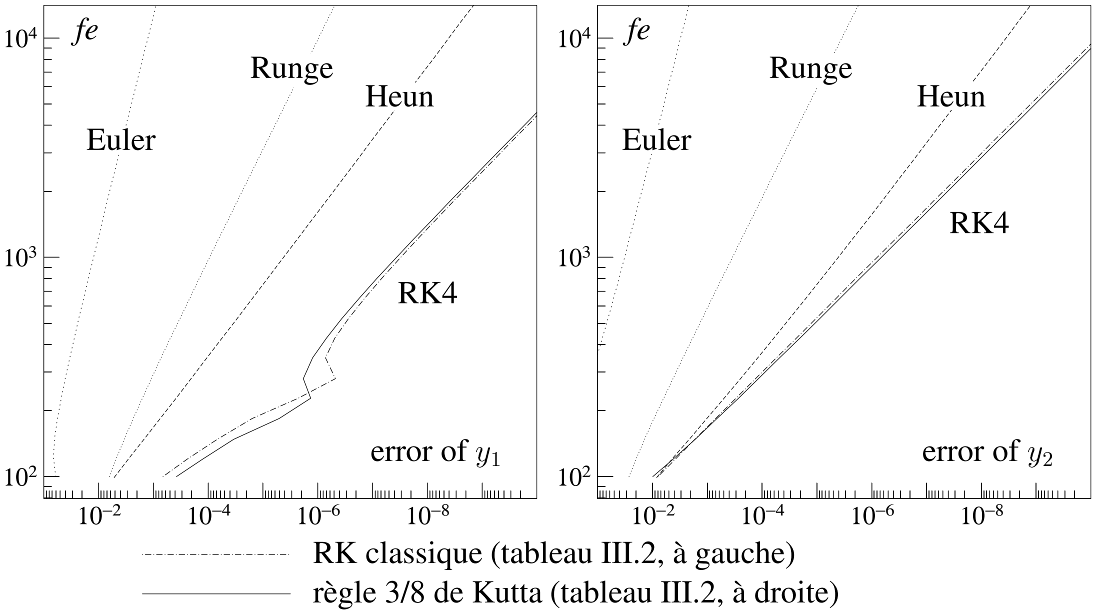


FIG. III.2 – *Erreur globale par rapport au travail numérique*

avec comme valeur initiale $Y_0 = (x_0, y_0)^T$. L'application de la méthode de Runge-Kutta au problème (3.1) donne

$$K_i = F\Big(Y_0 + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}K_j\Big) = \begin{pmatrix} 1 \\ k_i \end{pmatrix}, \qquad\qquad Y_1 = Y_0 + h\sum_{i=1}^{s} b_i K_i = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}$$

ce qui est équivalent à (2.7) car

$$Y_0 + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}K_j = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\begin{pmatrix} 1 \\ k_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 + c_i h \\ y_0 + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j \end{pmatrix}.$$

Série de Taylor de la solution exacte. Considérons le problème

$$y' = f(y), \qquad y(x_0) = y_0. \tag{3.2}$$

En dérivant l'équation (3.2), on obtient pour la solution exacte

$$\begin{aligned} y'' &= (f'f)(y) \\ y''' &= (f''(f,f) + f'f'f)(y) \\ y^{(4)} &= (f'''(f,f,f) + 3\,f''(f'f,f) + f'f''(f,f) + f'f'f'f)(y). \end{aligned}$$

La série de Taylor est donc

$$\begin{aligned} y(x_0+h) = y_0 + hf_0 &+ \frac{h^2}{2!}\Big(f'f\Big)_0 + \frac{h^3}{3!}\Big(f''(f,f) + f'f'f\Big)_0 \\ &+ \frac{h^4}{4!}\Big(f'''(f,f,f) + 3\,f''(f'f,f) + f'f''(f,f) + f'f'f'f\Big)_0 + \mathcal{O}(h^5). \end{aligned} \tag{3.3}$$

L'indice 0 indique que l'expression doit être évaluée à la valeur initiale y_0.

Série de Taylor de la solution numérique. Pour calculer la série de Taylor de y_1, il suffit de la connaître pour

$$k_i = f\Big(y_0 + h\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j\Big). \tag{3.4}$$

On peut considérer (3.4) comme une équation de point fixe et on peut approcher les k_i par la méthode des approximations successives. Si l'on commence par $k_i = f(y_0) + \mathcal{O}(h)$, on obtient (en utilisant (2.8))

$$k_i = f_0 + c_i h (f'f)_0 + \mathcal{O}(h^2).$$

La deuxième itération nous donne

$$\begin{aligned} k_i &= f(y_0 + hc_i f_0 + h^2 \textstyle\sum_j a_{ij}c_j\,(f'f)_0 + \mathcal{O}(h^3)) \\ &= f_0 + c_i h (f'f)_0 + h^2 \textstyle\sum_j a_{ij}c_j\,(f'f'f)_0 + \dfrac{h^2}{2}c_i^2 (f''(f,f))_0 + \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Si l'on fait encore une itération et si l'on insère la formule ainsi obtenue dans la définition de y_1 (voir (2.7)) on obtient

$$\begin{aligned} y_1 = y_0 &+ h(\textstyle\sum_i b_i) f_0 + \dfrac{h^2}{2!}(2\textstyle\sum_i b_i c_i)(f'f)_0 \\ &+ \dfrac{h^3}{3!}\Big((3\textstyle\sum_i b_i c_i^2)(f''(f,f))_0 + (6\textstyle\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j)(f'f'f)_0\Big) \\ &+ \dfrac{h^4}{4!}\Big((4\textstyle\sum_i b_i c_i^3)(f'''(f,f,f))_0 + (8\textstyle\sum_{ij} b_i c_i a_{ij} c_j) 3 (f''(f'f,f))_0 \\ &\quad + (12\textstyle\sum_{ij} b_i a_{ij} c_j^2)(f'f''(f,f))_0 + (24\textstyle\sum_{ijk} b_i a_{ij} a_{jk} c_k)(f'f'f'f))_0\Big) + \mathcal{O}(h^5). \end{aligned} \tag{3.5}$$

En comparant les coefficients de (3.3) et de (3.5), on trouve les conditions pour les coefficients c_i, a_{ij}, b_j impliquant un certain ordre de la méthode.

Théorème 3.1 (conditions d'ordre) *La méthode de Runge-Kutta (2.7) a l'ordre* 4 *si les coefficients satisfont (2.8) et*

$$\begin{aligned}
\textstyle\sum_i b_i &= 1 && (= b_1 + b_2 + b_3 + b_4) && \text{(3.6a)} \\
\textstyle\sum_i b_i c_i &= 1/2 && (= b_2c_2 + b_3c_3 + b_4c_4) && \text{(3.6b)} \\
\textstyle\sum_i b_i c_i^2 &= 1/3 && (= b_2c_2^2 + b_3c_3^2 + b_4c_4^2) && \text{(3.6c)} \\
\textstyle\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j &= 1/6 && (= b_3a_{32}c_2 + b_4(a_{42}c_2 + a_{43}c_3)) && \text{(3.6d)} \\
\textstyle\sum_i b_i c_i^3 &= 1/4 && (= b_2c_2^3 + b_3c_3^3 + b_4c_4^3) && \text{(3.6e)} \\
\textstyle\sum_{i,j} b_i c_i a_{ij} c_j &= 1/8 && (= b_3c_3a_{32}c_2 + b_4c_4(a_{42}c_2 + a_{43}c_3)) && \text{(3.6f)} \\
\textstyle\sum_{i,j} b_i a_{ij} c_j^2 &= 1/12 && (= b_3a_{32}c_2^2 + b_4(a_{42}c_2^2 + a_{43}c_3^2)) && \text{(3.6g)} \\
\textstyle\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{jk} c_k &= 1/24 && (= b_4a_{43}a_{32}c_2). && \text{(3.6h)}
\end{aligned}$$

(entre parenthèses on a explicité les expressions pour $s = 4$*).* □

Remarque. Si la méthode satisfait seulement (3.6a), (3.6a,b) ou (3.6a,b,c,d) elle a alors seulement l'ordre 1, 2 ou 3, respectivement.

Résolution du système (3.6) pour $s = 4$**.** Nous suivons une idée de John Butcher et considérons le produit

$$\underbrace{\begin{pmatrix} b_2 & b_3 & b_4 \\ b_2c_2 & b_3c_3 & b_4c_4 \\ d_2 & d_3 & d_4 \end{pmatrix}}_{U} \underbrace{\begin{pmatrix} c_2 & c_2^2 & \sum_j a_{2j} - c_2^2/2 \\ c_3 & c_3^2 & \sum_j a_{3j} - c_3^2/2 \\ c_4 & c_4^2 & \sum_j a_{4j} - c_4^2/2 \end{pmatrix}}_{V} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 0 \\ 1/3 & 1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

où

$$d_j = \sum_{i=j+1}^{s} b_i a_{ij} - b_j(1 - c_j). \tag{3.7}$$

Nous montrons d'abord que $\det U = 0$. Supposons, par l'absurde, que U soit inversible. Comme $UVe_3 = 0$, on obtient donc $Ve_3 = 0$, ce qui est impossible car

$$\sum_j a_{2j}c_j - \frac{c_2^2}{2} = -\frac{c_2^2}{2} \neq 0.$$

Par conséquence, il existe un vecteur $w \neq 0$ tel que $w^TU = 0$. On a donc $w^TUV = 0$ et la forme particulier de UV nous montre que w est forcement de la forme $w^T = (0, 0, \alpha)$ avec $\alpha \neq 0$. La relation $w^TU = 0$ nous donne les conditions nécessaires $d_i = 0$ pour $i = 2, 3, 4$, c.-à-d.

$$b_2(1 - c_2) = b_3a_{32} + b_4a_{42} \tag{3.8a}$$

$$b_3(1 - c_3) = b_4a_{43} \tag{3.8b}$$

$$b_4(1 - c_4) = 0. \tag{3.8c}$$

Un calcul direct montre que le trois conditions (3.6d,g,h) peuvent en effet être remplacées par (3.8a,b,c) sans changer de solutions.

Le système (3.6a,b,c,e,f)–(3.8a,b,c) consiste en 8 équations non linéaires pour les 10 paramètres b_i, a_{ij} (les c_i sont donnés par (2.8)). On espère trouver une solution ayant deux degrés de liberté. La solution est donnée par l'algorithme suivant.

Algorithme. *Poser* $c_1 = 0$*,* $c_4 = 1$*;* c_2 *et* c_3 *sont des paramètres libres; calculer* b_1, b_2, b_3, b_4 *tels que la formule de quadrature soit d'ordre* 4 *(conditions (3.6a,b,c,e)); calculer* a_{43} *de (3.8b),* a_{42} *et* a_{32} *du système linéaire (3.6f)–(3.8a); finalement calculer* a_{21}, a_{31}, a_{41} *de (2.8) pour* $i = 2, 3, 4$.

Parmi cette classe de méthodes d'ordre 4, les plus celèbres sont données dans le tableau III.2. La "RK solution" de la fig. III.1 a été obtenue par la méthode de gauche. Elle est basée sur la formule de Simpson.

TAB. III.2 – *Méthodes de Kutta (1901)*

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6 \end{array}$$

"La" méthode de Runge-Kutta

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/3 & 1/3 & & & \\ 2/3 & -1/3 & 1 & & \\ 1 & 1 & -1 & 1 & \\ \hline & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 \end{array}$$

règle 3/8

III.4 Un programme à pas variables

Pour résoudre un problème réaliste (par exemple celui de la fig. III.1), un calcul à pas constants est en général inefficace. Mais comment choisir la division? L'idée est de choisir les pas afin que l'erreur locale soit partout environ égale à *Tol* (fourni par l'utilisateur). A cette fin, il faut connaître une estimation de l'erreur locale. Inspiré par le programme TEGRAL pour l'intégration numérique (voir I.6), nous construisons une deuxième méthode de Runge-Kutta avec $\widehat{y}_1$ comme approximation numérique, et nous utilisons la différence $\widehat{y}_1 - y_1$ comme estimation de l'erreur locale du moins bon résultat.

Méthode emboîtée. Soit donnée une méthode d'ordre p à s étages (coefficients c_i, a_{ij}, b_j). On cherche une approximation $\widehat{y}_1$ d'ordre $\widehat{p} < p$ qui utilise les mêmes évaluations de f, c.-à-d.,

$$\widehat{y}_1 = y_0 + h(\widehat{b}_1 k_1 + \ldots + \widehat{b}_s k_s) \tag{4.1}$$

où les k_i sont donnés par la méthode (2.7). Pour avoir plus de liberté, on ajoute souvent un terme contenant $f(x_1, y_1)$ à la formule (il faut en tous cas calculer $f(x_1, y_1)$ pour le pas suivant) et on cherche $\widehat{y}_1$ de la forme

$$\widehat{y}_1 = y_0 + h\Big(\widehat{b}_1 k_1 + \ldots + \widehat{b}_s k_s + \widehat{b}_{s+1} f(x_1, y_1)\Big). \tag{4.2}$$

Exemple. Prenons une méthode d'ordre $p = 4$ à $s = 4$ étages et cherchons une méthode emboîtée d'ordre $\widehat{p} = 3$ qui soit de la forme (4.2). Les conditions d'ordre sont obtenues par le théorème du paragraphe III.3 (on augmente s de 1 et on ajoute un $(s+1)^{\text{ème}}$ étage avec pour coefficients $a_{s+1,i} = b_i$ pour $i = 1, \ldots, s$) :

$$\widehat{b}_1 + \widehat{b}_2 + \widehat{b}_3 + \widehat{b}_4 + \widehat{b}_5 = 1 \tag{4.3a}$$
$$\widehat{b}_2 c_2 + \widehat{b}_3 c_3 + \widehat{b}_4 + \widehat{b}_5 = 1/2 \tag{4.3b}$$
$$\widehat{b}_2 c_2^2 + \widehat{b}_3 c_3^2 + \widehat{b}_4 + \widehat{b}_5 = 1/3 \tag{4.3c}$$
$$\widehat{b}_3 a_{32} c_2 + \widehat{b}_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) + \widehat{b}_5/2 = 1/6. \tag{4.3d}$$

Ceci représente un système linéaire de 4 équations pour 5 inconnues. On peut arbitrairement choisir $\widehat{b}_5$ et résoudre le système pour les autres variables. Pour le choix $\widehat{b}_5 = 1/6$, on obtient ainsi :

$$\begin{aligned} &\widehat{b}_1 = 2b_1 - 1/6, \qquad \widehat{b}_2 = 2(1-c_2)b_2, \\ &\widehat{b}_3 = 2(1-c_3)b_3, \qquad \widehat{b}_4 = 0, \qquad \widehat{b}_5 = 1/6. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Calcul du h "optimal". Si l'on applique la méthode avec une certaine valeur h, l'estimation de l'erreur satisfait ($\widehat{p} < p$)

$$y_1 - \widehat{y}_1 = (y_1 - y(x_0 + h)) + (y(x_0 + h) - \widehat{y}_1) = \mathcal{O}(h^{p+1}) + \mathcal{O}(h^{\widehat{p}+1}) \approx C \cdot h^{\widehat{p}+1}. \tag{4.5}$$

Le h "optimal", noté par h_{opt}, est celui où cette estimation est proche de *Tol*:

$$Tol \approx C \cdot h_{\text{opt}}^{\widehat{p}+1}. \tag{4.6}$$

En éliminant C de (4.5) et de (4.6), on obtient

$$h_{\text{opt}} = 0.9 \cdot h \cdot \sqrt[\widehat{p}+1]{\frac{Tol}{\|y_1 - \widehat{y}_1\|}} \tag{4.7}$$

(le facteur 0.9 est ajouté pour rendre le programme plus sûr).

Algorithme pour la sélection automatique du pas. Au début, l'utilisateur fournit un sous-programme qui calcule la valeur de $f(x, y)$, les valeurs initiales x_0, y_0 et un premier choix de h.

A) Avec h, calculer y_1, $err = \|y_1 - \widehat{y}_1\|$ et h_{opt} de (4.7).

B) **If** $err \le Tol$ (le pas est accepté) **then**
$x_0 := x_0 + h, \quad y_0 := y_1, \quad h := \min(h_{\text{opt}}, x_{\text{end}} - x_0)$
else (le pas est rejeté)
$h := h_{\text{opt}}$
end if

C) Si $x_0 = x_{\text{end}}$ on a terminé, sinon on recommence en (A) et on calcule le pas suivant.

Remarques. Il est recommandé de remplacer (4.7) par

$$h_{\text{opt}} = h \cdot \min\Big(5, \max(0.2, 0.9(Tol/err)^{1/(\widehat{p}+1)})\Big).$$

Pour la norme dans (4.7) on utilise en général

$$\|y_1 - \widehat{y}_1\| = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Big(\frac{y_{i1} - \widehat{y}_{i1}}{sc_i}\Big)^2} \qquad \text{où} \qquad sc_i = 1 + \max(|y_{i0}|, |y_{i1}|) \tag{4.8}$$

($y_{i0}, y_{i1}, \widehat{y}_{i1}$ est la $i^{\text{ème}}$ composante de $y_0, y_1, \widehat{y}_1$, respectivement). Ceci représente un mélange entre erreur relative et erreur absolue.

Exemple numérique. Cet algorithme a été programmé (en utilisant la “règle $3/8$” et la méthode emboîtée (4.4)) et il a été appliqué au problème (une réaction chimique, le “Brusselator”)

$$\begin{aligned} y_1' &= 1 + y_1^2 y_2 - 4y_1 \qquad & y_1(0) &= 1.5 \\ y_2' &= 3y_1 - y_1^2 y_2 & y_2(0) &= 3 \end{aligned} \tag{4.9}$$

sur l'intervalle $[0, 20]$. Les résultats obtenus avec $Tol = 10^{-4}$ sont présentés dans la fig. III.3:

i) en haut, les deux composantes de la solution avec tous les pas acceptés;

ii) au milieu les pas; les pas acceptés étant reliés, les pas rejetés étant indiqués par $\times$;

iii) les dessin du bas montre l'estimation de l'erreur locale *err*, ainsi que les valeurs exactes de l'erreur locale et de l'erreur globale.

III.5 Convergence des méthodes de Runge-Kutta

Si l'on applique une méthode à un pas

$$y_{n+1} = y_n + h_n \Phi(x_n, y_n, h_n) \tag{5.1}$$

à une équation différentielle $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$, on cherche à connaître la grandeur de l'*erreur globale* $y(x_n) - y_n$.

Théorème 5.1 *Soit $y(x)$ la solution de $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$ sur l'intervalle $[x_0, X]$. Supposons que*

a) l'erreur locale satisfasse pour $x \in [x_0, X]$ et $h \le h_{\max}$

$$\|y(x + h) - y(x) - h\Phi(x, y(x), h)\| \le C \cdot h^{p+1} \tag{5.2}$$

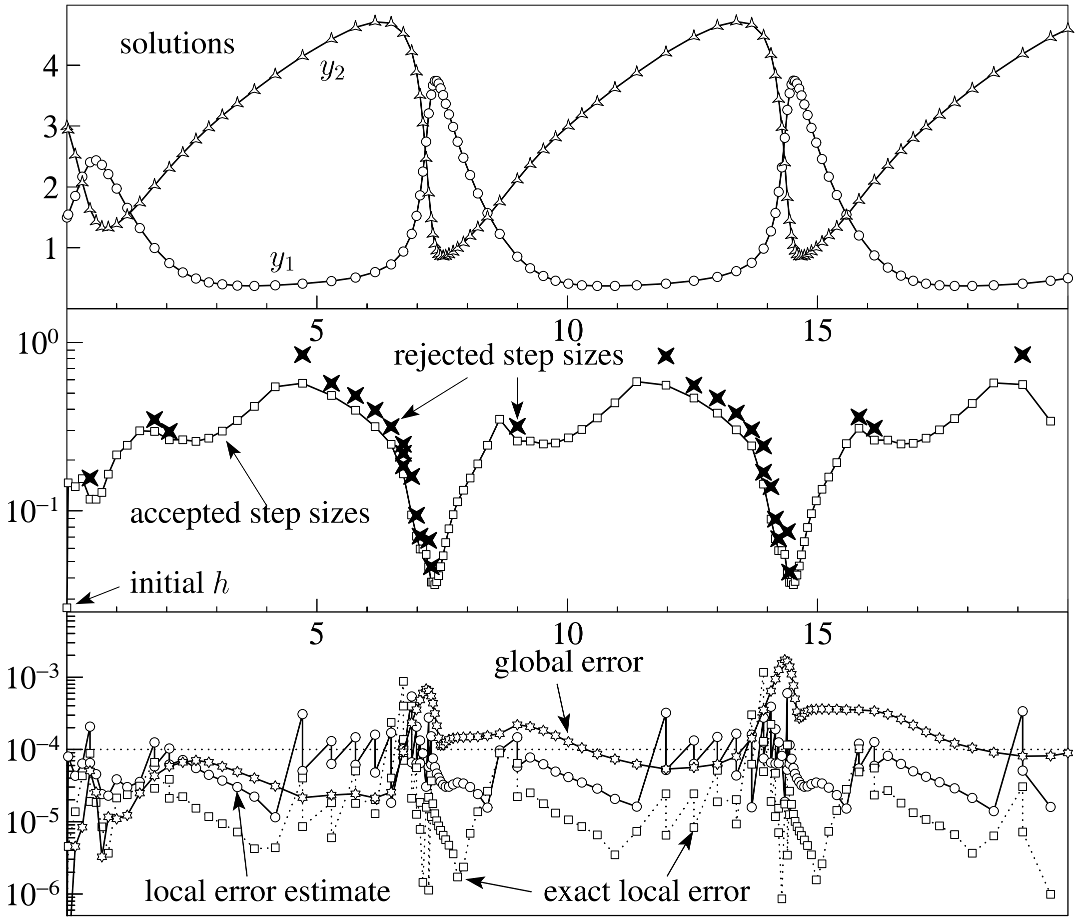


FIG. III.3 – *Sélection du pas, Tol* $= 10^{-4}$, *96 pas acceptés + 32 pas rejetés*

b) la fonction $\Phi(x, y, h)$ *satisfasse une condition de Lipschitz*

$$\|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, z, h)\| \leq \Lambda \cdot \|y - z\| \tag{5.3}$$

pour $h \leq h_{\max}$ *et* $(x, y), (x, z)$ *dans un voisinage de la solution.*

Alors, l'erreur globale admet pour $x_n \leq X$ *l'estimation*

$$\|y(x_n) - y_n\| \leq h^p \cdot \frac{C}{\Lambda} \cdot \left(e^{\Lambda(x_n - x_0)} - 1\right) \tag{5.4}$$

où $h = \max_i h_i$*, sous la condition que* h *soit suffisamment petit.*

Remarque. Dans la fig. III.2, on a constaté que, pour un calcul avec des pas constants, l'erreur globale se comporte comme $\log_{10}(fe) \approx -C_0 \cdot \log_{10}(err)/p$, ce qui est équivalent à $err \approx C_1(fe)^{-p} \approx C_2 h^p$. Ceci concorde bien avec la formule (5.4).

Démonstration. L'idée est d'étudier l'influence de l'erreur locale, commise au $i^{\text{ème}}$ pas, sur l'approximation y_n. Ensuite, on va additionner les erreurs accumulées.
Propagation de l'erreur. Soient $\{y_n\}$ et $\{z_n\}$ deux solutions numériques obtenues par (5.1) avec pour valeurs initiales y_0 et z_0, respectivement. En utilisant la condition de Lipschitz (5.3), leur différence peut être estimée comme

$$\|y_{n+1} - z_{n+1}\| \leq \|y_n - z_n\| + h_n\Lambda\|y_n - z_n\| = (1 + h_n\Lambda)\|y_n - z_n\| \leq e^{h_n\Lambda}\|y_n - z_n\|. \tag{5.5}$$

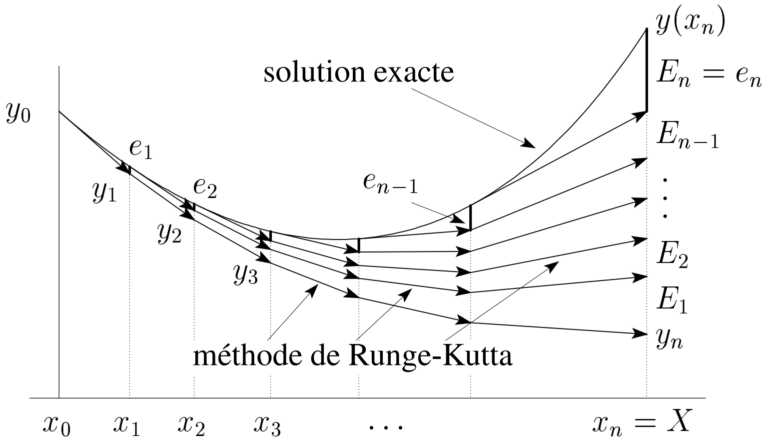


FIG. III.4 – *Estimation de l'erreur globale*

Récursivement, on obtient alors

$$\|y_n - z_n\| \leq e^{h_{n-1}\Lambda} \cdot e^{h_{n-2}\Lambda} \cdot \ldots \cdot e^{h_i\Lambda} \|y_i - z_i\| = e^{\Lambda(x_n - x_i)} \|y_i - z_i\|.$$

et l'erreur propagée E_i (voir la fig. III.4) satisfait

$$\|E_i\| \leq e^{\Lambda(x_n - x_i)} \|e_i\| \leq C h_{i-1}^{p+1} e^{\Lambda(x_n - x_i)}. \tag{5.6}$$

Accumulation des erreurs propagées. L'inégalité du triangle, ainsi que (5.6) nous donne (voir la fig. III.5 pour l'estimation de la somme)

$$\begin{aligned}
\|y(x_n) - y_n\| &\leq \sum_{i=1}^{n} \|E_i\| \leq C \sum_{i=1}^{n} h_{i-1}^{p+1} e^{\Lambda(x_n - x_i)} \\
&\leq C h^p \Big(h_0 e^{\Lambda(x_n - x_1)} + h_1 e^{\Lambda(x_n - x_2)} + \ldots + h_{n-2} e^{\Lambda(x_n - x_{n-1})} + h_{n-1} \Big) \\
&\leq C h^p \int_{x_0}^{x_n} e^{\Lambda(x_n - t)}\, dt = C h^p \frac{1}{-\Lambda} e^{\Lambda(x_n - t)} \Big|_{x_0}^{x_n} = \frac{C h^p}{\Lambda} \Big(e^{\Lambda(x_n - x_0)} - 1 \Big).
\end{aligned}$$

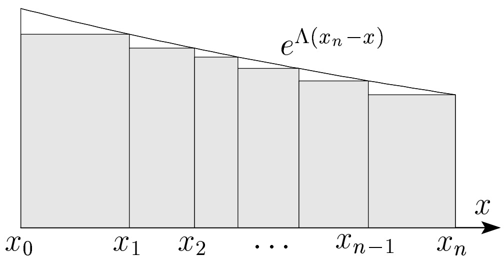


FIG. III.5 – *Estimation de la somme de Riemann*

Il reste à justifier l'application de (5.3) dans (5.5), car l'estimation (5.3) n'est valable que dans un voisinage $U = \{(x, y) \,|\, \|y - y(x)\| \leq b\}$ de la solution exacte. Si l'on suppose que h soit suffisamment petit, plus précisement si h est tel que

$$\frac{C h^p}{\Lambda} \Big(e^{\Lambda(X - x_0)} - 1 \Big) \leq b,$$

on est sûr que toutes les solutions numériques de la fig. III.4 restent dans U. □

Supposons maintenant que (5.1) représente une méthode de Runge-Kutta et vérifions les hypothèses du théorème précédent. La condition (5.2) est satisfaite pour une méthode d'ordre p (par définition de l'ordre). Il reste à vérifier la condition de Lipschitz (5.3) pour la fonction

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^{s} b_i k_i(y) \tag{5.7}$$

où

$$k_i(y) = f\Big(x + c_i h, y + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j(y)\Big). \tag{5.8}$$

Lemme 5.2 *Si $f(x, y)$ satisfait une condition de Lipschitz $\|f(x, y) - f(x, z)\| \le L\|y - z\|$ dans un voisinage de la solution de $y' = f(x, y)$, l'expression $\Phi(x, y, h)$ de (5.7) vérifie (5.3) avec*

$$\Lambda = L\Big(\sum_i |b_i| + (h_{\max}L) \sum_{i,j} |b_i a_{ij}| + (h_{\max}L)^2 \sum_{i,j,k} |b_i a_{ij} a_{jk}| + \ldots\Big). \tag{5.9}$$

Démonstration. La condition de Lipschitz pour $f(x, y)$ appliquée à (5.8) nous donne

$$\begin{aligned} \|k_1(y) - k_1(z)\| &= \|f(x, y) - f(x, z)\| \le L\|y - z\| \\ \|k_2(y) - k_2(z)\| &\le L\|y - z + ha_{21}(k_1(y) - k_1(z))\| \\ &\le L(1 + h_{\max}L|a_{21}|)\|y - z\| \end{aligned} \tag{5.10}$$

etc. Les estimations (5.10) insérées dans

$$\|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, z, h)\| \le \sum_{i=1}^{s} |b_i| \cdot \|k_i(y) - k_i(z)\|$$

impliquent (5.3) avec Λ donné par (5.9). □

III.6 Méthodes multipas (multistep methods)

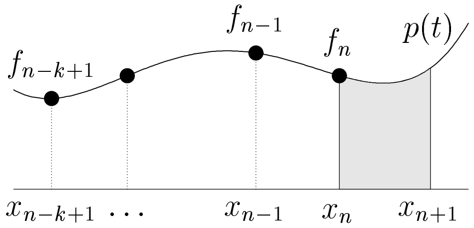
Déjà longtemps avant la parution des premières méthodes de Runge-Kutta, J.C. Adams a résolu numériquement des équations différentielles (1855, publié dans un livre de Bashforth 1883). Son idée était d'utiliser l'information de plusieurs pas précédents (en particulier $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-k+1}$) pour obtenir une approximation précise de $y(x_{n+1})$. C'est la raison pour laquelle ces méthodes s'appellent aujourd'hui méthodes multipas (contrairement aux méthodes à un pas).

Méthodes d'Adams explicites. Soit donnée une division $x_0 < \ldots < x_n < x_{n+1} < \ldots$ de l'intervalle sur lequel on cherche à résoudre l'équation différentielle $y' = f(x, y)$ et supposons qu'on connaisse des approximations $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{n-k+1}$ de la solution pour k pas consécutifs ($y_j \approx y(x_j)$). Comme pour la dérivation des méthodes de Runge-Kutta, on intègre l'équation différentielle pour obtenir

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(t, y(t))\, dt. \tag{6.1}$$

Mais, au lieu d'appliquer une formule de quadrature standard à l'intégrale de (6.1), on remplace $f(t, y(t))$ par le polynôme $p(t)$ de degré $k-1$ qui satisfait (on utilise l'abréviation $f_j = f(x_j, y_j)$)

$$p(x_j) = f_j \quad \text{pour} \quad j = n, n-1, \ldots, n-k+1. \tag{6.2}$$



L'approximation de $y(x_{n+1})$ est alors définie par

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} p(t)\, dt. \tag{6.3}$$

Si l'on représente le polynôme $p(t)$ par la formule de Newton (voir le paragraphe II.1)

$$p(t) = \sum_{j=0}^{k-1} \Big(\prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n-i}) \Big) \cdot \delta^j f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{n-j}] \tag{6.4}$$

la méthode (6.3) devient

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{j=0}^{k-1} \Big(\int_{x_n}^{x_{n+1}} \prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n-i})\, dt \Big) \cdot \delta^j f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{n-j}]. \tag{6.5}$$

Cas équidistant. Dans la situation $x_j = x_0 + jh$ les différences divisées peuvent être écrites sous la forme

$$\delta^j f[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{n-j}] = \frac{\nabla^j f_n}{j!\, h^j} \tag{6.6}$$

où $\nabla^0 f_n = f_n$, $\nabla f_n = f_n - f_{n-1}$, $\nabla^2 f_n = \nabla(\nabla f_n) = f_n - 2f_{n-1} + f_{n-2}, \ldots$ sont les *différences finies régressives* (à distinguer des différences finies progressives $\Delta f_n = f_{n+1} - f_n$). La formule (6.5) devient alors (poser $t = x_n + sh$)

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j \nabla^j f_n \tag{6.7}$$

où

$$\gamma_j = \frac{1}{j!} \int_0^1 \prod_{i=0}^{j-1} (i + s)\, ds = \int_0^1 \binom{s+j-1}{j} ds. \tag{6.8}$$

Les premiers coefficients γ_j sont donnés dans le tableau III.3.

TAB. III.3 – *Coefficients pour les méthodes d'Adams explicites*

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8
γ_j	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{95}{288}$	$\frac{19087}{60480}$	$\frac{5257}{17280}$	$\frac{1070017}{3628800}$

Des cas particuliers sont:

$$
\begin{aligned}
k=1: &\quad y_{n+1}=y_n+hf_n \qquad \text{(méthode d'Euler)}\\
k=2: &\quad y_{n+1}=y_n+h\Big(\frac{3}{2}f_n-\frac{1}{2}f_{n-1}\Big)\\
k=3: &\quad y_{n+1}=y_n+h\Big(\frac{23}{12}f_n-\frac{16}{12}f_{n-1}+\frac{5}{12}f_{n-2}\Big)\\
k=4: &\quad y_{n+1}=y_n+h\Big(\frac{55}{24}f_n-\frac{59}{24}f_{n-1}+\frac{37}{24}f_{n-2}-\frac{9}{24}f_{n-3}\Big).
\end{aligned}
$$

Si l'on veut appliquer cette méthode (par exemple avec $k=3$) à la résolution de $y'=f(x,y)$, $y(x_0)=y_0$, il faut connaître trois approximations initiales y_0, y_1 et y_2. Ensuite, on peut utiliser la formule récursivement pour calculer y_3, y_4, etc. Adams a calculé la série de Taylor de la solution exacte (autour de la valeur initiale) pour déterminer les approximations initiales qui manquent. Evidemment, on peut aussi les obtenir par une méthode à un pas.

Remarque. Dans la construction de la méthode (6.5), on a utilisé le polynôme d'interpolation $p(t)$ en-dehors de l'intervalle $[x_{n-k+1}, x_n]$. On sait bien (voir le chapitre II) que ceci peut provoquer de grandes erreurs. La modification suivante est aussi due à J.C. Adams (1855).

Méthodes d'Adams implicites. L'idée est de considérer le polynôme $p^*(t)$ de degré k qui satisfasse

$$p^*(x_j)=f_j \qquad \text{pour} \qquad j=n+1,n,n-1,\ldots,n-k+1 \tag{6.9}$$

(attention: $f_{n+1}=f(x_{n+1},y_{n+1})$ est encore inconnu) et de définir l'approximation numérique par

$$y_{n+1}=y_n+\int_{x_n}^{x_{n+1}} p^*(t)\,dt. \tag{6.10}$$

Comme précédemment, la formule de Newton donne

$$p^*(t)=\sum_{j=0}^{k}\Big(\prod_{i=0}^{j-1}(t-x_{n-i+1})\Big)\cdot \delta^j f[x_{n+1},x_n,\ldots,x_{n-j+1}] \tag{6.11}$$

et la méthode devient

$$y_{n+1}=y_n+\sum_{j=0}^{k}\Big(\int_{x_n}^{x_{n+1}}\prod_{i=0}^{j-1}(t-x_{n-i+1})\,dt\Big)\cdot \delta^j f[x_{n+1},x_n,\ldots,x_{n-j+1}]. \tag{6.12}$$

Pour le cas équidistant, elle est donnée par

$$y_{n+1}=y_n+h\sum_{j=0}^{k}\gamma_j^*\nabla^j f_{n+1} \tag{6.13}$$

où les coefficients γ_j^* sont donnés par (voir tableau III.4)

$$\gamma_j^*=\frac{1}{j!}\int_0^1\prod_{i=0}^{j-1}(i-1+s)\,ds=\int_0^1\binom{s+j-2}{j}\,ds. \tag{6.14}$$

TAB. III.4 – *Coefficients pour les méthodes d'Adams implicites*

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8
γ_j^*	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$	$-\frac{863}{60480}$	$-\frac{275}{24192}$	$-\frac{33953}{3628800}$

Des cas particuliers sont:

$$\begin{aligned}
k=0: &\quad y_{n+1} = y_n + hf_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \\
k=1: &\quad y_{n+1} = y_n + h\Big(\frac{1}{2}f_{n+1} + \frac{1}{2}f_n\Big) \\
k=2: &\quad y_{n+1} = y_n + h\Big(\frac{5}{12}f_{n+1} + \frac{8}{12}f_n - \frac{1}{12}f_{n-1}\Big) \\
k=3: &\quad y_{n+1} = y_n + h\Big(\frac{9}{24}f_{n+1} + \frac{19}{24}f_n - \frac{5}{24}f_{n-1} + \frac{1}{24}f_{n-2}\Big).
\end{aligned}$$

Chacune de ces formules représente une équation non linéaire pour y_{n+1}, de la forme

$$y_{n+1} = \eta_n + h\beta f(x_{n+1}, y_{n+1}) \tag{6.15}$$

(par exemple, pour $k = 2$ on a $\beta = 5/12$ et $\eta_n = y_n + h(8f_n - f_{n-1})/12$). On peut résoudre ce système par les méthodes du chapitre VI (méthode de Newton) ou simplement par la méthode des approximations successives.

Méthodes prédicteur-correcteur. La solution de (6.15) est elle-même seulement une approximation de $y(x_{n+1})$. Ainsi, il n'est pas important de résoudre (6.15) à une très grande précision. L'idée est de calculer une première approximation par une méthode explicite et de corriger cette valeur (une ou plusieurs fois) par la formule (6.15). Avec cet algorithme, un pas de la méthode prend la forme suivante:

- **P:** on calcule le prédicteur $\widehat{y}_{n+1} = y_n + h\sum_{j=0}^{k-1}\gamma_j\nabla^j f_n$ par la méthode d'Adams explicite; $\widehat{y}_{n+1}$ est déjà une approximation de $y(x_{n+1})$;
- **E:** evaluation de la fonction: on calcule $\widehat{f}_{n+1} = f(x_{n+1}, \widehat{y}_{n+1})$;
- **C:** l'approximation corrigée est alors donnée par $y_{n+1} = \eta_n + h\beta\widehat{f}_{n+1}$;
- **E:** calculer $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$.

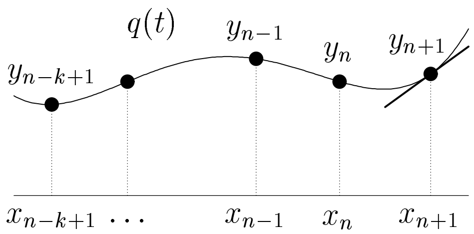
Cette procédure, qu'on dénote PECE, est la plus utilisée. D'autres possibilités sont: de faire plusieurs itérations, par exemple PECECE, ou d'omettre la dernière évaluation de f (c.-à-d. PEC) et de prendre $\widehat{f}_{n+1}$ à la place de f_{n+1} pour le pas suivant.

Méthodes BDF (backward differentiation formulas). Au lieu de travailler avec un polynôme qui passe par les f_j, on considère le polynôme $q(t)$ de degré k, défini par

$$q(x_j) = y_j$$

pour

$$j = n+1, n, \ldots, n-k+1$$



et on détermine y_{n+1} de façon telle que

$$q'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, q(x_{n+1})). \tag{6.16}$$

Comme dans (6.11), la formule de Newton donne

$$q(t) = \sum_{j=0}^{k} \Big(\prod_{i=0}^{j-1} (t - x_{n-i+1}) \Big) \cdot \delta^j y[x_{n+1}, x_n, \ldots, x_{n-j+1}]. \tag{6.17}$$

Chaque terme de cette somme contient le facteur $(t - x_{n+1})$. Alors, on calcule facilement $q'(x_{n+1})$ et on obtient

$$\sum_{j=1}^{k} \Big(\prod_{i=1}^{j-1} (x_{n+1} - x_{n-i+1}) \Big) \cdot \delta^j y[x_{n+1}, x_n, \ldots, x_{n-j+1}] = f(x_{n+1}, y_{n+1}). \tag{6.18}$$

Pour le cas équidistant, cette formule devient (utiliser (6.6))

$$\sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} \nabla^j y_{n+1} = h f_{n+1}. \tag{6.19}$$

Des cas particuliers sont:

$$\begin{aligned}
k = 1: &\quad y_{n+1} - y_n = h f_{n+1} \\
k = 2: &\quad \frac{3}{2} y_{n+1} - 2y_n + \frac{1}{2} y_{n-1} = h f_{n+1} \\
k = 3: &\quad \frac{11}{6} y_{n+1} - 3y_n + \frac{3}{2} y_{n-1} - \frac{1}{3} y_{n-2} = h f_{n+1} \\
k = 4: &\quad \frac{25}{12} y_{n+1} - 4y_n + 3y_{n-1} - \frac{4}{3} y_{n-2} + \frac{1}{4} y_{n-3} = h f_{n+1}
\end{aligned}$$

De nouveau, chaque formule définit implicitement l'approximation numérique y_{n+1} (les méthodes BDF sont très importantes pour la résolution de problèmes dits "raides").

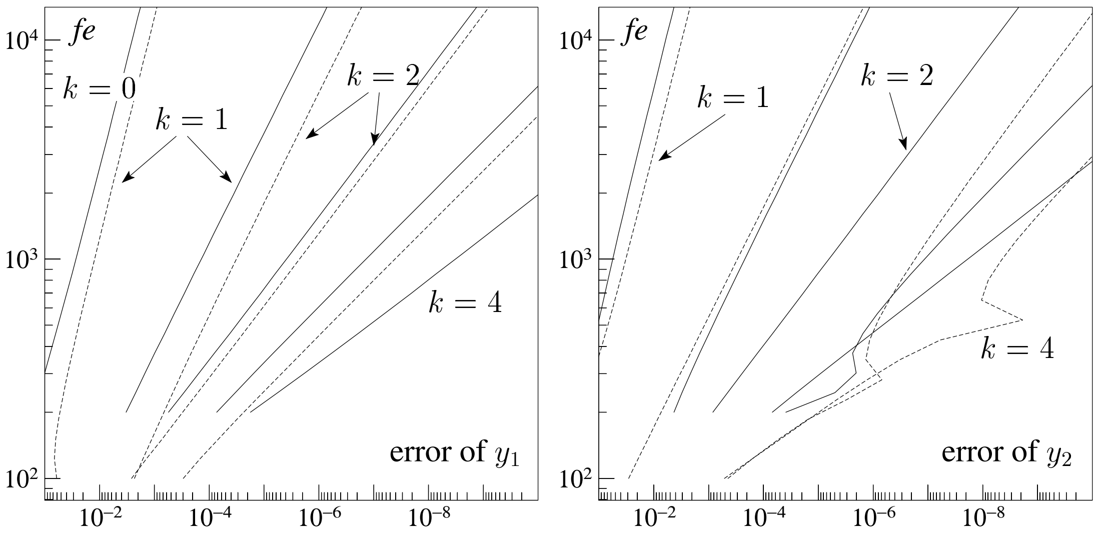


FIG. III.6 – *Erreur globale par rapport au travail numérique*

Expérience numérique. Pour plusieurs valeurs de k, nous avons appliqué la méthode d'Adams explicite (en pointillés dans la fig. III.6, $k = 1, 2, 3, 4$) ainsi que la méthode d'Adams implicite (sous la forme PECE, trait continu, $k = 0, 1, 2, 3, 4$) au problème (2.10). Comme dans la fig. III.2, le travail numérique est dessiné en fonction de l'erreur globale à la fin de l'intervalle.

On constate que cette erreur se comporte comme h^k pour les méthodes explicites et comme h^{k+1} pour les méthodes implicites. Pour pouvoir expliquer ce comportement, nous allons étudier l'erreur locale (ordre), la stabilité et la convergence des méthodes multipas.

III.7 Étude de l'erreur locale

Toutes les méthodes du paragraphe précédent sont de la forme

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i y_{n+i} = h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f_{n+i} \tag{7.1}$$

où $\alpha_k \neq 0$ et $|\alpha_0| + |\beta_0| > 0$. Une méthode est explicite si $\beta_k = 0$, sinon elle est implicite.

Définition 7.1 *Soit $y(x)$ une solution de $y' = f(x, y(x))$ et soit y_{n+k} la valeur obtenue par la méthode (7.1) en utilisant $y_i = y(x_i)$ pour $i = n, \dots, n+k-1$ (valeurs sur la solution exacte, voir fig. III.7). Alors,*

$$\textit{erreur locale} := y(x_{n+k}) - y_{n+k}. \tag{7.2}$$

On dit que la méthode (7.1) a l'ordre p si l'erreur locale est $\mathcal{O}(h^{p+1})$.

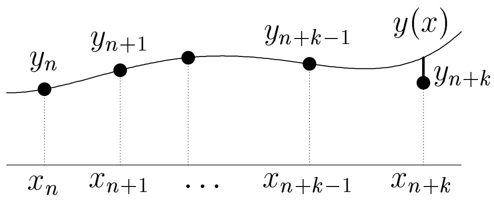


FIG. III.7 – *Définition de l'erreur locale*

Pour étudier l'erreur locale d'une méthode multipas, on considère le défaut de (7.1). Ceci nous conduit à l'opérateur L, défini par

$$L(y, x, h) = \sum_{i=0}^{k} \Big(\alpha_i y(x + ih) - h\beta_i y'(x + ih) \Big). \tag{7.3}$$

Comme $y_i = y(x_i)$ pour $i = n, \dots, n+k-1$ dans la définition ci-dessus, on a $f_i = f(x_i, y(x_i)) = y'(x_i)$ pour $i = n, \dots, n+k-1$, et en soustrayant la formule (7.1) de (7.3) on obtient

$$L(y, x_n, h) = \alpha_k \Big(y(x_{n+k}) - y_{n+k} \Big) - h\beta_k \Big(y'(x_{n+k}) - f_{n+k} \Big),$$

ce qui est équivalent à

$$L(y, x_n, h) = \Big(\alpha_k I - h\beta_k \frac{\partial f}{\partial y}(\dots) \Big) \big(y(x_{n+k}) - y_{n+k} \big) \tag{7.4}$$

(l'argument de $\partial f / \partial y$ peut être différent pour chaque ligne de cette matrice; voir le théorème des accroissements finis). La formule montre que l'erreur locale de la méthode (7.1) est $\mathcal{O}(h^{p+1})$ si et seulement si $L(y, x, h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ pour toute fonction $y(x)$ suffisamment différentiable.

Théorème 7.2 *Une méthode multipas a l'ordre p, si et seulement si ses coefficients satisfont*

$$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i = 0 \qquad \textit{et} \qquad \sum_{i=0}^{k} \alpha_i i^q = q \sum_{i=0}^{k} \beta_i i^{q-1} \qquad \textit{pour} \quad q = 1, \dots, p. \tag{7.5}$$

Démonstration. Dans la formule (7.3), en développant les expressions $y(x+ih)$ et $y'(x+ih)$ en série de Taylor, nous obtenons

$$\begin{aligned} L(y,x,h) &= \sum_{i=0}^{k} \alpha_i \sum_{q\geq 0} y^{(q)}(x)\frac{(ih)^q}{q!} \; - \; h\sum_{i=0}^{k} \beta_i \sum_{r\geq 0} y^{(r+1)}(x)\frac{(ih)^r}{r!} \\ &= y(x)\Big(\sum_{i=0}^{k} \alpha_i\Big) + \sum_{q\geq 1} y^{(q)}(x)\frac{h^q}{q!}\Big(\sum_{i=0}^{k} \alpha_i i^q - q\sum_{i=0}^{k} \beta_i i^{q-1}\Big). \end{aligned}$$

La condition $L(y,x,h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ nous donne les équations (7.5). □

Exemple (méthode d'Adams explicite à k pas). Pour $q \leq k$, considérons l'équation différentielle $y' = qx^{q-1}$ avec comme solution $y(x) = x^q$. Dans cette situation, le polynôme $p(t)$ de (6.2) est égal à $f(t, y(t))$ et la méthode d'Adams explicite donne le résultat exact. Par conséquent, on a $L(y,x,h) = 0$ (voir formule (7.4)) ce qui implique

$$\sum_{i=0}^{k}\Big(\alpha_i(x+ih)^q - qh\beta_i(x+ih)^{q-1}\Big) = 0$$

et aussi (7.5) (en posant $x = 0$). Ainsi, l'ordre de cette méthode est $\geq k$ (on peut en fait montrer qu'il est égal à k).

De la même manière, on montre que la méthode d'Adams implicite a l'ordre $p = k+1$ et la méthode BDF l'ordre $p = k$.

III.8 Stabilité

La structure simple des conditions d'ordre pour les méthodes multipas (voir (7.5)) permet de construire des méthodes avec un ordre maximal. Mais, ces méthodes sont-elles utiles?

Exemple (Dahlquist 1956). Posons $k = 2$ et construisons une méthode explicite ($\beta_2 = 0$; normalisation $\alpha_2 = 1$) avec un ordre maximal. Les conditions (7.5) avec $p = 3$ nous donnent la méthode d'ordre 3 suivante

$$y_{n+2} + 4y_{n+1} - 5y_n = h(4f_{n+1} + 2f_n). \tag{8.1}$$

Une application à l'équation différentielle $y' = y$, $y(0) = 1$ donne la formule de récurrence

$$y_{n+2} + 4(1-h)y_{n+1} - (5+2h)y_n = 0. \tag{8.2}$$

Pour résoudre (8.2), nous insérons $y_n = \zeta^n$ et obtenons l'équation caractéristique

$$\zeta^2 + 4(1-h)\zeta - (5+2h) = 0 \tag{8.3}$$

avec comme solution $\zeta_1 = 1 + h + \mathcal{O}(h^2)$, $\zeta_2 = -5 + \mathcal{O}(h)$. La solution de (8.2) est alors

$$y_n = C_1\zeta_1^n + C_2\zeta_2^n \tag{8.4}$$

où les constantes C_1 et C_2 sont déterminées par $y_0 = 1$ et $y_1 = e^h$ (on a choisi la valeur y_1 sur la solution exacte). Pour n grand, le terme $C_2\zeta_2^n \approx C_2(-5)^n$ est dominant et on n'a aucun espoir que la solution numérique converge vers la solution exacte e^x (fig. III.8).

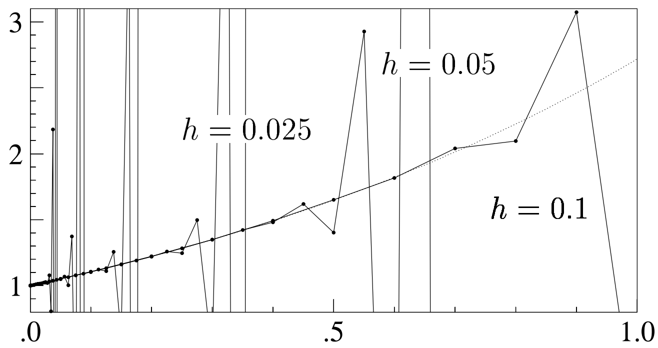


FIG. III.8 – *Instabilité de la méthode (8.1)*

La raison de la divergence de la solution numérique dans l'exemple précédent est que le polynôme

$$\rho(\zeta) := \sum_{i=0}^{k} \alpha_i \zeta^i \tag{8.5}$$

possède une racine qui est plus grande que 1 en valeur absolue.

Pour trouver une condition nécessaire pour la convergence, considérons le problème $y' = 0$ avec des valeurs initiales $y_0, y_1, \ldots, y_{k-1}$ perturbées. La solution numérique y_n satisfait

$$\alpha_k y_{n+k} + \ldots + \alpha_0 y_n = 0 \tag{8.6}$$

et est donnée par une combinaison linéaire de

ζ^n .... si ζ est une racine simple de $\rho(\zeta) = 0$,
$\zeta^n,\ n\zeta^n$ .... si ζ est une racine double de $\rho(\zeta) = 0$,
$\zeta^n,\ n\zeta^n, \ldots, n^{\ell-1}\zeta^n$ ...... si ζ est une racine de multiplicité ℓ.

Pour que la solution numérique reste bornée, il faut que les conditions de la définition suivante soient remplies.

Définition 8.1 *Une méthode multipas est stable, si les racines du polynôme $\rho(\zeta)$ satisfont*
i) si $\rho(\widehat{\zeta}) = 0$ alors $|\widehat{\zeta}| \le 1$,
ii) si $\rho(\widehat{\zeta}) = 0$ et $|\widehat{\zeta}| = 1$ alors $\widehat{\zeta}$ est une racine simple de $\rho(\zeta)$.

Pour les méthodes d'Adams, on a

$$\rho(\zeta) = \zeta^{k-1}(\zeta - 1). \tag{8.7}$$

Elles sont donc stables. Les méthodes BDF sont stables seulement pour $k \le 6$ (voir les exercices 17 et 18).

Remarque. Donnons encore sans démonstration un résultat intéressant qui s'appelle "la première barrière de Dahlquist". Pour une méthode stable, l'ordre p satisfait $p \le k + 2$ (si k est pair), $p \le k + 1$ (si k est impair) et $p \le k$ (si la méthode est explicite).

III.9 Convergence des méthodes multipas

Pour l'étude de la convergence des méthodes multipas, nous nous contentons du cas équidistant, le cas général étant trop technique.

Théorème 9.1 *Supposons que les k valeurs de départ satisfassent $\|y(x_i) - y_i\| \le C_0 h^p$ pour $i = 0, 1, \ldots, k-1$. Si la méthode multipas (7.1) est d'ordre p et stable, alors elle est convergente d'ordre p, c.-à-d. que l'erreur globale satisfait*

$$\|y(x_n) - y_n\| \le Ch^p \qquad \textit{pour} \qquad x_n - x_0 = nh \le \textit{Const.} \tag{9.1}$$

Démonstration. Le point essentiel de la démonstration est le suivant: on écrit formellement la méthode multipas (7.1) sous la forme d'une méthode à un pas et on applique les idées de la démonstration du paragraphe III.5.

Formulation comme une méthode à un pas. La méthode multipas (7.1) est de la forme (nous supposons $\alpha_k = 1$)

$$y_{n+k} = -\sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i} + h\Psi(x_n, y_n, \ldots, y_{n+k-1}, h). \tag{9.2}$$

Pour une méthode explicite ($\beta_k = 0$), Ψ est donné par

$$\Psi(x_n, y_n, \ldots, y_{n+k-1}, h) = \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i})$$

et pour une méthode générale, $\Psi = \Psi(x_n, y_n, \ldots, y_{n+k-1}, h)$ est défini implicitement par

$$\Psi = \sum_{i=0}^{k-1} \beta_i f(x_{n+i}, y_{n+i}) + \beta_k f\Big(x_{n+k}, h\Psi - \sum_{i=0}^{k-1} \alpha_i y_{n+i}\Big). \tag{9.3}$$

Considérons maintenant les super-vecteurs

$$Y_n := (y_{n+k-1}, \ldots, y_{n+1}, y_n)^T$$

et écrivons la méthode (9.2) sous la forme

$$Y_{n+1} = AY_n + h\Phi(x_n, Y_n, h) \tag{9.4}$$

où

$$A = \begin{pmatrix} -\alpha_{k-1} & -\alpha_{k-2} & \ldots & -\alpha_1 & -\alpha_0 \\ 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ & 1 & \ddots & & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \Phi(x, Y, h) = \begin{pmatrix} \Psi(x, Y, h) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{9.5}$$

(si les y_j étaient déjà des vecteurs, il faudrait remplacer A dans (9.4) par $A \otimes I$, etc; cependant nous n'utiliserons pas cette notation jugée trop lourde).

Erreur locale. Considérons des valeurs $y_n, \ldots, y_{n+k-1}$ sur la solution exacte, notons

$$Y(x_n) := (y(x_{n+k-1}), \ldots, y(x_{n+1}), y(x_n))^T \tag{9.6}$$

et appliquons une fois la méthode multipas. Ceci donne

$$\widehat{Y}_{n+1} = AY(x_n) + h\Phi(x_n, Y(x_n), h).$$

La première composante de $\widehat{Y}_{n+1} - Y(x_{n+1})$ est exactement l'erreur locale (7.2), tandis que les autres composantes sont égales à zéro. Comme la méthode a l'ordre p par hypothèse, nous avons

$$\|\widehat{Y}_{n+1} - Y(x_{n+1})\| \le C_1 h^{p+1} \qquad \text{pour} \qquad x_{n+1} - x_0 = (n+1)h \le \textit{Const}. \tag{9.7}$$

Propagation de l'erreur (stabilité). Considérons une deuxième solution numérique, définie par

$$Z_{n+1} = AZ_n + h\Phi(x_n, Z_n, h)$$

et estimons la différence $Y_{n+1} - Z_{n+1}$. Pour les méthodes d'Adams, on a

$$\begin{pmatrix} y_{n+k} - z_{n+k} \\ y_{n+k-1} - z_{n+k-1} \\ \vdots \\ y_{n+1} - z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_{n+k-1} - z_{n+k-1} \\ y_{n+k-1} - z_{n+k-1} \\ \vdots \\ y_{n+1} - z_{n+1} \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \Psi(x_n, Y_n, h) - \Psi(x_n, Z_n, h) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

En utilisant la norme infinie et une condition de Lipschitz pour Ψ (qui est une conséquence de celle de $f(x,y)$), on obtient

$$\|Y_{n+1} - Z_{n+1}\| \le (1 + h\Lambda)\|Y_n - Z_n\|. \tag{9.8}$$

Pour une méthode générale, on est obligé de choisir une autre norme pour arriver à (9.8). La stabilité de la méthode implique que ceci est possible (voir Hairer, Nørsett & Wanner (1993), paragraphe III.4).

Accumulation des erreurs propagées. Cette partie de la démonstration est exactement la même que pour les méthodes à un pas (voir le paragraphe III.5 et la fig. III.9). Au lieu de (5.2) et (5.5), on utilise (9.7) et (9.8). □

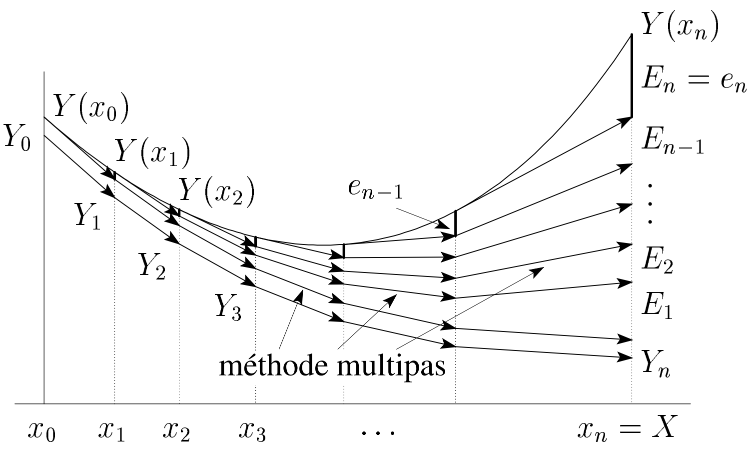


FIG. III.9 – *Estimation de l'erreur globale pour des méthodes multipas*

III.10 Exercices

1. Appliquer la méthode d'Euler, de Runge et de Heun (voir tableau III.1) au problème
$$y' = Ay, \quad y(0) = y_0. \tag{10.1}$$
Montrer que la solution numérique est donnée par
$$y_n = R(hA)^n y_0,$$
et calculer $R(hA)$ pour les trois méthodes.

2. Ecrire l'équation différentielle
$$z'' + z = 0,\ z(0) = 1,\ z'(0) = 1,$$
sous la forme (10.1). Calculer la solution exacte et la solution numérique avec la méthode de Runge sur $[0,1]$ avec $h = 1/2$.

3. Montrer que l'ordre d'une méthode de Runge-Kutta explicite ne peut pas être plus grand que le nombre d'étages; c.-à-d. $p \leq s$.

   Indication. Appliquer la méthode à $y' = y$, $y(0) = 1$ et observer que y_1 est un polynôme en h de degré s.

4. Donner la famille à un paramètre des méthodes de RK explicites, d'ordre $p = 2$ à $s = 2$ étages (avec comme paramètre libre c_2). Etudier le comportement de la solution numérique pour cette famille quand $c_2 \to 0$.

5. Calculer toutes les méthodes de Runge-Kutta explicites avec $p = s = 3$.

6. Pour le problème de Van der Pol
$$\begin{aligned} y_1' &= y_2, & y_1(0) &= 2, \\ y_2' &= (1 - y_1^2)y_2 - y_1, & y_2(0) &= 1/2, \end{aligned}$$
calculer le terme dominant de l'erreur locale (*i.e.* le coefficient du terme h^{p+1}) pour la méthode de Runge d'ordre 2 (tableau III.1).

7. Calculer l'erreur locale d'une méthode de Runge-Kutta pour l'équation différentielle
$$\begin{aligned} y_1' &= x^{r-1} & y_1(0) &= 0 \\ y_2' &= x^{q-1} y_1 & y_2(0) &= 0 \end{aligned}$$
avec r et q des entiers positifs. En déduire la condition
$$\sum_{i=1}^{s} b_i c_i^{q-1} \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} c_j^{r-1} = \frac{1}{r(q+r)}\,, \qquad r + q \leq p$$
pour une méthode d'ordre p.

8. (Runge 1905). Considérons une méthode de Runge-Kutta à s étages avec l'ordre $p = s \leq 4$ et supposons que tous les coefficients a_{ij} et b_j soient non-négatifs. Montrer que la constante de Lipschitz Λ de $\Phi(x, y, h)$ (voir le lemme du paragraphe III.5) satisfait
$$(1 + h\Lambda) \leq e^{hL}$$
où L est la constante de Lipschitz pour la fonction $f(x, y)$. En déduire que l'estimation (5.4) reste vraie si l'on remplace Λ par L.

9. Soit err_i une estimation de l'erreur au i-ème pas et définissons φ_i par
$$err_i = \varphi_i \cdot h_i^r.$$
Si on a fait le calcul jusqu'au n-ème pas, c.-à-d., si on connaît les valeurs de h_i et err_i pour $i \le n$, il faut trouver une valeur raisonable pour h_{n+1}.
   (a) L'hypothèse $\varphi_{n+1} = \varphi_n$ nous conduit à la formule courante du cours.
   (b) (Gustafsson 1992). Montrer que l'hypothèse $\Delta \ln \varphi_n = \Delta \ln \varphi_{n-1}$ (c.-à-d., $\varphi_{n+1}/\varphi_n = \varphi_n/\varphi_{n-1}$) nous conduit à la formule
$$h_{n+1} = 0.9 \cdot \frac{h_n^2}{h_{n-1}} \Big(\frac{Tol}{err_n} \cdot \frac{err_{n-1}}{err_n} \Big)^{1/r}.$$

10. ("Dense output"). Soit $\{y_n\}$ la solution numérique obtenue par une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (avec des pas constants). Pour un $x \in (x_n, x_{n+1})$, nous considérons le polynôme $u(x)$ de degré 3 qui satisfait
$$u(x_n) = y_n, \qquad u'(x_n) = f(x_n, y_n), \qquad u(x_{n+1}) = y_{n+1}, \qquad u'(x_{n+1}) = f(x_{n+1}, y_{n+1})$$
(interpolation d'Hermite, voir II.7). Montrer que, pour tout $x \in (x_n, x_{n+1})$, on a
$$u(x) - y(x) = \mathcal{O}(h^4).$$

11. Montrer que la formule de *Milne*
$$y_{n+1} = y_{n-1} + \frac{h}{3}\Big(f_{n+1} + 4f_n + f_{n-1}\Big)$$
est une méthode multipas d'ordre 4 qui est stable. Expliquer pourquoi ses coefficients sont les mêmes que pour la formule de quadrature de Simpson.

12. Calculer la solution générale de
$$y_{n+3} - 5y_{n+2} + 8y_{n+1} - 4y_n = 0,$$
puis donner une formule pour la solution particulière qui satisfait $y_0 = -1$, $y_1 = 0$, $y_2 = 4$.

13. (a) Appliquer la méthode d'Adams explicite
$$y_{n+1} = y_n + h\Big(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1}\Big)$$
avec $h = 1/8$ au problème $y' = y^2$, $y(0) = 1$, $y(1/2) = ?$
Pour y_1 utiliser la valeur obtenue par la méthode d'Euler explicite.
   (b) Appliquer la méthode d'Euler explicite au même problème, également avec $h = 1/8$.
   (c) Comparer les deux résultats numériques avec la solution exacte $y(1/2) = 2$.

14. En utilisant le théorème binomial généralisé (Analyse I), montrer que pour les coefficients γ_j des méthodes d'Adams explicites, la *fonction génératrice* $G(t) := \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j t^j$ devient
$G(t) = -t/((1-t)\log(1-t))$.
En déduire la formule
$$\gamma_m + \frac{1}{2}\gamma_{m-1} + \frac{1}{3}\gamma_{m-2} + \ldots + \frac{1}{m+1}\gamma_0 = 1. \tag{1}$$
Calculer à l'aide de (1) les γ_j pour $j = 1, 2, 3, 4$.
Indication. Utiliser l'égalité $\binom{s+j-1}{j} = (-1)^j \binom{-s}{j}$.

15. Vérifier que la méthode BDF à k pas est d'ordre $p = k$.

16. Quel est le polynôme $\varrho(\zeta)$ de la méthode d'Adams explicite à k pas?

17. Montrer que le polynôme $\rho(\zeta)$ de la méthode BDF à k pas est donné par

$$\rho(\zeta) = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} \zeta^{k-j} (\zeta - 1)^j \ .$$

En utilisant la transformation $\zeta = 1/(1-z)$, montrer que la méthode est stable si toutes les racines de

$$p(z) = \sum_{j=1}^{k} \frac{1}{j} z^j \tag{10.2}$$

sont en dehors du disque $|z-1| \leq 1$; elle est instable si au moins une racine de (10.2) se trouve dans ce disque.

Remarque. Le polynôme (10.2) est une somme partielle de la série pour $-\log(1-z)$.

18. En calculant numériquement les racines du polynôme (10.2), montrer que la méthode BDF est stable pour $1 \leq k \leq 6$, mais instable pour $k = 7$.

19. Une méthode multipas est dite symétrique si

$$\alpha_{k-i} = -\alpha_i, \quad \beta_{k-i} = \beta_i, \quad \text{pour } i = 0, 1, \ldots, k.$$

Démontrer que l'ordre (maximal) d'une méthode symétrique est toujours pair.

20. Soit $\varrho(\zeta)$ un polynôme quelconque de degré k satisfaisant $\varrho(1) = 0$ et $\varrho(1)' \neq 0$.

    (a) Montrer qu'il existe une unique méthode multipas implicite d'ordre $p = k+1$ dont le polynôme caractéristique est $\varrho(\zeta)$.

    (b) Montrer qu'il existe une unique méthode multipas explicite d'ordre $p = k$ dont le polynôme caractéristique est $\varrho(\zeta)$.

21. Le polynôme caractéristique

$$\varrho(\zeta) = \zeta^{k-2}(\zeta^2 - 1),$$

définit les méthodes de Nyström ou de Milne-Simpson. Calculer pour $k = 2$ la méthode explicite et implicite à l'aide de l'exercice précédent.

Chapitre IV

Systèmes d'Equations Linéaires

Considérons un système d'équations linéaires (a_{ij}, b_j donnés)

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &=& b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &=& b_2 \\ \vdots \qquad \vdots \qquad\qquad \vdots && \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n &=& b_n \end{array} \tag{0.1}$$

et cherchons sa solution $x_1, \ldots, x_n$. Très souvent, il est commode d'utiliser la notation matricielle

$$Ax = b. \tag{0.2}$$

Rappelons que le système (0.2) possède une solution unique si et seulement si $\det A \neq 0$.

Bibliographie sur ce chapitre

Å. Björck (1996): *Numerical Methods for Least Squares Problems.* SIAM. [MA 65/387]

P.G. Ciarlet (1982): *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*, Masson.

J.J. Dongarra, C.B. Moler, J.R. Bunch & G.W. Stewart (1979): LINPACK *Users' Guide*. SIAM.

D.K. Faddeev & V.N. Faddeeva (1963): *Computational Methods of Linear Algebra.* Freeman & Co. [MA 65/271]

G.H. Golub & C.F. Van Loan (1989): *Matrix Computations.* Second edition. John Hopkins Univ. Press. [MA 65/214]

N.J. Higham (1996): *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.* SIAM. [MA 65/379]

A.S. Householder (1964): *The Theory of Matrices in Numerical Analysis.* Blaisdell Publ. Comp. [MA 65/262]

G.W. Stewart (1973): *Introduction to Matrix Computations*. Academic Press.

L.N. Trefethen & D. Bau (1997): *Numerical Linear Algebra.* SIAM. [MA 65/388]

J.H. Wilkinson (1969): *Rundungsfehler*. Springer-Verlag.

J.H. Wilkinson & C. Reinsch (1971): *Handbook for Automatic Computation, Volume II, Linear Algebra*. Springer-Verlag.

IV.1 Elimination de Gauss

Soit donné le système (0.1) et supposons que $\det A \neq 0$. Si $a_{11} \neq 0$, on peut éliminer la variable x_1 dans les équations 2 à n à l'aide de l'équation 1, c.-à-d., on calcule

$$\ell_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}} \qquad \text{pour} \qquad i = 2, \ldots, n \tag{1.1}$$

et on remplace la ligne i par

$$\text{ligne } i \;-\; \ell_{i1} \,*\, \text{ligne } 1.$$

De cette manière, on obtient le système équivalent

$$\begin{aligned} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)} x_n &= b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(1)} x_2 + \ldots + a_{2n}^{(1)} x_n &= b_2^{(1)} \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \quad & \quad \vdots \\ a_{n2}^{(1)} x_2 + \ldots + a_{nn}^{(1)} x_n &= b_n^{(1)} \end{aligned} \tag{1.2}$$

où

$$\begin{aligned} a_{1j}^{(1)} &= a_{1j}, \qquad & a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - \ell_{i1} a_{1j} \\ b_1^{(1)} &= b_1, \qquad & b_i^{(1)} &= b_i - \ell_{i1} b_1 \end{aligned} \qquad \text{pour} \quad i = 2, \ldots, n \tag{1.3}$$

(si $a_{11} = 0$, on échange la première ligne de (0.1) avec une autre ligne pour arriver à $a_{11} \neq 0$; ceci est toujours possible car $\det A \neq 0$).

Le système (1.2) contient un sous-système de dimension $n-1$ sur lequel on peut répéter la procédure pour éliminer x_2 dans les équations 3 à n. On multiplie la ligne 2 de (1.2) par $\ell_{i2} = a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}$ et on la soustrait de la ligne i. Après $n-1$ étapes

$$(A, b) \;\to\; (A^{(1)}, b^{(1)}) \;\to\; (A^{(2)}, b^{(2)}) \;\to\; \ldots \;\to\; (A^{(n-1)}, b^{(n-1)}) =: (R, c)$$

on obtient un système triangulaire

$$\begin{aligned} r_{11} x_1 + r_{12} x_2 + \ldots + r_{1n} x_n &= c_1 \\ r_{22} x_2 + \ldots + r_{2n} x_n &= c_2 \\ \ddots \quad \vdots \quad & \quad \vdots \\ r_{nn} x_n &= c_n \end{aligned} \tag{1.4}$$

qui se résoud facilement

$$x_n = c_n / r_{nn}, \qquad x_i = \Big(c_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij} x_j\Big) / r_{ii} \qquad \text{pour} \quad i = n-1, \ldots, 1. \tag{1.5}$$

Théorème 1.1 *Soit* $\det A \neq 0$. *L'élimination de Gauss donne*

$$PA = LR \tag{1.6}$$

où P *est une matrice de permutation et*

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ \ell_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ldots & \ell_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}, \qquad R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \ldots & r_{1n} \\ & r_{22} & \ldots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix}. \tag{1.7}$$

La formule (1.6) s'appelle décomposition LR (left - right) de la matrice A.

Remarque. Les colonnes et les lignes d'une matrice de permutation P sont des vecteurs unité. On a $\det P = \pm 1$. Un exemple est

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad P \begin{pmatrix} \text{ligne } 1 \\ \text{ligne } 2 \\ \text{ligne } 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{ligne } 2 \\ \text{ligne } 1 \\ \text{ligne } 3 \end{pmatrix}.$$

Démonstration. Supposons que toutes les permutations nécessaires soient déjà faites avant que l'on commence l'élimination des variables (par abus de notation, nous écrivons A au lieu de PA dans cette démonstration). En utilisant les matrices

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -\ell_{21} & 1 & & & \\ -\ell_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ -\ell_{n1} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -\ell_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ 0 & -\ell_{n2} & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \dots \tag{1.8}$$

le premier pas de l'élimination de Gauss correspond à une multiplication de A avec L_1, le deuxième avec L_2, etc.,

$$L_1 A = A^{(1)}, \quad L_2 A^{(1)} = A^{(2)}, \quad \dots \quad , \quad L_{n-1} A^{(n-2)} = A^{(n-1)} = R.$$

Par conséquent,

$$R = (L_{n-1} L_{n-2} \cdot \ldots \cdot L_1) \cdot A \qquad \text{et} \qquad A = (L_{n-1} L_{n-2} \cdot \ldots \cdot L_1)^{-1} \cdot R.$$

Il reste à montrer que la matrice L de (1.7) est égale à $(L_{n-1} L_{n-2} \cdot \ldots \cdot L_1)^{-1}$. Pour ceci, nous appliquons la même procédure à la matrice L. La multiplication de L avec L_1 élimine les éléments de la première colonne en-dessous de la diagonale, puis la multiplication avec L_2 élimine ceux de la deuxième colonne, etc. Finalement, on obtient $(L_{n-1} L_{n-2} \cdot \ldots \cdot L_1) \cdot L = I =$*identité*, ce qu'il fallait démontrer. □

Calcul du déterminant d'une matrice. La formule (1.6) implique que $\det P \cdot \det A = \det L \cdot \det R$. Comme $\det P = (-1)^\sigma$, où σ est le nombre de permutations dans l'élimination de Gauss, on obtient

$$\det A = (-1)^\sigma \cdot r_{11} \cdot \ldots \cdot r_{nn}. \tag{1.9}$$

Résolution de systèmes linéaires. En pratique, on rencontre souvent la situation où il faut résoudre une suite de systèmes linéaires $Ax = b$, $Ax' = b'$, $Ax'' = b''$, etc., possédant tous la même matrice. Très souvent, on connaît b' seulement après la résolution du premier système.

C'est la raison pour laquelle on écrit, en général, le programme pour l'élimination de Gauss en deux sous-programmes :

DEC – calculer la décomposition LR (voir (1.6)) de la matrice;

SOL – résoudre le système $Ax = b$. D'abord on calcule le vecteur c (voir (1.4)), défini par $Lc = Pb$, puis on résoud le système triangulaire $Rx = c$.

Pour le problème ci-dessus, on appelle *une fois* le sous-programme DEC et puis, pour chaque système linéaire, le sous-programme SOL.

Coût de l'élimination de Gauss. Pour le passage de A à $A^{(1)}$, on a besoin de
$n-1$ divisions (voir (1.1)) et de
$(n-1)^2$ multiplications et additions (voir (1.3)).
Le calcul de $A^{(2)}$ nécessite $n-2$ divisions et $(n-2)^2$ multiplications et additions, etc. Comme le travail dû aux divisions est ici négligeable, le coût total de la décomposition LR s'élève à environ

$$(n-1)^2+(n-2)^2+\ldots+2^2+1^2 \approx \int_0^n x^2\,dx = \frac{n^3}{3} \qquad \text{opérations}$$

(opération = multiplication + addition).

Le calcul de $b^{(1)}$ nécessite $n-1$ opérations (voir (1.3)). Par conséquent, on obtient c avec $\approx (n-1)+\ldots+2+1 \approx n^2/2$ opérations. Similairement, la résolution du système (1.4) se fait en $n^2/2$ opérations.

En résumé, l'appel au sous-programme DEC nécessite $\approx n^3/3$ opérations, tandis que SOL a seulement besoin de $\approx n^2$ opérations (sur des ordinateurs sériels).

IV.2 Le choix du pivot

Dans l'élimination de Gauss, il faut au début choisir une équation (avec $a_{i1} \neq 0$; cet élément s'appelle "le pivot") à l'aide de laquelle on élimine x_1 dans les autres équations. Le choix de cette équation (choix du pivot) peut-il influencer la précision du résultat numérique, si l'on fait le calcul sur ordinateur en virgule flottante?

Exemple 2.1 (Forsythe) Considérons le système

$$\begin{aligned} 1.00\cdot 10^{-4}\cdot x_1 \;+\; 1.00\cdot x_2 \;&=\; 1.00 \\ 1.00\cdot x_1 \;+\; 1.00\cdot x_2 \;&=\; 2.00 \end{aligned} \tag{2.1}$$

avec pour solution exacte

$$x_1 = \frac{1}{0.9999} = 1.00010001\ldots, \qquad x_2 = \frac{0.9998}{0.9999} = 0.99989998\ldots. \tag{2.2}$$

Appliquons l'élimination de Gauss et simulons un calcul en virgule flottante avec 3 chiffres significatifs (en base 10).

a) Si l'on prend $a_{11} = 1.00\cdot 10^{-4}$ comme pivot, on obtient $\ell_{21} = a_{21}/a_{11} = 1.00\cdot 10^4$, $a_{22}^{(1)} = 1.00 - 1.00\cdot 10^4 = -1.00\cdot 10^4$ et $b_2^{(1)} = 2.00 - 1.00\cdot 10^4 = -1.00\cdot 10^4$. Par conséquent, $x_2 = b_2^{(1)}/a_{22}^{(1)} = 1.00$ (exacte!), mais pour x_1 nous obtenons

$$x_1 = (b_1 - a_{12}x_2)/a_{11} = (1.00 - 1.00 * 1.00)/(1.00\cdot 10^{-4}) = 0.$$

Le résultat numérique, obtenu pour x_1, est faux.

b) Si l'on échange les deux équations de (2.1), le pivot est 1.00 et l'élimination de Gauss donne: $\ell_{21} = 1.00\cdot 10^{-4}$, $a_{22}^{(1)} = 1.00 - 1.00\cdot 10^{-4} = 1.00$ et $b_2^{(1)} = 1.00 - 2.00 * 1.00\cdot 10^{-4} = 1.00$. De nouveau, on obtient $x_2 = b_2^{(1)}/a_{22}^{(1)} = 1.00$. Mais cette fois le résultat pour x_1 est

$$x_1 = (b_1 - a_{12}x_2)/a_{11} = (2.00 - 1.00 * 1.00)/1.00 = 1.00.$$

Les deux valeurs numériques (pour x_2 et aussi pour x_1) sont correctes.

Pour mieux comprendre dans quelle partie de l'élimination de Gauss on a perdu une information essentielle, considérons les sous-problèmes (addition, soustraction, multiplication, division) séparément et étudions leur "condition".

Condition d'un problème. Considérons une application $\mathcal{P} : I\!R^n \to I\!R$, le problème consistant à calculer $\mathcal{P}(x)$ pour les données $x = (x_1, \ldots, x_n)$. Il est intéressant d'étudier l'influence de perturbations dans x sur le résultat $\mathcal{P}(x)$.

Définition 2.2 *La condition κ d'un problème $\mathcal{P}$ est le plus petit nombre tel que*

$$\frac{|\widehat{x}_i - x_i|}{|x_i|} \le eps \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{|\mathcal{P}(\widehat{x}) - \mathcal{P}(x)|}{|\mathcal{P}(x)|} \le \kappa \cdot eps. \tag{2.3}$$

On dit que le problème $\mathcal{P}$ est bien conditionné, si κ n'est pas trop grand. Sinon, il est mal conditionné.

Dans cette définition, *eps* représente un petit nombre. Si *eps* est la précision de l'ordinateur (voir le paragraphe II.4) alors, $\widehat{x}_i$ peut être interprété comme l'arrondi de x_i. Remarquons encore que la condition κ dépend des données x_i et du problème $\mathcal{P}$, mais qu'elle ne dépend pas de l'algorithme avec lequel on calcule $\mathcal{P}(x)$.

Exemple 2.3 (multiplication de deux nombres réels) Soient donnés les nombres x_1 et x_2, considérons le problème de calculer $\mathcal{P}(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$. Pour les deux valeurs perturbées

$$\widehat{x}_1 = x_1(1+\epsilon_1), \qquad \widehat{x}_2 = x_2(1+\epsilon_2), \qquad |\epsilon_i| \le eps \tag{2.4}$$

on a

$$\frac{\widehat{x}_1 \cdot \widehat{x}_2 - x_1 \cdot x_2}{x_1 \cdot x_2} = (1+\epsilon_1)(1+\epsilon_2) - 1 = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_1 \cdot \epsilon_2.$$

Comme *eps* est un petit nombre, le produit $\epsilon_1 \cdot \epsilon_2$ est négligeable par rapport à $|\epsilon_1| + |\epsilon_2|$ et on obtient

$$\Big|\frac{\widehat{x}_1 \cdot \widehat{x}_2 - x_1 \cdot x_2}{x_1 \cdot x_2}\Big| \le 2 \cdot eps. \tag{2.5}$$

On a donc $\kappa = 2$ et ce problème est bien conditionné.

Exemple 2.4 (soustraction) Pour le problème $\mathcal{P}(x_1, x_2) = x_1 - x_2$, un calcul analogue donne

$$\Big|\frac{(\widehat{x}_1 - \widehat{x}_2) - (x_1 - x_2)}{x_1 - x_2}\Big| = \Big|\frac{x_1\epsilon_1 - x_2\epsilon_2}{x_1 - x_2}\Big| \le \underbrace{\frac{|x_1| + |x_2|}{|x_1 - x_2|}}_{\kappa} \cdot eps. \tag{2.6}$$

Si $\text{sign} x_1 = -\text{sign} x_2$ (ceci correspond à une addition et non pas à une soustraction) on a $\kappa = 1$; le problème est bien conditionné.

Par contre, si $x_1 \approx x_2$ la condition $\kappa = (|x_1| + |x_2|)/|x_1 - x_2|$ devient très grande et on est confronté à un problème qui est extrêmement mal conditionné. Pour mieux illustrer l'effet de cette grande condition, considérons l'exemple numérique

$$x_1 = \frac{1}{51}, \qquad x_2 = \frac{1}{52} \qquad \text{pour lequel} \qquad \kappa \approx \frac{2/50}{(1/50)^2} = 100.$$

En faisant le calcul avec 3 chiffres significatifs (en base 10), on obtient $\widehat{x}_1 = 0.196 \cdot 10^{-1}$, $\widehat{x}_2 = 0.192 \cdot 10^{-1}$ et $\widehat{x}_1 - \widehat{x}_2 = 0.400 \cdot 10^{-3}$. Comme les deux premiers chiffres sont les mêmes pour $\widehat{x}_1$ et $\widehat{x}_2$, la soustraction les fait disparaître et on n'a plus qu'un chiffre qui est significatif (le résultat exact est $1/(51 \cdot 52) = 0.377 \cdot 10^{-3}$). On parle d'*extinction de chiffres*.

Explication du choix du pivot. Si ℓ_{21} est très grand (ce qui est le cas dans la situation (a) de l'exemple de Forsythe) alors,

$$\left.\begin{array}{rcccc} a_{22}^{(1)} &=& a_{22}-\ell_{21}a_{12} &\approx& -\ell_{21}a_{12} \\ b_2^{(1)} &=& b_2-\ell_{21}b_1 &\approx& -\ell_{21}b_1 \end{array}\right\} \qquad x_2=\frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\approx\frac{b_1}{a_{12}}. \tag{2.7}$$

Cette valeur, obtenue pour x_2, est en général correcte. Mais le calcul de x_1

$$x_1=(b_1-a_{12}x_2)/a_{11}$$

nécessite une soustraction qui est très mal conditionnée car $a_{12}x_2\approx b_1$ et, à cause de l'extinction de chiffres, on perd de la précision.

La conclusion de cette étude est qu'il faut éviter des ℓ_{ij} trop grands.

Recherche partielle de pivot. L'idée est de ne pas se contenter d'un pivot qui soit différent de zéro ($a_{11}\neq 0$), mais d'échanger les équations de (0.1) afin que a_{11} soit le plus grand élément (en valeur absolue) de la première colonne de A. De cette manière, on a toujours $|\ell_{i1}|\leq 1$. La même stratégie est répétée pour les sous-systèmes apparaissant dans l'élimination de Gauss.

IV.3 La condition d'une matrice

Pour étudier la condition du problème "résoudre $Ax=b$", on a besoin de normes de vecteurs et de matrices.

Rappel sur la norme d'une matrice. Pour une matrice à m lignes et n colonnes, on définit

$$\|A\|=\max_{\|x\|=1}\|Ax\|=\max_{x\neq 0}\frac{\|Ax\|}{\|x\|}, \tag{3.1}$$

c.-à-d., la norme de A est le plus petit nombre $\|A\|$ qui possède la propriété

$$\|Ax\|\leq\|A\|\cdot\|x\| \qquad \text{pour tout} \quad x\in\mathbb{R}^n. \tag{3.2}$$

Evidemment, $\|A\|$ dépend des normes choisies dans $\mathbb{R}^n$ et $\mathbb{R}^m$. Il y a des situations où l'on connaît des formules explicites pour $\|A\|$. Par exemple, si l'on prend la même norme dans les deux espaces alors,

pour $\|x\|_1=\sum_{i=1}^n|x_i|$, on a

$$\|A\|_1=\max_{j=1,\ldots,n}\Big(\sum_{i=1}^m|a_{ij}|\Big); \tag{3.3}$$

pour $\|x\|_2=\big(\sum_{i=1}^n|x_i|^2\big)^{1/2}$, on a

$$\|A\|_2=\sqrt{\text{plus grande valeur propre de } A^TA}; \tag{3.4}$$

pour $\|x\|_\infty=\max_{i=1,\ldots,n}|x_i|$, on a

$$\|A\|_\infty=\max_{i=1,\ldots,m}\Big(\sum_{j=1}^n|a_{ij}|\Big). \tag{3.5}$$

La norme $\|A\|$ d'une matrice satisfait toutes les propriétés d'une norme. En plus, elle vérifie $\|I\| = 1$ pour la matrice d'identité et $\|A \cdot B\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$.

Après ce rappel sur la norme d'une matrice, essayons d'estimer la condition du problème $Ax = b$. Pour ceci, considérons un deuxième système linéaire $\widehat{A}\widehat{x} = \widehat{b}$ avec des données perturbées

$$\begin{aligned} \widehat{a}_{ij} &= a_{ij}(1+\epsilon_{ij}), \qquad & |\epsilon_{ij}| \leq \epsilon_A, \\ \widehat{b}_i &= b_i(1+\epsilon_i), \qquad & |\epsilon_i| \leq \epsilon_b, \end{aligned} \tag{3.6}$$

où ϵ_A et ϵ_b spécifient la précision des données (par exemple $\epsilon_A \leq$ *eps*, $\epsilon_b \leq$ *eps* où *eps* est la précision de l'ordinateur). Les hypothèses (3.6) impliquent (au moins pour les normes $\|\cdot\|_1$ et $\|\cdot\|_\infty$) que

$$\|\widehat{A} - A\| \leq \epsilon_A \cdot \|A\|, \qquad \|\widehat{b} - b\| \leq \epsilon_b \cdot \|b\|. \tag{3.7}$$

Notre premier résultat donne une estimation de $\|\widehat{x} - x\|$, en supposant que (3.7) soit vrai. Un peu plus loin, on donnera une estimation améliorée valable si (3.6) est satisfait.

Théorème 3.1 *Considérons les deux systèmes linéaires $Ax = b$ et $\widehat{A}\widehat{x} = \widehat{b}$ où A est une matrice inversible. Si (3.7) est vérifié et si $\epsilon_A \cdot \kappa(A) < 1$, alors on a*

$$\frac{\|\widehat{x} - x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \epsilon_A \cdot \kappa(A)} \cdot (\epsilon_A + \epsilon_b) \tag{3.8}$$

où $\kappa(A) := \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$. Le nombre $\kappa(A)$ s'appelle condition de la matrice A.

Démonstration. De $\widehat{b} - b = \widehat{A}\widehat{x} - Ax = (\widehat{A} - A)\widehat{x} + A(\widehat{x} - x)$, nous déduisons que

$$\widehat{x} - x = A^{-1}\Big(-(\widehat{A} - A)\widehat{x} + (\widehat{b} - b)\Big). \tag{3.9}$$

Maintenant, prenons la norme de (3.9), utilisons l'inégalité du triangle, les estimations (3.7), $\|\widehat{x}\| \leq \|x\| + \|\widehat{x} - x\|$ et $\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$. Nous obtenons ainsi

$$\|\widehat{x} - x\| \leq \|A^{-1}\|\Big(\epsilon_A \cdot \|A\| \cdot (\|x\| + \|\widehat{x} - x\|) + \epsilon_b \cdot \|A\| \cdot \|x\|\Big).$$

Ceci donne l'estimation (3.8). □

La formule (3.8) montre que pour $\epsilon_A \cdot \kappa(A) \ll 1$, l'amplification maximale de l'erreur des données sur le résultat est de $\kappa(A)$.

Propriétés de $\kappa(A)$. *Soit A une matrice inversible. Alors,*

a) $\kappa(A) \geq 1$ *pour toute A,*

b) $\kappa(\alpha A) = \kappa(A)$ *pour $\alpha \neq 0$,*

c) $\kappa(A) = \max_{\|y\|=1} \|Ay\| \Big/ \min_{\|z\|=1} \|Az\|$.

La propriété (c) permet d'étendre la définition de $\kappa(A)$ aux matrices de dimension $m \times n$ avec $m \neq n$.

Démonstration. La propriété (a) est une conséquence de $1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$. La propriété (b) est évidente. Pour montrer (c), nous utilisons

$$\|A^{-1}\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|A^{-1}x\|}{\|x\|} = \max_{z \neq 0} \frac{\|z\|}{\|Az\|} = \left(\min_{z \neq 0} \frac{\|Az\|}{\|z\|}\right)^{-1}.$$ □

TAB. IV.1 – *Conditions de matrices de Hilbert et Vandermonde*

n	2	4	6	8	10	12
$\kappa(H_n)$	27	$2.8 \cdot 10^4$	$2.9 \cdot 10^7$	$3.4 \cdot 10^{10}$	$3.5 \cdot 10^{13}$	$3.8 \cdot 10^{16}$
$\kappa(V_n)$	8	$5.6 \cdot 10^2$	$3.7 \cdot 10^4$	$2.4 \cdot 10^6$	$1.6 \cdot 10^8$	$1.0 \cdot 10^{10}$

Exemples de matrices ayant une grande condition. Considérons les matrices H_n (matrice de Hilbert) et V_n (matrice de Vandermonde) définies par ($c_j = j/n$)

$$H_n = \Big(\frac{1}{i+j-1}\Big)_{i,j=1}^{n}, \qquad\qquad V_n = \Big(\, c_j^{i-1}\,\Big)_{i,j=1}^{n}.$$

Leur condition pour la norme $\|\cdot\|_\infty$ est donnée dans le tableau IV.1.

Exemples de matrices ayant une petite condition. Une matrice U est orthogonale si $U^TU = I$. Pour la norme euclidienne, sa condition vaut 1 car $\|U\|_2 = 1$ et $\|U^{-1}\|_2 = 1$ (l'inverse $U^{-1} = U^T$ est aussi orthogonale).

Concernant l'interpolation avec des fonctions splines, nous avons rencontré la matrice (voir le paragraphe II.7, cas équidistant)

$$A = \frac{1}{h}\underbrace{\begin{pmatrix} 4 & 1 & & \\ 1 & 4 & 1 & \\ & 1 & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{n} \tag{3.10}$$

Le facteur $1/h$ n'influence pas $\kappa(A)$. Posons alors $h = 1$. Avec la formule (3.5), on vérifie facilement que $\|A\|_\infty = 6$. Pour estimer $\|A^{-1}\|_\infty$, écrivons A sous la forme $A = 4(I+N)$ où I est l'identité et N contient le reste. On voit que $\|N\|_\infty = 1/2$. En exprimant A^{-1} par une série géométrique, on obtient

$$\|A^{-1}\|_\infty \le \frac{1}{4}\Big(1 + \|N\|_\infty + \|N\|_\infty^2 + \|N\|_\infty^3 + \ldots\Big) \le \frac{1}{2}.$$

Par conséquent, $\kappa_\infty(A) \le 3$ indépendamment de la dimension du système.

Il y a des situations où l'estimation (3.8) est trop pessimiste. Considérons, par exemple, les systèmes $Ax = b$ et $\widehat{A}\widehat{x} = \widehat{b}$ où

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10^{-8} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}, \qquad \widehat{A} = \begin{pmatrix} 3(1+\epsilon_1) & 0 \\ 0 & 10^{-8}(1+\epsilon_2) \end{pmatrix}, \quad \widehat{b} = \begin{pmatrix} 2(1+\eta_1) \\ 3(1+\eta_2) \end{pmatrix}. \tag{3.11}$$

La différence des solutions satisfait

$$\widehat{x}_i - x_i = x_i\Big(\frac{1+\eta_i}{1+\epsilon_i} - 1\Big) \approx x_i(\eta_i - \epsilon_i).$$

Le problème est donc très bien conditionné. Par contre, la condition $\kappa(A)$ de la matrice A de (3.11) est $\kappa(A) = 3 \cdot 10^8$ et l'estimation (3.8) est obsolète.

Théorème 3.2 *Considérons les systèmes $Ax = b$ et $\widehat{A}\widehat{x} = \widehat{b}$ où A est inversible. Si (3.6) est vérifié et si $\epsilon_A \cdot \kappa_c(A) < 1$, alors on a*

$$\frac{\|\widehat{x} - x\|_\infty}{\|x\|_\infty} \le \frac{\kappa_c(A)}{1 - \epsilon_A \cdot \kappa_c(A)} \cdot (\epsilon_A + \epsilon_b) \tag{3.12}$$

où $\kappa_c(A) := \| \, |A^{-1}| \cdot |A| \, \|_\infty$.

Remarque. Si $B = (b_{ij})$ est une matrice arbitraire, on dénote par $|B|$ la matrice dont les éléments sont $|b_{ij}|$. On utilise une notation analogue pour des vecteurs. Pour deux vecteurs $x = (x_1, \ldots, x_n)^T$ et $y = (y_1, \ldots, y_n)^T$, on écrit $|x| \le |y|$ si on a $|x_i| \le |y_i|$ pour tout i.

Démonstration. Exactement comme dans la démonstration du théorème précédent, nous obtenons

$$\begin{aligned} |\widehat{x} - x| &\le |A^{-1}|(\epsilon_A \cdot |A| \cdot (|x| + |\widehat{x} - x|) + \epsilon_b \cdot |A| \cdot |x|) \\ &= |A^{-1}| \cdot |A| \cdot (\epsilon_A \cdot (|x| + |\widehat{x} - x|) + \epsilon_b \cdot |x|). \end{aligned} \tag{3.13}$$

En prenant la norme infinie de cette relation, nous arrivons au résultat (3.12). □

Si l'hypothèse (3.6) est vérifiée, l'estimation (3.12) est une amélioration de (3.8) car on a toujours

$$\kappa_c(A) \le \kappa_\infty(A). \tag{3.14}$$

De plus, la valeur $\kappa_c(A)$ est invariante par rapport à une multiplication à gauche avec une matrice diagonale, c.-à-d.,

$$\kappa_c(DA) = \kappa_c(A) \qquad \text{si} \quad D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n) \quad \text{avec} \quad d_i \ne 0. \tag{3.15}$$

Ceci est une conséquence de $|DA| = |D| \cdot |A|$ et de $|(DA)^{-1}| = |A^{-1}D^{-1}| = |A^{-1}| \cdot |D^{-1}|$. En particulier, pour une matrice diagonale (voir (3.11)), on a toujours $\kappa_c(D) = 1$.

IV.4 La stabilité d'un algorithme

Le but de ce paragraphe est d'étudier l'influence des erreurs d'arrondi sur le résultat pour l'élimination de Gauss. Commençons par la définition de la stabilité d'un algorithme et avec quelques exemples simples.

Un *algorithme* pour résoudre le problème $\mathcal{P}(x)$ est une suite d'opérations élémentaires $f_1, \ldots, f_n$ (addition, soustraction, multiplication, division, évaluation d'une racine, d'une fonction élémentaire, ...) telle que

$$\mathcal{P}(x) = f_n(f_{n-1}(\ldots f_2(f_1(x)) \ldots)). \tag{4.1}$$

En général, il existe beaucoup d'algorithmes différents pour résoudre le même problème $\mathcal{P}(x)$.

L'amplification de l'erreur, en faisant l'opération f_i, est décrite par la condition $\kappa(f_i)$ (voir la définition dans le paragraphe IV.2). L'estimation

$$\kappa(\mathcal{P}) \le \kappa(f_1) \cdot \kappa(f_2) \cdot \ldots \cdot \kappa(f_n). \tag{4.2}$$

est une conséquence simple de la définition de la condition d'un problème.

Définition 4.1 *Un algorithme est numériquement stable (au sens de "forward analysis") si*

$$\kappa(f_1) \cdot \kappa(f_2) \cdot \ldots \cdot \kappa(f_n) \le \mathit{Const} \cdot \kappa(\mathcal{P}) \tag{4.3}$$

où Const n'est pas trop grand (par exemple, Const $= \mathcal{O}(n)$*).*

La formule (4.3) exprime le fait que l'influence des erreurs d'arrondi durant le calcul de $\mathcal{P}(x)$ n'est pas beaucoup plus grande que l'influence d'erreurs dans les données (qui sont inévitables).

Exemple 4.2 Soit $x = 10^4$ et considérons le problème de calculer $1/(x(1+x))$. Examinons les deux algorithmes suivants :

a) $$x \quad \begin{array}{ccc} \nearrow & x & \searrow \\ \searrow & x+1 & \nearrow \end{array} \quad x(x+1) \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{x(x+1)}.$$

Toutes ces opérations sont très bien conditionnées (voir le paragraphe IV.3). Ainsi, cet algorithme est numériquement stable.

b) $$x \quad \begin{array}{ccccc} \nearrow & 1/x & & & \searrow \\ \searrow & x+1 & \longrightarrow & 1/(x+1) & \nearrow \end{array} \quad \frac{1}{x} - \frac{1}{x+1} = \frac{1}{x(x+1)}.$$

Dans cet algorithme, seules les trois premières opérations sont bien conditionnées. La soustraction, à la fin, est très mal conditionnée car $1/x \approx 1/(x+1)$. Ainsi, cet algorithme est numériquement *instable*.

La vérification, si un algorithme (non-trivial) est stable (au sens de "forward analysis"), est souvent très complexe et difficile. Pour cette raison, Wilkinson a introduit une autre définition de la stabilité d'un algorithme.

Définition 4.3 *Un algorithme pour résoudre le problème $\mathcal{P}(x)$ est numériquement stable (au sens de "backward analysis") si le résultat numérique $\widehat{y}$ peut être interprété comme un résultat exact pour des données perturbées $\widehat{x}$ (c.-à-d., $\widehat{y} = \mathcal{P}(\widehat{x})$) et si*

$$\frac{|\widehat{x}_i - x_i|}{|x_i|} \leq \textit{Const} \cdot \textit{eps} \tag{4.4}$$

où Const n'est pas trop grand et eps est la précision de l'ordinateur.

Remarque. Pour l'étude de cette stabilité, il ne faut pas connaître la condition du problème.

Exemple 4.4 Considérons le problème de calculer le produit scalaire $x_1 \cdot x_2 + x_3 \cdot x_4$. On utilise l'algorithme

$$(x_1, x_2, x_3, x_4) \quad \begin{array}{ccc} \nearrow & x_1 \cdot x_2 & \searrow \\ \searrow & x_3 \cdot x_4 & \nearrow \end{array} \quad x_1 \cdot x_2 + x_3 \cdot x_4. \tag{4.5}$$

Le résultat numérique (sous l'influence des erreurs d'arrondi) est

$$\Big(x_1(1+\epsilon_1) \cdot x_2(1+\epsilon_2)(1+\eta_1) + x_3(1+\epsilon_3) \cdot x_4(1+\epsilon_4)(1+\eta_2)\Big)(1+\eta_3)$$

où $|\epsilon_i|, |\eta_j| \leq \textit{eps}$. Ce résultat est égal à $\widehat{x}_1 \cdot \widehat{x}_2 + \widehat{x}_3 \cdot \widehat{x}_4$ si l'on pose

$$\begin{aligned} \widehat{x}_1 &= x_1(1+\epsilon_1)(1+\eta_1), & \widehat{x}_3 &= x_3(1+\epsilon_3)(1+\eta_2), \\ \widehat{x}_2 &= x_2(1+\epsilon_2)(1+\eta_3), & \widehat{x}_4 &= x_4(1+\epsilon_4)(1+\eta_3). \end{aligned}$$

Ainsi, (4.4) est vérifié pour *Const* $= 2$ (on néglige les produits $\epsilon_i \cdot \eta_j$). En conséquence, l'algorithme (4.5) est toujours numériquement stable (au sens de "backward analysis").

Cet exemple montre bien qu'un algorithme peut être stable, même si le problème est mal conditionné. Ainsi, il faut bien distinguer les notions "stabilité numérique" et "condition d'un problème".

La stabilité de l'élimination de Gauss. Soit donnée une matrice A ($\det A \neq 0$) ayant la décomposition $A = LR$ (on suppose que les permutations nécessaires sont déjà effectuées). En appliquant l'élimination de Gauss, nous obtenons deux matrices $\widehat{L}$ et $\widehat{R}$, qui représentent la décomposition exacte de la matrice $\widehat{A} := \widehat{L} \cdot \widehat{R}$. Pour montrer la stabilité numérique (au sens de "backward analysis") de l'élimination de Gauss, on a besoin de trouver une estimation de la forme $|\widehat{a}_{ij} - a_{ij}| \leq |a_{ij}| \cdot \textit{Const} \cdot \textit{eps}$. En tous cas, il faut estimer la différence $\widehat{a}_{ij} - a_{ij}$.

Théorème 4.5 (Wilkinson) *Soit A une matrice inversible et $\widehat{L}$, $\widehat{R}$ le résultat numérique de l'élimination de Gauss (avec recherche de pivot, c.-à-d. $|\widehat{\ell}_{ij}| \leq 1$ pour tout i, j). Alors,*

$$|\widehat{a}_{ij} - a_{ij}| \leq 2 \cdot a \cdot \min(i-1, j) \cdot \textit{eps} \tag{4.6}$$

où $a = \max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|$.

Démonstration. Lors de la $k^{\text{ème}}$ étape de l'élimination de Gauss, on calcule $\widehat{a}_{ij}^{(k)}$ à partir de $\widehat{a}_{ij}^{(k-1)}$. Si l'on prend en considération les erreurs d'arrondi, on obtient

$$\begin{aligned} \widehat{a}_{ij}^{(k)} &= (\widehat{a}_{ij}^{(k-1)} - \widehat{\ell}_{ik} \cdot \widehat{a}_{kj}^{(k-1)} \cdot (1 + \epsilon_{ijk}))(1 + \eta_{ijk}) \\ &= \widehat{a}_{ij}^{(k-1)} - \widehat{\ell}_{ik} \cdot \widehat{a}_{kj}^{(k-1)} + \mu_{ijk} \end{aligned} \tag{4.7}$$

où (en négligeant les termes $\mathcal{O}(\textit{eps}^2)$)

$$|\mu_{ijk}| \leq |\widehat{a}_{ij}^{(k)}| \cdot |\eta_{ijk}| + |\widehat{\ell}_{ik}| \cdot |\widehat{a}_{kj}^{(k-1)}| \cdot |\epsilon_{ijk}| \leq 2 \cdot a \cdot \textit{eps}. \tag{4.8}$$

Par définition de $\widehat{A}$, on a $\widehat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \widehat{\ell}_{ik} \cdot \widehat{r}_{kj} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} \widehat{\ell}_{ik} \cdot \widehat{a}_{kj}^{(k-1)}$ et, en utilisant la formule (4.7), on obtient pour $i > j$

$$\widehat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{j} (\widehat{a}_{ij}^{(k-1)} - \widehat{a}_{ij}^{(k)} + \mu_{ijk}) = a_{ij} + \sum_{k=1}^{j} \mu_{ijk} \tag{4.9a}$$

car $a_{ij}^{(j)} = 0$ dans cette situation. Pour $i \leq j$, on a

$$\widehat{a}_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} (\widehat{a}_{ij}^{(k-1)} - \widehat{a}_{ij}^{(k)} + \mu_{ijk}) + \widehat{\ell}_{ii} \cdot \widehat{r}_{ij} = a_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} \mu_{ijk} \tag{4.9b}$$

car $\widehat{\ell}_{ii} = 1$ et $\widehat{r}_{ij} = \widehat{a}_{ij}^{(i-1)}$. Les formules (4.9a) et (4.9b), ensemble avec l'estimation (4.8), démontrent l'estimation (4.6). □

Conséquence. L'élimination de Gauss est stable (au sens de "backward analysis") si le quotient

$$\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}| \Big/ \max_{i,j} |a_{ij}| \tag{4.10}$$

n'est pas trop grand.

On peut montrer que le quotient (4.10) est borné par 2^{n-1}, où n est la dimension de la matrice A (voir exercice 9). Mais, en général, cette constante est beaucoup plus petite. Pour illustrer ceci, nous avons pris un grand nombre de matrices de dimensions comprises entre 2 et 24 dont les éléments sont des nombres aléatoires dans $[-1, 1]$. Nous avons dessiné dans la fig. IV.1 le quotient (4.10) en fonction de la dimension de la matrice (chaque point représente la moyenne de 30 échantillons).

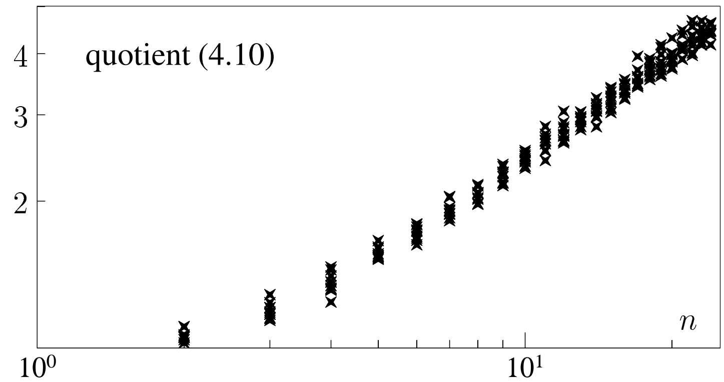


FIG. IV.1 – *Stabilité numérique de l'élimination de Gauss*

IV.5 L'algorithme de Cholesky

Etudions l'élimination de Gauss pour le cas important où
A est *symétrique* ($A^T = A$) et
A est *définie positive* ($x^T Ax > 0$ pour $x \neq 0$).
Le théorème suivant montre que, dans cette situation particulière, il n'est pas nécessaire d'effectuer une recherche de pivot.

Théorème 5.1 *Soit A une matrice symétrique et définie positive.*
a) L'élimination de Gauss est faisable sans recherche de pivot.
b) La décomposition $A = LR$ satisfait

$$R = DL^T \qquad \textit{avec} \qquad D = \mathrm{diag}(r_{11}, \ldots, r_{nn}). \tag{5.1}$$

Démonstration. a) On a $a_{11} = e_1^T Ae_1 > 0$ (avec $e_1 = (1, 0, \ldots, 0)^T$) car la matrice A est définie positive. Alors, on peut choisir a_{11} comme pivot dans la première étape de l'élimination de Gauss. Ceci donne

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ a & C \end{pmatrix} \qquad \longrightarrow \qquad A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ 0 & C^{(1)} \end{pmatrix} \tag{5.2}$$

où $c_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \dfrac{a_{i1}}{a_{11}} \cdot a_{1j}$ pour $i, j = 2, \ldots, n$, ce qui est équivalent à

$$C^{(1)} = C - \frac{1}{a_{11}} \cdot a \cdot a^T. \tag{5.3}$$

La matrice $C^{(1)}$ est symétrique (trivial). Montrons qu'elle est aussi définie positive. Pour ceci, nous prenons un $y \in I\!R^{n-1}$, $y \neq 0$. Il faut montrer que $y^T C^{(1)} y > 0$. La partition de (5.2) et le fait que A soit définie positive impliquent

$$(x_1, y^T) \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ a & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y \end{pmatrix} = a_{11}x_1^2 + 2x_1 \cdot y^T a + y^T Cy > 0. \tag{5.4}$$

En posant $x_1 = -y^T a/a_{11}$ dans (5.4), on obtient de (5.3) que

$$y^T C^{(1)} y = y^T Cy - \frac{1}{a_{11}}(y^T a)^2 > 0.$$

Par récurrence, on voit que la deuxième et aussi les autres étapes de l'élimination de Gauss sont faisables sans recherche de pivot.

b) La formule (5.1) est une conséquence de l'unicité de l'élimination de Gauss pour des matrices inversibles. En effet, on peut écrire $R = D\widehat{L}^T$ et on obtient $A = A^T = R^T L^T = \widehat{L}(DL^T)$, d'où $\widehat{L} = L$.

Pour montrer l'unicité de l'élimination de Gauss, supposons $A = LR = \widehat{L}\widehat{R}$ et considérons l'identité $\widehat{L}^{-1}L = \widehat{R}R^{-1}$. Le produit de deux matrices triangulaires inférieures reste une matrice triangulaire inférieure; de même pour les matrices triangulaires supérieures. Comme les éléments de la diagonale de $\widehat{L}^{-1}L$ sont tous égaux à 1, on a

$$\widehat{L}^{-1}L = \widehat{R}R^{-1} = I, \tag{5.5}$$

ce qui implique l'unicité de l'élimination de Gauss. □

La décomposition

$$A = LDL^T \tag{5.6}$$

s'appelle *décomposition rationnelle de Cholesky*. Comme $r_{ii} > 0$ (A est définie positive), on peut considérer la racine $D^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{r_{11}}, \ldots, \sqrt{r_{nn}})$, et la décomposition (5.6) devient $A = (LD^{1/2})(D^{1/2}L^T) = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^T$. Par abus de notation, en écrivant L pour $LD^{1/2}$, nous obtenons la *décomposition de Cholesky*

$$A = LL^T \qquad \text{où} \qquad L = \begin{pmatrix} \ell_{11} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ldots & \ell_{nn} \end{pmatrix}. \tag{5.7}$$

Une comparaison des coefficients dans l'identité $A = LL^T$ donne pour

$$\begin{aligned} i = k: &\qquad a_{kk} = \ell_{k1}^2 + \ell_{k2}^2 + \ldots + \ell_{kk}^2 \\ i > k: &\qquad a_{ik} = \ell_{i1}\ell_{k1} + \ldots + \ell_{i,k-1}\ell_{k,k-1} + \ell_{ik}\ell_{kk} \end{aligned}$$

et on en déduit l'algorithme suivant:

Algorithme de Cholesky.

for $k := 1$ **to** n **do**
  $\ell_{kk} := (a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{kj}^2)^{1/2}$;
  for $i := k+1$ **to** n **do**
    $\ell_{ik} := (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{ij}\ell_{kj})/\ell_{kk}$.

Le coût de cet algorithme. En négligeant les n racines, le nombre d'opérations nécessaires est d'environ

$$\sum_{k=1}^{n} (n-k)\cdot k \approx \int_0^n (n-x)x\,dx = \frac{n^3}{6}.$$

Ceci correspond à la moitié du coût de la décomposition LR.

Pour résoudre le système $Ax = b$, on calcule d'abord la décomposition de Cholesky (5.7). Puis, on résoud successivement les deux systèmes $Lc = b$ et $L^T x = c$, dont les matrices sont triangulaires.

Comme pour l'élimination de Gauss, on peut étudier la stabilité de l'algorithme de Cholesky. On a l'estimation suivante.

Théorème 5.2 *Soit A une matrice symétrique et définie positive. Notons $\widehat{A} = \widehat{L}\cdot\widehat{L}^T$, où $\widehat{L}$ est la matrice triangulaire obtenue par l'algorithme de Cholesky. Alors,*

$$|\widehat{a}_{ij} - a_{ij}| \le a_0 \cdot \min(i,j) \cdot \textit{eps} \tag{5.8}$$

où $a_0 = \max_{i,j} |a_{ij}| = \max_i |a_{ii}|$. □

Ce résultat démontre que l'algorithme de Cholesky est toujours numériquement stable. Il n'est donc pas nécessaire de faire une recherche de pivot, si la matrice A est symétrique et définie positive.

IV.6 Systèmes surdéterminés – méthode des moindres carrés

Considérons un système d'équations linéaires

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}x_1 & + & a_{m2}x_2 & + & \ldots & + & a_{mn}x_n & = & b_m \end{array} \tag{6.1}$$

où $m \geq n$ (matriciellement: $Ax = b$ avec $x \in I\!R^n$ et $b \in I\!R^m$; A est une matrice $m \times n$). Evidemment, le système (6.1) ne possède, en général, pas de solution. L'idée est de chercher un vecteur x tel que

$$\|Ax - b\|_2 \to \min \tag{6.2}$$

pour la norme euclidienne. Une justification probabiliste de cette condition sera donnée dans le paragraphe IV.8. Le nom "méthode des moindres carrés" indique le choix de la norme dans (6.2) (la somme des carrés des erreurs doit être minimale).

Théorème 6.1 *Soit A une matrice $m \times n$ (avec $m \geq n$) et soit $b \in I\!R^m$. Le vecteur x est solution de (6.2) si et seulement si*

$$A^T A x = A^T b. \tag{6.3}$$

Les équations du système (6.3) s'appellent "équations normales".

Démonstration. Les minima de la fonction quadratique

$$f(x) := \|Ax - b\|^2 = (Ax - b)^T (Ax - b) = x^T A^T A x - 2x^T A^T b + b^T b$$

sont donnés par $0 = f'(x) = 2(x^T A^T A - b^T A)$. □

Interprétation géométrique. L'ensemble $E = \{Ax \mid x \in I\!R^n\}$ est un sous-espace linéaire de $I\!R^m$. Pour un $b \in I\!R^m$ arbitraire, x est une solution de (6.2) si et seulement si Ax est la projection orthogonale de b sur E. Ceci signifie que $Ax - b \perp Az$ pour tout $z \in I\!R^n$. On en déduit que $A^T(Ax - b) = 0$ et on a ainsi établi une deuxième démonstration de (6.3).

Exemple 6.2 Pour étudier le phénomène de la thermo-électricité, on fait l'expérience suivante. On soude un fil de cuivre avec un fil de constantan de manière à obtenir une boucle fermée. Un point de soudure est maintenu à température fixe ($T_0 \approx 24°$C), alors que l'on fait varier la température T de l'autre. Ceci génère une tension U, laquelle est mesurée en fonction de T (voir le tableau IV.2 et la fig. IV.2). Les données du tableau IV.2 sont prises du livre de P.R. Bevington[1].

On suppose que cette dépendance obéit à la loi

$$U = a + bT + cT^2 \tag{6.4}$$

1. P.R. Bevington (1969): *Data reduction and error analysis for the physical sciences*. McGraw-Hill Book Company).

TAB. IV.2 – *Tensions mesurées en fonction de la température T*

i	T_i°C	U_i	i	T_i°C	U_i	i	T_i°C	U_i
1	0	-0.89	8	35	0.42	15	70	1.88
2	5	-0.69	9	40	0.61	16	75	2.10
3	10	-0.53	10	45	0.82	17	80	2.31
4	15	-0.34	11	50	1.03	18	85	2.54
5	20	-0.15	12	55	1.22	19	90	2.78
6	25	0.02	13	60	1.45	20	95	3.00
7	30	0.20	14	65	1.68	21	100	3.22

et on cherche à déterminer les paramètres a, b et c. Les données du tableau IV.2 nous conduisent au système surdéterminé ($n = 3$, $m = 21$)

$$U_i = a + bT_i + cT_i^2, \qquad i = 1, \ldots, 21. \tag{6.5}$$

En résolvant les équations normales (6.3) pour ce problème, on obtient $a = -0.886$, $b = 0.0352$ et $c = 0.598 \cdot 10^{-4}$. Avec ces paramètres, la fonction (6.4) est dessinée dans la fig. IV.2. On observe une très bonne concordance avec les données.

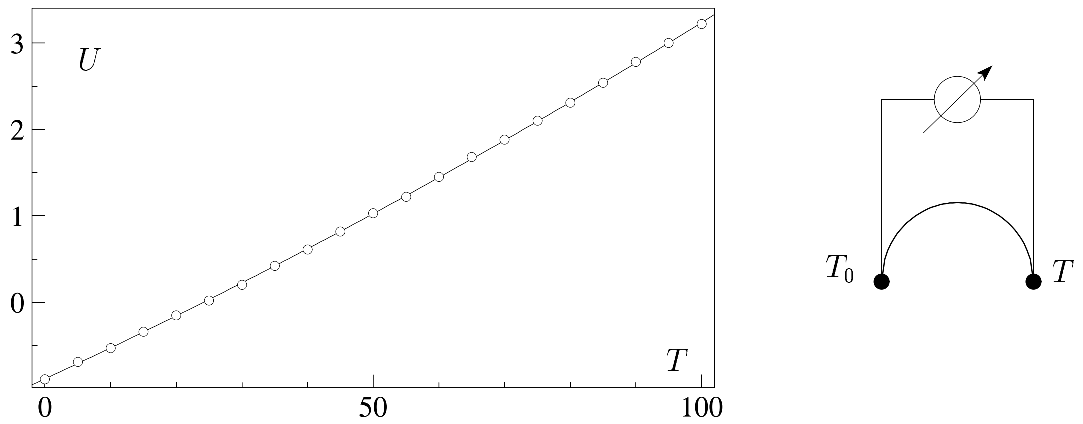


FIG. IV.2 – *Tension en fonction de la température et schéma de l'expérience*

Remarque. Les équations normales (6.3) possèdent toujours au moins une solution (la projection sur E existe toujours). La matrice A^TA est symétrique et non-négative ($x^TA^TAx = \|Ax\|^2 \geq 0$). Elle est définie positive si les colonnes de A sont linéairement indépendantes ($Ax \neq 0$ pour $x \neq 0$). Dans cette situation, on peut appliquer l'algorithme de Cholesky pour résoudre le système (6.3). Mais, souvent, il est préférable de calculer la solution directement de (6.2) sans passer par les équations normales (6.3).

IV.7 Décomposition QR d'une matrice

Dans l'élimination de Gauss, on a multiplié l'équation $Ax = b$ par la matrice triangulaire $L_{n-1} \cdot \ldots \cdot L_2 \cdot L_1$. De cette manière, on a réduit le problème original à $Rx = c$ où R est une matrice triangulaire supérieure. Malheureusement, la multiplication de $Ax - b$ avec L_i ne conserve pas la norme du vecteur.

Pour résoudre (6.2), nous cherchons une matrice orthogonale Q telle que

$$Q^T(Ax-b) = Rx - c = \begin{pmatrix} R' \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} c' \\ c'' \end{pmatrix} \tag{7.1}$$

où R' (une matrice carrée de dimension n) est triangulaire supérieure et $(c', c'')^T$ est la partition de $c = Q^T b$ telle que $c' \in \mathbb{R}^n$ et $c'' \in \mathbb{R}^{m-n}$. Comme le produit par une matrice orthogonale ne change pas la norme du vecteur, on a

$$\|Ax-b\|_2^2 = \|Q^T(Ax-b)\|_2^2 = \|Rx-c\|_2^2 = \|R'x-c'\|_2^2 + \|c''\|_2^2. \tag{7.2}$$

On obtient alors la solution de (6.2) en résolvant le système

$$R'x = c'. \tag{7.3}$$

Le problème consiste à calculer une matrice orthogonale Q (c.-à-d., $Q^TQ = I$) et une matrice triangulaire supérieure R telles que $Q^TA = R$ ou de façon équivalente

$$A = QR. \tag{7.4}$$

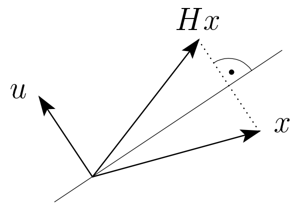
Cette factorisation s'appelle la "décomposition QR" de la matrice A. Pour arriver à ce but, on peut se servir des rotations de Givens (voir exercice 12 du chapitre V) ou des réflexions de Householder.

Réflexions de Householder (1958). Une matrice de la forme

$$H = I - 2uu^T \qquad \text{où} \qquad u^Tu = 1 \tag{7.5}$$

a les propriétés suivantes :

- H est une réflexion à l'hyper-plan $\{x \mid u^Tx = 0\}$ car $Hx = x - u\cdot(2u^Tx)$ et $Hx + x \perp u$.
- H est symétrique.
- H est orthogonale, car



$$H^TH = (I-2uu^T)^T(I-2uu^T) = I - 4uu^T + 4uu^Tuu^T = I.$$

En multipliant A avec des matrices de Householder, nous allons essayer de transformer A en une matrice de forme triangulaire.

L'algorithme de Householder - Businger - Golub. Dans une *première étape*, on cherche une matrice $H_1 = I - 2u_1u_1^T$ ($u_1 \in \mathbb{R}^m$ et $u_1^Tu_1 = 1$) telle que

$$H_1A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & \times & \cdots & \times \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \times & \cdots & \times \end{pmatrix}. \tag{7.6}$$

Si l'on dénote par A_1 la première colonne de A, il faut que $H_1A_1 = \alpha_1 e_1 = (\alpha_1, 0, \ldots, 0)^T$ et on obtient $|\alpha_1| = \|H_1A_1\|_2 = \|A_1\|_2$. La forme particulière de H_1 implique que

$$H_1A_1 = A_1 - 2u_1\cdot u_1^TA_1 = \alpha_1 e_1.$$

L'expression $u_1^T A_1$ est un scalaire. Par conséquent,

$$u_1 = C \cdot v_1 \qquad \text{où} \qquad v_1 = A_1 - \alpha_1 e_1 \tag{7.7}$$

et la constante C est déterminée par $\|u_1\|_2 = 1$. Comme on a encore la liberté de choisir le signe de α_1, posons

$$\alpha_1 = -\text{sign}(a_{11}) \cdot \|A_1\|_2 \tag{7.8}$$

pour éviter une soustraction mal conditionnée dans le calcul de $v_1 = A_1 - \alpha_1 e_1$.

Calcul de $H_1 A$. Notons par A_j et $(H_1A)_j$ les $j^{\text{èmes}}$ colonnes de A et H_1A respectivement. Alors, on a

$$(H_1A)_j = A_j - 2u_1u_1^T A_j = A_j - \beta \cdot v_1^T A_j \cdot v_1 \qquad \text{où} \qquad \beta = \frac{2}{v_1^T v_1}. \tag{7.9}$$

Le facteur β peut être calculé à l'aide de

$$\beta^{-1} = \frac{v_1^T v_1}{2} = \frac{1}{2}\Big(A_1^T A_1 - 2\alpha_1 a_{11} + \alpha_1^2\Big) = -\alpha_1(a_{11} - \alpha_1). \tag{7.10}$$

Dans une *deuxième étape*, on applique la procédure précédente à la sous-matrice de dimension $(m-1) \times (n-1)$ de (7.6). Ceci donne un vecteur $\bar u_2 \in I\!R^{m-1}$ et une matrice de Householder $\bar H_2 = I - 2\bar u_2 \bar u_2^T$. En posant $u_2 = (0, \bar u_2)^T$, une multiplication de (7.6) par la matrice $H_2 = I - 2u_2u_2^T$ donne

$$H_2H_1A = H_2 \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & & & \\ \vdots & & C & \\ 0 & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \cdots & \times \\ 0 & & & \\ \vdots & & \bar H_2 C & \\ 0 & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \times & \times & \cdots & \times \\ 0 & \alpha_2 & \times & \cdots & \times \\ 0 & 0 & \times & \cdots & \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \times & \cdots & \times \end{pmatrix}.$$

En continuant cette procédure, on obtient après n étapes (après $n-1$ étapes si $m = n$) une matrice triangulaire

$$\underbrace{H_n \cdot \ldots \cdot H_2H_1}_{Q^T} A = R = \begin{pmatrix} R' \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Ceci donne la décomposition (7.4) avec $Q^T = H_n \cdot \ldots \cdot H_2H_1$.

Coût de la décomposition QR. La première étape exige le calcul de α_1 par la formule (7.8) ($\approx m$ opérations), le calcul de $2/v_1^T v_1$ par la formule (7.10) (travail négligeable) et le calcul de $(H_1A)_j$ pour $j = 2, \ldots, n$ par la formule (7.9) ($\approx (n-1) \cdot 2 \cdot m$ opérations). En tout, cette étape nécessite environ $2mn$ opérations. Pour la décomposition QR, on a alors besoin de

$2(n^2 + (n-1)^2 + \ldots + 1) \approx 2n^3/3$ opérations si $m = n$ (matrice carrée);

$2m(n + (n-1) + \ldots + 1) \approx mn^2$ opérations si $m \gg n$.

En comparant encore ce travail avec celui de la résolution des équations normales ($\approx mn^2/2$ opérations pour le calcul de A^TA et $\approx n^3/6$ opérations pour la décomposition de Cholesky de A^TA), on voit que la décomposition QR coûte au pire le double.

Remarque. Si les colonnes de la matrice A sont linéairement indépendantes, tous les α_i sont non nuls et l'algorithme de Householder–Businger–Golub est applicable. Une petite modification (échange des colonnes de A) permet de traiter aussi le cas général.

Concernant la programmation, il est important de ne calculer ni les matrices H_i, ni la matrice Q. On retient simplement les valeurs α_i et les vecteurs v_i (pour $i = 1, \ldots, n$) qui contiennent déjà toutes les informations nécessaires pour la décomposition. Comme pour l'élimination de Gauss, on écrit deux sous-programmes. DECQR fournit la décomposition QR de la matrice A (c.-à-d. les α_i, v_i et la matrice R). Le sous-programme SOLQR calcule $Q^T b$ et la solution du système triangulaire $R'x = c'$ (voir (7.3)). Le calcul de $Q^T b = H_n \cdot \ldots \cdot H_2 H_1 b$ se fait avec une formule analogue à (7.9).

Exemple 7.1 Si les colonnes de A sont "presque" linéairement dépendantes, la résolution du problème (6.2) à l'aide de la décomposition QR est préférable à celle des équations normales. Considérons, par exemple,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

où ϵ est une petite constante, disons $\epsilon^2 < eps$. Avec un calcul exact, on obtient

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1+\epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon^2 \end{pmatrix}, \qquad A^T b = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

et la solution est donnée par

$$x_1 = x_2 = \frac{1}{2+\epsilon^2} = \frac{1}{2} + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Un calcul en virgule flottante fait disparaître le ϵ^2 dans $A^T A$ et cette matrice devient singulière. On n'obtient pas de solution.

Par contre, l'algorithme de Householder–Businger–Golub donne (en négligeant ϵ^2) $\alpha_1 = -1$, $v_1 = (2, \epsilon, 0)^T$,... et à la fin

$$R = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & \sqrt{2}\cdot\epsilon \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad Q^T b = \begin{pmatrix} -1 \\ \epsilon/\sqrt{2} \\ -\epsilon/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

La résolution de (7.3) donne une bonne approximation de la solution exacte.

IV.8 Etude de l'erreur de la méthode des moindres carrés

Comme c'est le cas dans l'exemple du paragraphe IV.6, nous cherchons les paramètres $x_1, \ldots, x_n$ d'une loi

$$\sum_{j=1}^{n} c_j(t)\, x_j = b \tag{8.1}$$

qui relie les variables t et b (les fonctions $c_j(t)$ sont données, p. ex. $c_j(t) = t^{j-1}$). Supposons que pour plusieurs valeurs de t (disons $t_1, \ldots, t_m$, $m \gg n$) l'on puisse mesurer les quantités $b_1, \ldots, b_m$. On obtient ainsi le système surdéterminé

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \qquad i = 1, \ldots, m \tag{8.2}$$

où $a_{ij} = c_j(t_i)$. En pratique, les b_i sont des mesures légèrement erronées et il est naturel de les considérer comme des valeurs plus ou moins aléatoires. L'étude de l'erreur de la solution x, obtenue par la méthode des moindres carrés, se fait alors dans le cadre de la théorie des probabilités.

Rappel sur la théorie des probabilités. Considérons des *variables aléatoires* X (dites "continues") qui sont spécifiées par une fonction de densité $f : I\!R \to I\!R$, c.-à-d., la probabilité de l'événement que la valeur de X se trouve dans l'intervalle $[a,b)$ est donnée par

$$P(a \leq X < b) = \int_a^b f(x)\,dx \tag{8.3}$$

avec $f(x) \geq 0$ pour $x \in I\!R$ et $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx = 1$.

On appelle *espérance* (mathématique) de la variable aléatoire X le nombre réel

$$\mu_X = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\,dx, \tag{8.4}$$

et *variance* la valeur

$$\sigma_X^2 = \mathit{Var}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu_X)^2 f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x)\,dx - \mu_X^2. \tag{8.5}$$

Exemple 8.1 Si une variable aléatoire satisfait (8.3) avec (voir la fig. IV.3)

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma}\cdot\exp\Big(-\frac{1}{2}\Big(\frac{x-\mu}{\sigma}\Big)^2\Big) \tag{8.6}$$

alors on dit que la variable aléatoire satisfait la *loi normale* ou la *loi de Gauss – Laplace* que l'on symbolise par $N(\mu,\sigma^2)$. On vérifie facilement que μ est l'espérance et σ^2 la variance de cette variable aléatoire.

La loi normale est parmi les plus importantes en probabilités. Une raison est due au "théorème de la limite centrale" qui implique que les observations pour la plupart des expériences physiques obéissent à cette loi.

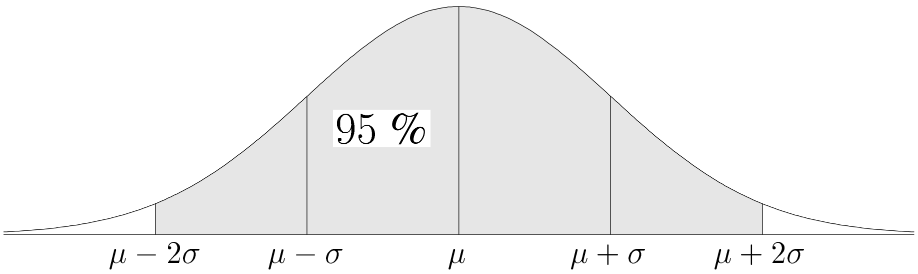


FIG. IV.3 – *Fonction de densité pour la loi normale*

Rappelons aussi que n variables aléatoires $X_1,\ldots,X_n$ sont indépendantes si, pour tout a_i, b_i, on a

$$P(a_i \leq X_i < b_i,\ i=1,\ldots,n) = \prod_{i=1}^{n} P(a_i \leq X_i < b_i). \tag{8.7}$$

Lemme 8.2 *Soient X et Y deux variables aléatoires indépendantes avec comme fonctions de densité $f(x)$ et $g(y)$ respectivement et soient $\alpha,\beta \in I\!R$ avec $\alpha \neq 0$. Alors, les variables aléatoires $\alpha X+\beta$ et $X+Y$ possèdent les fonctions de densité*

$$\frac{1}{|\alpha|}f\Big(\frac{x-\beta}{\alpha}\Big) \qquad \textit{et} \qquad (f*g)(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f(z-y)g(y)\,dy. \tag{8.8}$$

Leur espérance mathématique est

$$E(\alpha X+\beta)=\alpha E(X)+\beta, \qquad E(X+Y)=E(X)+E(Y) \tag{8.9}$$

et leur variance satisfait

$$\mathit{Var}(\alpha X+\beta)=\alpha^2\mathit{Var}(X), \qquad \mathit{Var}(X+Y)=\mathit{Var}(X)+\mathit{Var}(Y). \tag{8.10}$$

Démonstration. La fonction de densité pour la variable aléatoire $\alpha X+\beta$ découle de (pour $\alpha>0$)

$$P(a\le \alpha X+\beta<b)=P\Big(\frac{a-\beta}{\alpha}\le X<\frac{b-\beta}{\alpha}\Big)=\int_{(a-\beta)/\alpha}^{(b-\beta)/\alpha} f(x)\,dx=\int_a^b \alpha^{-1} f\Big(\frac{t-\beta}{\alpha}\Big)\,dt.$$

Les propriétés (8.9) et (8.10) pour $\alpha X+\beta$ en sont une conséquence directe.

Comme X et Y sont supposées indépendantes, on obtient (en posant $z=x+y$)

$$P(a\le X+Y<b)=\iint_{a\le x+y<b} f(x)g(y)\,dx\,dy=\int_a^b\int_{-\infty}^{\infty} f(z-y)g(y)\,dy\,dz$$

et on trouve la fonction de densité pour $X+Y$. Un calcul direct donne

$$E(X+Y)=\int_{-\infty}^{\infty} z\int_{-\infty}^{\infty} f(z-y)g(y)\,dy\,dz=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(x+y)f(x)g(y)\,dy\,dx=E(X)+E(Y)$$

et, de façon similaire, on obtient

$$\begin{aligned}\mathit{Var}(X+Y)&=\int_{-\infty}^{\infty} z^2\int_{-\infty}^{\infty} f(z-y)g(y)\,dy\,dz-\mu_{X+Y}^2\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(x+y)^2 f(x)g(y)\,dy\,dx-(\mu_X+\mu_Y)^2=\mathit{Var}(X)+\mathit{Var}(Y).\end{aligned}$$ □

Remarque. Si X et Y sont deux variables aléatoires indépendantes qui obéissent à la loi normale, les variables aléatoires $\alpha X+\beta$ et $X+Y$ obéissent aussi à cette loi (exercice 13).

Revenons maintenant au problème (8.2). Pour pouvoir estimer l'erreur du résultat numérique x, faisons les hypothèses suivantes :

H1: La valeur b_i est la réalisation d'une épreuve pour une variable aléatoire B_i. On suppose que les B_i soient indépendantes et qu'elles obéissent à la loi de Gauss–Laplace avec β_i comme espérance et σ_i^2 comme variance (les β_i sont inconnus, mais les σ_i^2 sont supposés connus).

H2: Le système surdéterminé (8.2) possède une solution unique si l'on remplace les b_i par les nombres β_i, c.-à-d. qu'il existe un vecteur $\xi\in\mathbb{R}^n$ tel que $A\xi=\beta$ où $\beta=(\beta_1,\ldots,\beta_m)^T$.

Motivation de la méthode des moindres carrés. Par l'hypothèse H1, la probabilité que B_i soit dans l'intervalle $[b_i,b_i+db_i)$ avec db_i (infinitésimalement) petit est

$$P(b_i\le B_i<b_i+db_i)\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma_i}\cdot\exp\Big(-\frac12\Big(\frac{b_i-\beta_i}{\sigma_i}\Big)^2\Big)\cdot db_i.$$

Comme les B_i sont indépendants, la formule (8.7) implique que

$$P(b_i\le B_i<b_i+db_i,\ i=1,\ldots,m)\approx\prod_{i=1}^m\frac{1}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma_i}\cdot\exp\Big(-\frac12\Big(\frac{b_i-\beta_i}{\sigma_i}\Big)^2\Big)\cdot db_i \tag{8.11}$$

$$= C \cdot \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m \Big(\frac{b_i-\beta_i}{\sigma_i}\Big)^2\Big) = C \cdot \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m \Big(\frac{b_i-\sum_{j=1}^n a_{ij}\xi_j}{\sigma_i}\Big)^2\Big).$$

Selon une idée de Gauss (1812), la "meilleure" réponse x_i pour les ξ_i (inconnus) est celle pour laquelle la probabilité (8.11) est maximale ("maximum likelihood"). Alors, on calcule $x_1, \ldots, x_n$ de façon à ce que

$$\sum_{i=1}^m \Big(\frac{b_i}{\sigma_i} - \sum_{j=1}^n \frac{a_{ij}}{\sigma_i}\cdot x_j\Big)^2 \to \min. \tag{8.12}$$

Si l'on remplace b_i/σ_i par b_i et a_{ij}/σ_i par a_{ij}, la condition (8.12) est équivalente à (6.2). Par la suite, nous supposerons que cette normalisation soit déjà effectuée (donc, $\sigma_i = 1$ pour $i = 1, \ldots, n$).

Estimation de l'erreur. La solution de (8.12) est donnée par $x = (A^TA)^{-1}A^Tb$. La solution théorique satisfait $\xi = (A^TA)^{-1}A^T\beta$. Alors,

$$x - \xi = (A^TA)^{-1}A^T(b-\beta) \qquad \text{ou} \qquad x_i - \xi_i = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}(b_j - \beta_j)$$

où α_{ij} est l'élément (i,j) de la matrice $(A^TA)^{-1}A^T$. L'idée est de considérer la valeur x_i comme la réalisation d'une variable aléatoire X_i définie par

$$X_i = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}B_j \qquad \text{ou} \qquad X_i - \xi_i = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}(B_j - \beta_j). \tag{8.13}$$

Théorème 8.3 *Soient $B_1, \ldots, B_m$ des variables aléatoires indépendantes avec β_i comme espérance et $\sigma_i = 1$ comme variance. Alors, la variable aléatoire X_i, définie par (8.13), satisfait*

$$E(X_i) = \xi_i \qquad \textit{et} \qquad \textit{Var}\,(X_i) = \epsilon_{ii} \tag{8.14}$$

où ϵ_{ii} est le $i^{ème}$ élément de la diagonale de $(A^TA)^{-1}$.

Remarque. Les autres éléments de $(A^TA)^{-1}$ sont les covariances de X_i et X_j.

Démonstration. La formule (8.9) donne $E(X_i) = \xi_i$. Pour calculer la variance de X_i, nous utilisons le fait que *Var* $(B_i) = 1$ et la formule (8.10). Ceci donne avec $e_i = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^T$ que

$$\sigma_{X_i}^2 = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij}^2 = \|e_i^T(A^TA)^{-1}A^T\|_2^2 = e_i^T(A^TA)^{-1}A^TA(A^TA)^{-1}e_i = e_i^T(A^TA)^{-1}e_i = \epsilon_{ii}. \qquad \square$$

Exemple 8.4 Pour l'expérience sur la thermo-électricité (voir le paragraphe IV.6), on a supposé que les mesures b_i ont été faites avec une précision correspondant à $\sigma_i = 0.01$. Pour le système surdéterminé (on écrit x_1, x_2, x_3 pour a, b, c et b_i pour U_i)

$$\frac{1}{\sigma_i}\cdot x_1 + \frac{T_i}{\sigma_i}\cdot x_2 + \frac{T_i^2}{\sigma_i}\cdot x_3 = \frac{b_i}{\sigma_i}, \qquad i = 1, \ldots, 21$$

la matrice $(A^TA)^{-1}$ devient

$$(A^TA)^{-1} = \begin{pmatrix} 0.356\cdot 10^{-4} & -0.139\cdot 10^{-5} & 0.113\cdot 10^{-7} \\ -0.139\cdot 10^{-5} & 0.765\cdot 10^{-7} & -0.713\cdot 10^{-9} \\ 0.113\cdot 10^{-7} & -0.713\cdot 10^{-9} & 0.713\cdot 10^{-11} \end{pmatrix} \tag{8.15}$$

et on obtient

$$\sigma_{X_1} = 0.60 \cdot 10^{-2}, \qquad \sigma_{X_2} = 0.28 \cdot 10^{-3}, \qquad \sigma_{X_3} = 0.27 \cdot 10^{-5}.$$

Ceci implique qu'avec une probabilité de 95%, la solution exacte (si elle existe) satisfait

$$a = -0.886 \pm 0.012, \qquad b = 0.0352 \pm 0.0006, \qquad c = 0.598 \cdot 10^{-4} \pm 0.054 \cdot 10^{-4}.$$

Test de confiance du modèle. Etudions encore si les données (t_i, b_i) sont compatibles avec la loi (8.1). Ceci revient à justifier l'hypothèse H2.

En utilisant la décomposition QR de la matrice A, le problème surdéterminé $Ax = b$ se transforme en (voir (7.1))

$$\begin{pmatrix} R' \\ 0 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} c' \\ c'' \end{pmatrix} \qquad \text{où} \qquad \begin{pmatrix} c' \\ c'' \end{pmatrix} = Q^T b. \tag{8.16}$$

La grandeur de $\|c''\|_2^2$ est une mesure de la qualité du résultat numérique. Théoriquement, si l'on a β à la place de b et ξ à la place de x, cette valeur est nulle.

Notons les éléments de la matrice Q par q_{ij}. Alors, les éléments du vecteur $c = Q^T b$ sont donnés par $c_i = \sum_{j=1}^m q_{ji} b_j$ et ceux du vecteur c'' satisfont aussi $c_i = \sum_{j=1}^m q_{ji}(b_j - \beta_j)$. Il est alors naturel de considérer les variables aléatoires

$$C_i = \sum_{j=1}^m q_{ji}(B_j - \beta_j), \qquad i = n+1, \ldots, m. \tag{8.17}$$

Le but est d'étudier la fonction de densité de $\sum_{i=n+1}^m C_i^2$.

Lemme 8.5 *Soient $B_1, \ldots, B_m$ des variables aléatoires indépendantes satisfaisant la loi normale $N(\beta_i, 1)$. Alors, les variables aléatoires $C_{n+1}, \ldots, C_m$, définies par (8.17), sont indépendantes et satisfont aussi la loi normale avec*

$$E(C_i) = 0, \qquad \mathit{Var}\,(C_i) = 1. \tag{8.18}$$

Démonstration. Pour voir que les C_i sont indépendants, calculons la probabilité $P(a_i \le C_i < b_i, i = n+1, \ldots, m)$. Notons par S l'ensemble $S = \{y \in I\!R^m \mid a_i \le y_i < b_i,\ i = n+1, \ldots, m\}$ et par C et B les vecteurs $(C_1, \ldots, C_m)^T$ et $(B_1, \ldots, B_m)^T$. Alors, on a

$$\begin{aligned} P(a_i \le & C_i < b_i, i = n+1, \ldots, m) = P(C \in S) = P(Q^T(B - \beta) \in S) \\ &= P(B - \beta \in Q(S)) \overset{(a)}{=} \iint_{Q(S)} \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^m} \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m y_i^2\Big)\, dy_1 \ldots dy_m \\ &\overset{(b)}{=} \iint_S \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^m} \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^m z_i^2\Big)\, dz_1 \ldots dz_m = \prod_{i=n+1}^m \int_{a_i}^{b_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\Big(-\frac{z_i^2}{2}\Big)\, dz_i. \end{aligned} \tag{8.19}$$

L'identité (a) est une conséquence de l'indépendance des B_i et (b) découle de la transformation $y = Qz$, car $\det Q = 1$ et $\sum_i y_i^2 = \sum_i z_i^2$ (la matrice Q est orthogonale). En utilisant $S_i = \{y \in I\!R^m \mid a_i \le y_i < b_i\}$, on déduit de la même manière que

$$P(a_i \le C_i < b_i) = P(C \in S_i) = \ldots = \int_{a_i}^{b_i} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\Big(-\frac{z_i^2}{2}\Big)\, dz_i. \tag{8.20}$$

Une comparaison de (8.19) avec (8.20) démontre l'indépendance de $C_{n+1}, \ldots, C_m$ (voir la définition (8.7)).

Le fait que les C_i satisfont la loi normale $N(0, 1)$ est une conséquence de (8.20). $\square$

Théorème 8.6 (Pearson) *Soient $Y_1, \ldots, Y_n$ des variables aléatoires indépendantes qui obéissent à la loi normale $N(0,1)$. Alors, la fonction de densité de la variable aléatoire*

$$Y_1^2 + Y_2^2 + \ldots + Y_n^2 \tag{8.21}$$

est donnée par (voir fig. IV.4)

$$f_n(x) = \frac{1}{2^{n/2} \cdot \Gamma(n/2)} \cdot x^{n/2-1} \cdot e^{-x/2} \tag{8.22}$$

pour $x > 0$ et par $f_n(x) = 0$ pour $x \leq 0$ ("loi de χ^2 à n degrés de liberté"). L'espérance de cette variable aléatoire vaut n et sa variance $2n$.

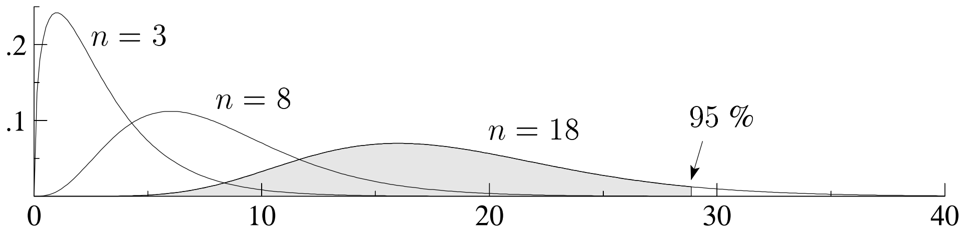


FIG. IV.4 – *Fonction de densité (8.22)*

Démonstration. Considérons d'abord le cas $n = 1$. Pour $0 \leq a < b$, on a

$$\begin{aligned} P(a \leq Y_1^2 < b) &= P(\sqrt{a} \leq Y_1 < \sqrt{b}) + P(-\sqrt{a} \geq Y_1 > -\sqrt{b}) \\ &= 2 \int_{\sqrt{a}}^{\sqrt{b}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-x^2/2} \, dx = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot e^{-t/2} \cdot \frac{dt}{\sqrt{t}}, \end{aligned}$$

ce qui démontre (8.22) pour $n = 1$ car $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Pour le cas général, nous procédons par récurrence. Nous utilisons le résultat du Lemme 8.2 qui affirme que la fonction de densité de $Y_1^2 + \ldots + Y_{n+1}^2$ est la convolution de celle de $Y_1^2 + \ldots + Y_n^2$ avec celle de Y_{n+1}^2. Le calcul

$$\begin{aligned} (f_n * f_1)(x) &= \frac{1}{\sqrt{2} \cdot \Gamma(1/2) \cdot 2^{n/2} \cdot \Gamma(n/2)} \int_0^x (x-t)^{-1/2} e^{-(x-t)/2} t^{n/2-1} e^{-t/2} \, dt \\ &= \frac{e^{-x/2}}{\sqrt{2} \cdot \Gamma(1/2) \cdot 2^{n/2} \cdot \Gamma(n/2)} \int_0^x (x-t)^{-1/2} t^{n/2-1} \, dt \\ &= \frac{x^{(n+1)/2-1} e^{-x/2}}{\sqrt{2} \cdot \Gamma(1/2) \cdot 2^{n/2} \cdot \Gamma(n/2)} \int_0^1 (1-s)^{1/2} s^{n/2-1} ds \;=\; f_{n+1}(x) \end{aligned}$$

nous permet de conclure. □

Pour les variables aléatoires C_i de (8.17), ce théorème montre que

$$\sum_{i=n+1}^{m} C_i^2 \tag{8.23}$$

est une variable aléatoire ayant comme fonction de densité $f_{m-n}(x)$ (on rappelle qu'après normalisation, on a $\sigma_i = 1$ pour les variables aléatoires B_i).

Appliquons ce résultat à l'exemple du paragraphe IV.6 (voir la formulation (8.12)). Dans ce cas, on a $\|c''\|_2^2 = 25.2$ et $m - n = 18$ degrés de liberté. La fig. IV.4 montre que cette valeur de $\|c''\|_2^2$ est suffisamment petite pour être probable.

Si l'on avait travaillé avec le modèle plus simple

$$U = a + bT \tag{8.24}$$

(à la place de (6.4)) on aurait trouvé $\|c''\|_2^2 = 526.3$ et $m - n = 19$. Cette valeur est trop grande pour être probable. La conclusion est que, pour les données du tableau IV.2, la loi (6.4) est plus probable que la loi (8.24).

IV.9 Exercices

1. Pour calculer l'inverse d'une matrice dont la dimension n est très grande, il existe un algorithme qui exige environ n^3 opérations. Donner cet algorithme.

2. Supposons que la décomposition LR de la matrice A est à disposition. Pour u, v, b des vecteurs donnés, trouver un algorithme efficace pour résoudre le système

$$(A + uv^T)x = b$$

   qui utilise uniquement la résolution des systèmes $A^{-1}b$ et $A^{-1}u$. Cet algorithme est connu sous la formule de Sherman - Morrison - Woodbury.
   Indication. Calculer d'abord une formule pour $v^T x$.

3. Considérons le problème de calculer le produit scalaire

$$\langle x, y\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \, .$$

   Quelle est sa condition?

4. Soit A une matrice $n \times m$ à coefficients réels. Montrer que

$$\|A\|_1 = \|A^T\|_\infty \qquad \text{et} \qquad \|A\|_2 = \|A^T\|_2 \, .$$

5. Considérons une matrice-bande avec une largeur inférieure p_ℓ et une largeur supérieure p_u (c'est-à-dire, $a_{ij} = 0$ si $i - j > p_\ell$ et si $j - i > p_u$). Montrer que les matrices L et R de la décomposition LR avec et sans la recherche de pivot ont aussi une structure de bande. Pour le cas tridiagonal, $p_\ell = p_u = 1$, donner les largeurs des bandes apparaissants dans les décompositions et estimer le coût en opérations des algorithmes.

6. Pour résoudre le système linéaire

$$\sum_{j=1}^{n} c_j^{i-1} x_j = b_i, \qquad i = 1, \ldots, n \tag{9.1}$$

   (matrice du type Vandermonde), dériver un algorithme qui nécessite seulement $\mathcal{O}(n^2)$ opérations.

   Indications.

   (a) Le système (9.1) est équivalent à

$$\sum_{j=1}^{n} p(c_j) x_j = b(p) \qquad \text{pour} \quad \deg p \leq n - 1,$$

   où $b(p) = \sum_{j=1}^{n} d_j b_j$ et $p(i) = \sum_{j=1}^{n} d_j i^{j-1}$.

(b) Choisir pout $p(t)$ les éléments de la base $1, t-c_1, (t-c_1)(t-c_2), (t-c_1)(t-c_2)(t-c_3), \ldots$

7. Soit

$$A = \begin{pmatrix} 2\left(\frac{1}{h_0}+\frac{1}{h_1}\right) & \frac{1}{h_1} & & & \\ \frac{1}{h_1} & 2\left(\frac{1}{h_1}+\frac{1}{h_2}\right) & \frac{1}{h_2} & & \\ & \frac{1}{h_2} & 2\left(\frac{1}{h_2}+\frac{1}{h_3}\right) & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \frac{1}{h_{n-2}} \\ & & & \frac{1}{h_{n-2}} & 2\left(\frac{1}{h_{n-2}}+\frac{1}{h_{n-1}}\right) \end{pmatrix}$$

la matrice qui apparaît dans l'interpolation avec des splines (voir le paragraphe II.7).

Montrer que sa condition $\kappa_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$ peut devenir arbitrairement grande si $\max h_i / \min h_i \to \infty$. Par contre, on a $\kappa_c(A) \le 3$ où $\kappa_c(A) = \|\,|A| \cdot |A^{-1}|\,\|$.

Indication. Utiliser les propriétés (4.15) et (4.14).

8. (a) Pour la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 4 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

calculer $\|A\|_1$, $\|A\|_2$ et $\|A\|_\infty$.

(b) Démontrer que pour des matrices symétriques nous avons toujours $\|A\|_2 \le \|A\|_1$.

9. Les valeurs de la suite $b_k = \exp(k^{2/3} - (k-1)^{2/3})$ peuvent être calculées par les formules:

$$\begin{aligned} b_k &= \exp(k^{2/3} - (k-1)^{2/3}), \\ b_k &= \exp(k^{2/3}) / \exp((k-1)^{2/3})), \\ b_k &= \exp((2k-1)/(k^{4/3} + (k(k-1))^{2/3} + (k-1)^{4/3})). \end{aligned}$$

Calculer à l'aide d'une calculatrice la valeur pour $k = 100000$ (le résultat est $b_{100000} = 1.01446656424210809769528199600$) et pour k grand, quelle formule est préférable pour un calcul en virgule flottante?

10. Les racines du polynôme $x^2 - 2px - q = 0$ peuvent être calculées par

$$\lambda_1 = p + \sqrt{p^2+q}, \qquad \lambda_2 = p - \sqrt{p^2+q}.$$

Montrer que pour $p > 0$ (grand) et $q > 0$ (très petit) cet algorithme est numériquement instable. A l'aide de la relation $\lambda_1\lambda_2 = -q$, trouver un algorithme qui est numériquement stable.

11. Soient donnés $x_1, x_2, \ldots, x_n$. Une estimation de la variance peut être calculée par chacune des deux formules suivantes:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-1}\Big(\sum_{i=1}^n x_i^2 - n\mu^2\Big) \qquad\qquad \sigma^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^n \Big(x_i - \mu\Big)^2$$

où $\mu = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i$ est l'espérance. Quelle formule est la plus stable?

a) Appliquer les deux algorithmes à l'exemple $n = 2$, $x_1 = 3001$, $x_2 = 3003$ et simuler un calcul en virgule flottante avec 4 chiffres.

b) Etudier l'influence des erreurs d'arrondi pour les deux algorithmes, si $n = 2$ mais que x_1 et x_2 sont arbitraires.

12. a) Calculer la décomposition de Cholesky $A = LL^T$ pour la matrice de Hilbert

$$A = \left(\frac{1}{i+j-1}\right)_{i,j=1,\ldots,n}, \qquad n = 3, 6, 9, 12, 15.$$

b) Comparer le résultat numérique avec les valeurs exactes

$$\ell_{jk} = \frac{\sqrt{2k-1}\cdot(j-1)!\cdot(j-1)!}{(j-k)!\cdot(j+k-1)!}\,. \tag{9.2}$$

Combien de chiffres sont exacts?

c) Si $\widehat{L}$ dénote le résultat numérique, calculer le résidu $A - \widehat{L}\widehat{L}^T$.

Calculer aussi le résidu $A - LL^T$ pour la matrice L, donnée par (9.2).

13. Pour une matrice $A = (a_{ij})$ notons par $(a_{ij}^{(k)})$ les matrices des étapes intermédiaires de l'élimination de Gauss. Montrer qu'avec une recherche de pivot partielle, on a

$$\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}| \le 2^{n-1}\cdot \max_{i,j} |a_{ij}|. \tag{9.3}$$

Pour la matrice suivante, on a égalité dans la formule (9.3):

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & & & & 1 \\ -1 & 1 & & & & 1 \\ -1 & -1 & 1 & & & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \ldots & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

14. Soit A une matrice à m lignes et n colonnes ($m \ge n$). On définit pour les matrices non-carrées,

$$\kappa(A) := \max_{||x||=1} ||Ax|| \,/ \min_{||y||=1} ||Ay||.$$

Pour la norme Euclidienne, montrer que $\kappa_2(A^TA) = (\kappa_2(A))^2$.
Indication. Transformer la matrice symétrique A^TA sous forme diagonale $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \ldots \ge \lambda_n \ge 0$ et montrer que

$$\max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2^2 = \lambda_1, \qquad \min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2^2 = \lambda_n.$$

15. Voici quelques valeurs pour la densité ϱ de l'eau en fonction de sa température T.

T [°C]	0	5	10	15	20
$\varrho(T)$	0.999868	0.999992	0.999728	0.999126	0.998232

(a) Approcher ces valeurs par un polynôme de degré 2 (méthode des moindres carrés).

(b) Pour quelle valeur de T, la densité est-elle maximale et quelle est cette valeur maximale?

Indication. Si vous préférez calculer avec des nombres plus petits, faites la transformation $x = T/5$, $f(T) = 1 - \varrho(T)$.

16. Soit A une matrice inversible de dimension n. Montrer que la décomposition QR (où Q est orthogonale et R triangulaire supérieure) est unique, si l'on suppose que $r_{ii} > 0$ pour $i = 1, \ldots, n$.

17. Soient X et Y deux variables aléatoires indépendantes obéissant à la loi normale $N(\mu_1, \sigma_1)$ et $N(\mu_2, \sigma_2)$ respectivement. Montrer que $\alpha X + \beta$ (pour $\alpha > 0$) et $X + Y$ obéissent aussi à cette loi.

18. Soit X une variable aléatoire qui obéit à la loi χ^2 avec n degrés de liberté (c.-à-d., $f_n(x)$ de (8.22) est sa fonction de densité). Montrer que

$$E\,(X) = n \qquad \text{et} \qquad \mathit{Var}\,(X) = 2n.$$

19. Effectuer une étude complète de l'erreur du modèle trouvé à l'exercice 60. Pour cela, trouver les écarts types des coefficients du polynôme et effectuer un test de confiance du modèle.
Indication. $\|c''\|^2 = \|Ax - b\|^2$.

20. Les éléments de la diagonale de $C = (A^T A)^{-1}$ jouent un rôle important pour l'étude de l'erreur de la méthode des moindres carrés. Supposons que nous avons à disposition la décomposition QR de la matrice A.

    (a) Démontrer que $C = (R^T R)^{-1}$.

    (b) Trouver un algorithme pour calculer la diagonale de C en $n^3/6$ opérations (n = nombre de colonnes de A; 1 opération = 1 multiplication + 1 addition).

Chapitre V

Valeurs et Vecteurs Propres

Soit A une matrice carrée de dimension n dont les éléments sont soit dans $\mathbb{R}$, soit dans $\mathbb{C}$. Le problème consiste à calculer $\lambda \in \mathbb{C}$ et $v \in \mathbb{C}^n$, $v \neq 0$, tels que

$$Av = \lambda v. \tag{0.1}$$

Si cette équation est vérifiée, λ s'appelle *valeur propre* de la matrice A et v est le *vecteur propre* correspondant. L'équation (0.1) est équivalente au système $(A - \lambda I)v = 0$ qui possède une solution non nulle si et seulement si

$$\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0. \tag{0.2}$$

Le polynôme $\chi_A(\lambda)$ est le *polynôme caractéristique* de la matrice A. Les valeurs propres de A sont alors les zéros du polynôme caractéristique.

Bibliographie sur ce chapitre

Tous les livres cités dans le chapitre IV, et en plus ...

B.N. Parlett (1980): *The Symmetric Eigenvalue Problem*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.

B.T. Smith, J.M. Boyle, Y. Ikebe, V.C. Klema & C.B. Moler (1970): *Matrix Eigensystem Routines:* EISPACK *Guide*. 2nd ed., Springer-Verlag, New York.

J.H. Wilkinson (1965): *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Clarendon Press. [MA 65/72]

J.H. Wilkinson & C. Reinsch (1971): *Handbook for Automatic Computation, Volume II, Linear Algebra*. Springer-Verlag, New York.

V.1 La condition du calcul des valeurs propres

A cause des erreurs d'arrondi, les éléments d'une matrice A, pour laquelle on cherche les valeurs propres, ne sont pas exacts. Ils sont plutôt égaux à $\widehat{a}_{ij} = a_{ij}(1 + \epsilon_{ij})$ avec $|\epsilon_{ij}| \leq \mathit{eps}$ (*eps*, la précision de l'ordinateur, est supposée être très petite). Il est alors très important d'étudier l'influence de ces perturbations sur les valeurs propres et sur les vecteurs propres de la matrice. Pour montrer ceci, considérons la famille de matrices

$$A(\epsilon) = A + \epsilon C \qquad \text{où} \qquad |\epsilon| \leq \mathit{eps} \quad \text{et} \quad |c_{ij}| \leq |a_{ij}| \tag{1.1}$$

(éventuellement, la dernière hypothèse va être remplacée par $\|C\| \leq \|A\|$).

Dans le premier théorème nous allons montrer que les valeurs propres $\lambda(\epsilon)$ de $A(\epsilon)$ dépendent continûment de ϵ. Puis, nous verrons que $\lambda(\epsilon)$ est même différentiable et analytique si $\lambda(0)$ est une valeur propre simple de A. Une situation moins favorable survient lorsque les valeurs propres sont multiples.

Théorème 1.1 (continuité des valeurs propres) *Soit*

$$\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = (-1)^n \prod_{i=1}^{k} (\lambda - \lambda_i)^{m_i} \tag{1.2}$$

le polynôme caractéristique de A et choisissons un $\rho > 0$ afin que les disques

$$D_i = \{\lambda \in \mathbb{C}\,;\ |\lambda - \lambda_i| \leq \rho\}$$

soient disjoints. Alors, pour $|\epsilon|$ suffisamment petit et pour $i = 1, \ldots, k$ exactement m_i valeurs propres de $A(\epsilon) = A + \epsilon C$ (comptées avec leur multiplicité) se trouvent dans le disque D_i.

Démonstration. L'idée est d'utiliser le théorème de Rouché (voir Analyse II) : si les fonctions $f(\lambda)$ et $g(\lambda)$ sont analytiques à l'intérieur du disque $D = \{\lambda\,;\ |\lambda - a| \leq \rho\}$, continues au bord ∂D et si elles satisfont $|f(\lambda) - g(\lambda)| < |f(\lambda)|$ sur ∂D, alors les deux fonctions $f(\lambda)$ et $g(\lambda)$ possèdent le même nombre de zéros à l'intérieur de D.

Posons $f(\lambda) = \chi_A(\lambda)$ et $g(\lambda) = \chi_{A+\epsilon C}(\lambda)$. On voit de (1.2) que $|\chi_A(\lambda)| \geq C_1 > 0$ pour $\lambda \in \partial D_i$. La différence $\chi_{A+\epsilon C}(\lambda) - \chi_A(\lambda)$ contient le facteur ϵ et peut être écrite sous la forme $\chi_{A+\epsilon C}(\lambda) - \chi_A(\lambda) = \epsilon \cdot h(\lambda, \epsilon)$. Sur l'ensemble compact $\partial D_i \times [-1, 1]$, le polynôme h est borné, disons par $C_2 > 0$. En conséquence, pour $|\epsilon| < \min(C_1/C_2, 1)$, on a

$$|\chi_{A+\epsilon C}(\lambda) - \chi_A(\lambda)| \leq |\epsilon| \cdot C_2 < C_1 \leq |\chi_A(\lambda)| \qquad \text{pour} \qquad \lambda \in \partial D_i$$

et le théorème de Rouché implique que $\chi_{A+\epsilon C}(\lambda)$ et $\chi_A(\lambda)$ possèdent le même nombre de zéros dans D_i. □

Théorème 1.2 (différentiabilité des valeurs propres) *Soit λ_1 une racine simple de $\chi_A(\lambda) = 0$. Alors, pour $|\epsilon|$ suffisamment petit, la matrice $A(\epsilon) = A + \epsilon C$ possède une valeur propre unique $\lambda_1(\epsilon)$ proche de λ_1. La fonction $\lambda_1(\epsilon)$ est analytique et on a*

$$\lambda_1(\epsilon) = \lambda_1 + \epsilon \cdot \frac{u_1^* C v_1}{u_1^* v_1} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \tag{1.3}$$

où v_1 est le vecteur propre à droite ($Av_1 = \lambda_1 v_1$) et u_1 est le vecteur propre à gauche ($u_1^* A = \lambda_1 u_1^*$).

Démonstration. Soit $p(\lambda, \epsilon) := \chi_{A+\epsilon C}(\lambda) = \det(A + \epsilon C - \lambda I)$. Comme

$$p(\lambda_1, 0) = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial p}{\partial \lambda}(\lambda_1, 0) \neq 0,$$

le théorème des fonctions implicites garantie l'existence d'une fonction différentiable $\lambda_1(\epsilon)$ (même analytique), tel que $\lambda_1(0) = \lambda_1$ et $p(\lambda_1(\epsilon), \epsilon) = 0$. Il existe donc un vecteur $v_1(\epsilon) \neq 0$ tel que

$$\Big(A(\epsilon) - \lambda_1(\epsilon) I\Big) v_1(\epsilon) = 0. \tag{1.4}$$

La matrice dans (1.4) étant de rang $n - 1$, on peut fixer une composante à 1 et appliquer la règle de Cramer. Ceci montre que les autres composantes sont des fonctions rationnelles des éléments de la matrice $A + \epsilon C - \lambda_1(\epsilon)I$ et donc différentiables. Après la normalisation à $v_1(\lambda)^T v_1(\lambda) = 1$, la fonction $v_1(\lambda)$ reste différentiable.

Pour calculer $\lambda_1'(0)$, nous pouvons dériver l'équation (1.4) par rapport à ϵ et poser ensuite $\epsilon = 0$. Ceci donne

$$(A - \lambda_1 I)v_1'(0) + (C - \lambda_1'(0)I)v_1 = 0. \tag{1.5}$$

En multipliant cette relation par u_1^*, on obtient $u_1^*(C - \lambda_1'(0)I)v_1 = 0$, ce qui démontre la formule (1.3). □

Conséquences. Si A est une matrice *normale* (c.-à-d., $A^*A = AA^*$ ou, de façon équivalente, s'il existe une matrice unitaire V telle que $V^*AV = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$), on a $u_1 = v_1$ et la formule (1.3) donne (en négligeant le terme $\mathcal{O}(\epsilon^2)$)

$$|\lambda_1(\epsilon) - \lambda_1| \le \epsilon \cdot \|C\| \tag{1.6}$$

car $|v_1^* C v_1| \le \|v_1\| \cdot \|C\| \cdot \|v_1\|$. Ceci signifie que le calcul d'une valeur propre simple d'une matrice normale (p. ex., symétrique ou anti-symétrique) est très bien conditionné.

Si la matrice n'est pas normale, le calcul de λ_1 (valeur propre simple) peut être mal conditionné. Considérons par exemple la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \qquad \text{où} \qquad v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad u_1 = \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\alpha \end{pmatrix}$$

dont les valeurs propres sont toutes simples. Dans cette situation, la formule (1.3) nous donne $\lambda_1(\epsilon) - \lambda_1 = \epsilon \cdot (c_{11} - \alpha c_{21}) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ et le calcul de $\lambda_1 = 1$ est mal conditionné si α est grand.

Exemple 1.3 Considérons la matrice (boîte de Jordan)

$$A = \left.\begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & & \\ & \lambda_1 & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_1 \end{pmatrix}\right\} n \tag{1.7}$$

Le polynôme caractéristique de $A + \epsilon C$ satisfait

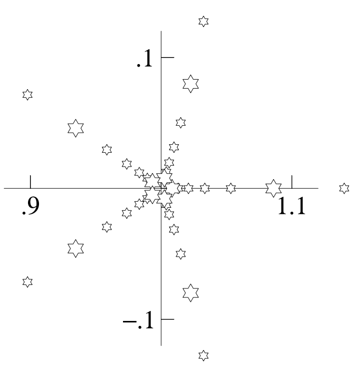
$$\det(A + \epsilon C - \lambda I) = (\lambda_1 - \lambda)^n - (-1)^n \cdot \epsilon \cdot c_{n1} + \mathcal{O}(\epsilon^2) + \mathcal{O}(\epsilon \cdot |\lambda_1 - \lambda|).$$

Si $c_{n1} \neq 0$, les termes $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ et $\mathcal{O}(\epsilon \cdot |\lambda_1 - \lambda|)$ sont négligeables par rapport à $\epsilon \cdot c_{n1}$. Les valeurs propres de $A + \epsilon C$ sont alors approximativement données par les racines de

$$(\lambda_1 - \lambda)^n - (-1)^n \cdot \epsilon \cdot c_{n1} = 0, \qquad \text{c.-à-d.} \qquad \lambda \approx \lambda_1 + (\epsilon \cdot c_{n1})^{1/n} \tag{1.8}$$

(observer que $(\epsilon \cdot c_{n1})^{1/n}$ donne n valeurs complexes distinctes – multiples des racines de l'unité).

Expérience numérique. Prenons la matrice (1.7) avec $\lambda_1 = 1$ et $n = 5$. Les éléments de la matrice C sont des nombres aléatoires dans l'intervalle $[-1, 1]$. Le dessin ci-contre montre les 5 valeurs propres de $A + \epsilon C$ pour $\epsilon = 10^{-4}, 10^{-5}, \ldots, 10^{-10}$. L'erreur est $\approx 10^{-1}$ pour $\epsilon = 10^{-5}$ et $\approx 10^{-2}$ pour $\epsilon = 10^{-10}$, ce qui correspond à la formule (1.8) pour $n = 5$.



Conséquence. Si la dimension n d'une boîte de Jordan est plus grande que 1, le calcul de la valeur propre de cette matrice est *très mal conditionné*.

En pratique, on est souvent confronté à des *matrices symétriques* A à coefficients réels. Dans cette situation, il est raisonnable de supposer que C soit aussi symétrique (on utilise seulement a_{ij} avec $i \geq j$; c.-à-d., on fait les mêmes erreurs dans a_{ij} et dans a_{ji}). Le théorème suivant montre que la formule (1.3) reste vraie même si les valeurs propres ne sont pas simples. Donc, le calcul des valeurs propres d'une matrice symétrique est toujours bien conditionné.

Théorème 1.4 (cas symétrique) *Soient A et C des matrices symétriques et notons par $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ (pas nécessairement distincts) les valeurs propres de A. Alors, les valeurs propres $\lambda_i(\epsilon)$ de $A+\epsilon C$ satisfont*

$$\lambda_i(\epsilon) = \lambda_i + \epsilon \cdot v_i^T C v_i + \mathcal{O}(\epsilon^2) \tag{1.9}$$

où $v_1, \ldots, v_n$ est une base orthonormale de $\mathbb{R}^n$ formée des vecteurs propres de A ($Av_i = \lambda_i v_i$, $v_i^T v_i = 1$, $v_i^T v_j = 0$ pour $i \neq j$).

Démonstration. Dans une première étape nous diagonalisons la matrice A de manière à ce que des valeurs propres identiques soient groupées ensembles. Nous choisissons donc une matrice orthogonale W telle que

$$W^T A W = \begin{pmatrix} \lambda_1 I & 0 \\ 0 & \Lambda \end{pmatrix}, \qquad W^T C W = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{21}^T \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

(Λ est diagonale et contient les valeurs propres différentes de λ_1; C_{11} et C_{22} sont symétriques).

Dans une deuxième étape, nous construisons une matrice $B(\epsilon)$ telle que

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ B(\epsilon) & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 I + \epsilon C_{11} & \epsilon C_{21}^T \\ \epsilon C_{21} & \Lambda + \epsilon C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -B(\epsilon) & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1(\epsilon) & \epsilon C_{21}^T \\ 0 & D_2(\epsilon) \end{pmatrix} \tag{1.11}$$

devienne triangulaire par blocs. Cette transformation ne change pas les valeurs propres. Pour arriver à ceci, la matrice $B = B(\epsilon)$ doit satisfaire

$$(\lambda_1 I - \Lambda)B + \epsilon B C_{11} + \epsilon C_{21} - \epsilon B C_{21}^T B - \epsilon C_{22} B = 0. \tag{1.12}$$

Comme $\lambda_1 I - \Lambda$ est inversible, le théorème des fonctions implicites implique que, pour ϵ suffisamment petit, l'équation (1.12) peut être résolue. On obtient alors

$$B(\epsilon) = \epsilon \cdot (\Lambda - \lambda_1 I)^{-1} C_{21} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \tag{1.13}$$

Avec cette formule, on peut calculer $D_1(\epsilon)$ de (1.11):

$$D_1(\epsilon) = \lambda_1 I + \epsilon \cdot C_{11} + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

La matrice C_{11} est symétrique et peut être diagonalisée à l'aide d'une matrice orthogonale U. Toutes ces transformations nous donnent

$$\begin{pmatrix} U^T & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ B(\epsilon) & I \end{pmatrix} W^T (A + \epsilon C) W \begin{pmatrix} I & 0 \\ -B(\epsilon) & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{D}_1(\epsilon) & \epsilon U^T C_{21}^T \\ 0 & D_2(\epsilon) \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

où

$$\widehat{D}_1(\epsilon) = \mathrm{diag}(\lambda_1 + \epsilon d_1, \ldots, \lambda_1 + \epsilon d_m) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

(m est la multiplicité de la valeur propre λ_1). L'application du théorème de Gershgorin (voir plus bas) à la matrice $\widehat{D}_1(\epsilon)$ démontre que les m valeurs propres de $A + \epsilon C$, qui sont proches de λ_1, satisfont $\lambda_i(\epsilon) = \lambda_1 + \epsilon d_i + \mathcal{O}(\epsilon^2)$.

Pour calculer d_i, nous comparons les coefficients de ϵ dans l'identité (1.14). Ceci donne pour $i = 1, \ldots, m$

$$d_i = v_i^T C v_i \qquad \text{où} \qquad (v_1, v_2, \ldots) = V := W \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}.$$

Les propriétés des v_i sont faciles à vérifier. □

Théorème 1.5 (Gershgorine) *Soit A une matrice $n \times n$ (avec des éléments dans $\mathbb{R}$ ou dans $\mathbb{C}$). Si λ est une valeur propre de A, alors il existe un indice i tel que*

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|, \tag{1.15}$$

c.-à-d. que toutes les valeurs propres de A se trouvent dans l'union des disques

$$D_i = \{\lambda \,;\; |\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|\,\}.$$

Démonstration. Soit $v \neq 0$ un vecteur propre et choisissons l'indice i tel que $|v_i| \geq |v_j|$ pour tout j. La ligne i de l'équation $Av = \lambda v$ donne

$$\sum_{j \neq i} a_{ij} v_j = (\lambda - a_{ii}) v_i.$$

En divisant par v_i et en utilisant l'inégalité de triangle, on obtient

$$|\lambda - a_{ii}| = \Big| \sum_{j \neq i} a_{ij} \cdot \frac{v_j}{v_i} \Big| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|.$$

□

Condition du calcul des vecteurs propres. Considérons la situation où toutes les valeurs propres de A sont distinctes. La démonstration du théorème sur la différentiabilité des valeurs propres montre (voir formule (1.4)) que les vecteurs propres normalisés $v_i(\epsilon)$ de $A + \epsilon C$ sont des fonctions analytiques de ϵ. Pour étudier la condition du calcul des vecteurs propres, nous exprimons $v_1'(0)$ dans la base des vecteurs propres (de droite)

$$v_1'(0) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i v_i. \tag{1.16}$$

La formule (1.5) donne alors

$$\sum_{j=2}^{n} (\lambda_j - \lambda_1) \alpha_j v_j + (C - \lambda_1'(0) I) v_1 = 0. \tag{1.17}$$

En multipliant (1.17) par le vecteur propre de gauche u_i^* (observer que $u_i^* v_j = 0$ pour $i \neq j$), on obtient α_i (pour $i \geq 2$) de la relation $(\lambda_i - \lambda_1)\alpha_i u_i^* v_i + u_i^* C v_1 = 0$. La normalisation $\|v_1(\epsilon)\|_2^2 = 1$ donne (en la dérivant) $v_1^* v_1'(0) = 0$ et on en déduit que $\alpha_1 = -\sum_{i=2}^{n} \alpha_i v_1^* v_i$. Si l'on insère les formules pour α_i dans (1.16), on obtient pour $v_1(\epsilon) = v_1 + \epsilon v_1'(0) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ la relation

$$v_1(\epsilon) = v_1 + \epsilon \sum_{i=2}^{n} \frac{u_i^* C v_1}{(\lambda_1 - \lambda_i) u_i^* v_i} (v_i - v_1 v_1^* v_i) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \tag{1.18}$$

De cette formule, on voit que la condition du calcul du vecteur propre v_1 dépend de la grandeur $u_i^* v_i$ (comme c'est le cas pour la valeur propre; voir la formule (1.3)) et aussi de la distance entre λ_1 et les autres valeurs propres de A.

Un algorithme dangereux. Une possibilité de calculer les valeurs propres d'une matrice A est la suivante: *calculer d'abord les coefficients du polynôme caractéristique* $\chi_A(\lambda)$ *et déterminer ensuite les zéros de ce polynôme*. Si la dimension de A est très petite (disons $n \leq 3$) ou si l'on fait le calcul en arithmétique exacte, cet algorithme peut être très utile. Par contre, si l'on fait le calcul en virgule flottante, cet algorithme est numériquement instable. Considérons, par exemple, le problème de calculer les valeurs propres de la matrice diagonale

$$A = \text{diag}(1, 2, 3, \ldots, n) \tag{1.19}$$

dont le polynôme caractéristique est

$$\begin{aligned} \chi_A(\lambda) &= (1-\lambda)(2-\lambda)(3-\lambda)\cdot\ldots\cdot(n-\lambda) \\ &= (-1)^n\lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + a_{n-2}\lambda^{n-2} + \ldots + a_1\lambda + a_0. \end{aligned} \tag{1.20}$$

Les coefficients calculés satisfont $\widehat{a}_i = a_i(1+\epsilon_i)$ avec $|\epsilon_i| \leq$ *eps*. Cette perturbation dans les coefficients provoque une grande erreur dans les zéros de (1.20). Les résultats numériques pour $n = 9, 11, 13, 15$ (avec *eps* $\approx 6 \cdot 10^{-8}$, simple précision) sont dessinés dans la Fig. V.1.

Conclusion. Eviter le calcul des coefficients du polynôme caractéristique.

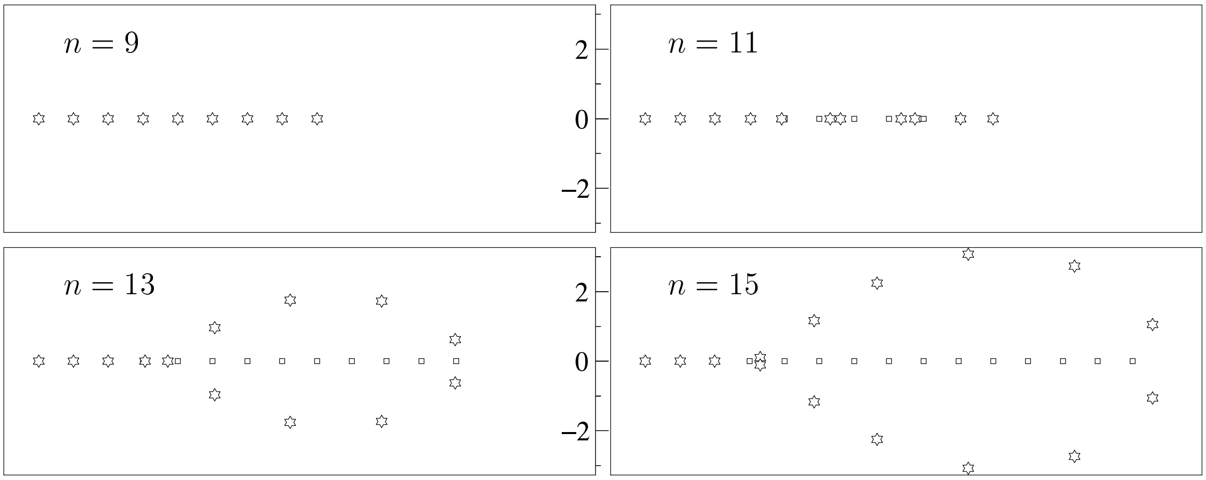


FIG. V.1 – *Zéros de (1.20) avec des coefficients perturbés*

V.2 La méthode de la puissance

Un algorithme simple pour calculer les valeurs propres d'une matrice A est basé sur l'itération

$$y_{k+1} = Ay_k \tag{2.1}$$

où y_0 est un vecteur arbitraire. Dans le théorème suivant, on démontre que $y_k = A^k y_0$ (méthode de la *puissance*) tend vers un vecteur propre de A et que le *quotient de Rayleigh* $y_k^* A y_k / y_k^* y_k$ est une approximation d'une valeur propre de A.

Théorème 2.1 *Soit A une matrice diagonalisable de valeurs propres $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ et de vecteurs propres $v_1, \ldots, v_n$ (normalisés par $\|v_i\|_2 = 1$). Si $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \ldots \geq |\lambda_n|$, les vecteurs y_k*

de l'itération (2.1) vérifient

$$y_k = \lambda_1^k(a_1 v_1 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k)) \tag{2.2}$$

(le nombre a_1 est défini par $y_0 = \sum_i a_i v_i$). Le quotient de Rayleigh satisfait (en supposant que $a_1 \neq 0$)

$$\frac{y_k^* A y_k}{y_k^* y_k} = \lambda_1 + \mathcal{O}\Big(\Big|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\Big|^k\Big). \tag{2.3}$$

Si A est une matrice normale (c.-à-d. que les vecteurs propres sont orthogonaux), l'erreur dans (2.3) est $\mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^{2k})$.

Démonstration. Exprimons le vecteur de départ y_0 dans la base des vecteur propres, c.-à-d., $y_0 = \sum_{i=1}^n a_i v_i$. Par récurrence, on voit que

$$y_k = A^k y_0 = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^k v_i = \lambda_1^k\Big(a_1 v_1 + \sum_{i=2}^n a_i\Big(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\Big)^k v_i\Big), \tag{2.4}$$

ce qui démontre la formule (2.2). De cette relation, on déduit que

$$y_k^* A y_k = y_k^* y_{k+1} = \sum_{i=1}^n |a_i|^2 |\lambda_i|^{2k}\lambda_i + \sum_{i\neq j} \overline{a}_i a_j \overline{\lambda}_i^k \lambda_j^{k+1} v_i^* v_j \tag{2.5}$$

$$y_k^* y_k = \sum_{i=1}^n |a_i|^2 |\lambda_i|^{2k} + \sum_{i\neq j} \overline{a}_i a_j \overline{\lambda}_i^k \lambda_j^{k} v_i^* v_j. \tag{2.6}$$

Si $a_1 \neq 0$, la formule (2.3) est une conséquence de

$$\frac{y_k^* A y_k}{y_k^* y_k} = \frac{|a_1|^2 \cdot |\lambda_1|^{2k} \cdot \lambda_1 \cdot (1 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k))}{|a_1|^2 \cdot |\lambda_1|^{2k} \cdot (1 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k))}. \tag{2.7}$$

Pour une matrice normale, le deuxième terme dans les formules (2.5) et (2.6) est absent et l'expression $\mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k)$ peut être remplacée par $\mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^{2k})$ dans (2.7) et dans (2.3). □

Exemple 2.2 Considérons la matrice $A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ dont la valeur propre la plus grande est $\lambda_1 = 2(1+\cos(\pi/4)) \approx 3.414213562373095$. Quelques itérations de la méthode de la puissance nous donnent

$$y_0 = (1,1,1)^T, \qquad y_1 = (3,4,3)^T, \qquad y_2 = (10,14,10)^T$$

et une première approximation de λ_1 est obtenue par

$$\frac{y_1^* A y_1}{y_1^* y_1} = \frac{y_1^* y_2}{y_1^* y_1} = \frac{116}{34} \approx 3.41176.$$

Remarques. Les éléments du vecteur y_k croissent exponentiellement avec k. Il est alors recommandé de normaliser y_k après chaque itération, c.-à-d. de remplacer y_k par $y_k/\|y_k\|$. Sinon, on risque un "overflow". Si $|\lambda_2/\lambda_1|$ est proche de 1, la convergence est très lente. Pour accélérer la convergence, on utilise la modification suivante.

Méthode de la puissance inverse de Wielandt. Supposons qu'on connaisse une approximation μ de la valeur propre cherchée λ_1 (il n'est pas nécessaire de supposer que λ_1 soit la plus grande valeur propre de A). L'idée est d'appliquer l'itération (2.1) à la matrice $(A - \mu I)^{-1}$. Les valeurs propres de cette matrice sont $(\lambda_i - \mu)^{-1}$. Si μ est proche de λ_1, on a

$$\frac{1}{|\lambda_1 - \mu|} \gg \frac{1}{|\lambda_i - \mu|} \qquad \text{pour} \qquad i \geq 2$$

et la convergence va être très rapide. L'itération devient alors $y_{k+1} = (A - \mu I)^{-1} y_k$ ou

$$(A - \mu I) y_{k+1} = y_k. \tag{2.8}$$

Après avoir calculé la décomposition LR de la matrice $A - \mu I$, une itération de (2.8) ne coûte pas plus cher qu'une de (2.1).

Exemple 2.3 Pour la matrice A de l'exemple précédent, choisissons $\mu = 3.41$ et $y_0 = (1, 1.4, 1)^T$. Deux itérations de (2.8) nous donnent

$$y_1 = \begin{pmatrix} 236.134453781513 \\ 333.949579831933 \\ 236.134453781513 \end{pmatrix}, \qquad y_2 = \begin{pmatrix} 56041.9461902408 \\ 79255.2785820210 \\ 56041.9461902408 \end{pmatrix}$$

et on obtient

$$\frac{1}{\lambda_1 - 3.41} \approx \frac{y_1^*(A - \mu I)^{-1} y_1}{y_1^* y_1} = \frac{y_1^* y_2}{y_1^* y_1} \approx 237.328870774159.$$

De cette relation, on calcule λ_1 et on obtient l'approximation 3.41421356237333. Les 13 premiers chiffres sont corrects.

La méthode de la puissance (et celle de Wielandt) est importante pour la compréhension d'autres algorithmes. Si l'on veut calculer toutes les valeurs propres d'une matrice, on utilise des méthodes encore plus sophistiquées. En pratique, on procède de la manière suivante:

- on distingue les cas: A symétrique ou A quelconque.
- on cherche T telle que $T^{-1}AT = H$ devienne une matrice de Hessenberg (ou une matrice tridiagonale, si A est symétrique); voir V.3.
- on applique l'algorithme QR à la matrice H (voir V.6).
- si H est une matrice tridiagonale et symétrique, on peut également appliquer la méthode de bissection (voir V.4).

V.3 Transformation sous forme de Hessenberg (ou tridiagonale)

Avec la transformation $v = Tu$ (où T est une matrice inversible) le problème $Av = \lambda v$ devient $T^{-1}ATu = \lambda u$. Donc, les valeurs propres de A et de $T^{-1}AT$ sont les mêmes et les vecteurs propres v_i de A sont connectés avec les vecteurs propres u_i de $T^{-1}AT$ par $v_i = Tu_i$. Le but de ce paragraphe est de trouver une matrice T telle que $T^{-1}AT$ devienne "plus simple". La situation idéale serait trouvée si $T^{-1}AT$ devenait triangulaire – mais une telle transformation nécessiterait déjà la connaissance des valeurs propres. Alors, on cherche T tel que $T^{-1}AT$ soit sous *forme de Hessenberg*

$$T^{-1}AT = H = \begin{pmatrix} * & * & \dots & \dots & * \\ * & * & \ddots & & \vdots \\ & * & \ddots & \ddots & * \\ & & \ddots & \ddots & * \\ & & & * & * \end{pmatrix}, \tag{3.1}$$

c.-à-d., $h_{ij} = 0$ pour $i > j + 1$. Pour arriver à ce but, nous considérons les deux algorithmes suivants.

a) Transformations élémentaires. Comme pour l'élimination de Gauss, nous utilisons les transformations L_i pour faire apparaître les zéros – colonne par colonne – dans (3.1).

Dans un premier pas, nous choisissons $k \geq 2$ tel que $|a_{k1}| \geq |a_{j1}|$ pour $j \geq 2$ et nous permutons les lignes 2 et k, c.-à-d., nous formons PA où P est une matrice de permutation convenable. Pour ne pas changer les valeurs propres, il faut également permuter les colonnes 2 et k (ceci correspond au calcul de $A' = PAP^{-1}$ car $P^2 = I$ et donc $P = P^{-1}$). Si $a'_{21} = 0$, on a aussi $a'_{i1} = 0$ pour $i \geq 3$ et le premier pas est terminé. Sinon, nous déterminons

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -\ell_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ 0 & -\ell_{n2} & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{telle que} \qquad L_2 A' = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \dots & a'_{1n} \\ a'_{21} & a'_{22} & \dots & a'_{2n} \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix}.$$

Pour ceci, on définit $\ell_{i2} = a'_{i1}/a'_{21}$. Une multiplication à droite avec

$$L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & \ell_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \ell_{n2} & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ne change pas la première colonne de L_2A'.

On répète la même procédure avec la sous-matrice de $L_2A'L_2^{-1}$ de dimension $n-1$, et ainsi de suite. A cause des multiplications à droite avec L_i^{-1}, cet algorithme coûte deux fois plus cher que l'élimination de Gauss (donc $\approx 2n^3/3$ opérations).

Exemple. Pour la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{on prend} \qquad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}$$

et on obtient

$$L_2 A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \\ 0 & 5/2 & -1/2 \end{pmatrix}, \qquad \text{puis} \qquad L_2 A L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & 5/2 & 1 \\ 2 & 5/2 & 3 \\ 0 & 9/4 & -1/2 \end{pmatrix} = H.$$

Cet exemple montre déjà le désavantage de cet algorithme. Si l'on part avec une matrice symétrique A, la matrice de Hessenberg H, obtenue par cet algorithme, n'est plus symétrique en général.

b) Transformations orthogonales. A la place de L_2, nous utilisons des réflexions de Householder (voir IV.7). D'abord, on détermine $\bar{Q}_2 = I - 2\bar{u}_2\bar{u}_2^T$ ($\|\bar{u}_2\|_2 = 1$) tel que $\bar{Q}_2\bar{A}_1 = \alpha_1 e_1$ où $\bar{A}_1 = (a_{21}, \dots, a_{n1})^T$. En posant $u_2 = (0, \bar{u}_2)^T$ et $Q_2 = I - 2u_2u_2^T$, la matrice Q_2A contient des zéros dans la première colonne à partir du troisième élément. La multiplication à droite avec $Q_2^{-1} = Q_2^T = Q_2$ ne change pas cette colonne.

Dans le pas suivant, on applique la même procédure à la sous-matrice de dimension $n-1$, etc. Finalement, on arrive à la forme de Hessenberg (3.1) avec la tranformation $T^{-1} = Q_{n-1} \cdot \ldots \cdot Q_2$, qui est une matrice orthogonale (c.-à-d., $T^{-1} = T^T$).

Remarque. Si A est une matrice symétrique, la matrice $H = T^{-1}AT$, obtenue par l'algorithme (b), est aussi symétrique car T est orthogonale. Ceci implique que H est automatiquement *tridiagonale* et symétrique.

V.4 Méthode de bissection pour des matrices tridiagonales

Considérons une matrice symétrique tridiagonale

$$A = \begin{pmatrix} d_1 & e_2 & & & \\ e_2 & d_2 & e_3 & & \\ & e_3 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & e_n \\ & & & e_n & d_n \end{pmatrix}. \tag{4.1}$$

On observe tout d'abord que si un élément e_i est nul, la matrice A est déjà décomposée en deux sous-matrices du même type. On peut donc supposer, sans restreindre la généralité, que

$$e_i \neq 0 \qquad \text{pour} \qquad i = 2, \ldots, n. \tag{4.2}$$

Pour cette matrice, il est possible de calculer la valeur $\chi_A(\lambda)$ du polynôme caractéristique sans connaître ses coefficients. En effet, si l'on pose

$$A_1 = (d_1), \qquad A_2 = \begin{pmatrix} d_1 & e_2 \\ e_2 & d_2 \end{pmatrix}, \qquad A_3 = \begin{pmatrix} d_1 & e_2 & \\ e_2 & d_2 & e_3 \\ & e_3 & d_3 \end{pmatrix}, \qquad \ldots$$

et si l'on définit $p_i(\lambda) := \det(A_i - \lambda I)$, on obtient

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1 \\ p_1(\lambda) &= d_1 - \lambda \\ p_i(\lambda) &= (d_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - e_i^2 p_{i-2}(\lambda), \qquad i = 2, \ldots, n. \end{aligned} \tag{4.3}$$

La formule de récurrence dans (4.3) est obtenue en développant le déterminant de la matrice $A_i - \lambda I$ par rapport à la dernière ligne (ou colonne).

En principe, on peut maintenant calculer les valeurs propres de A (c.-à-d. les zéros de $p_n(\lambda)$) de la manière suivante : chercher un intervalle où $p_n(\lambda)$ change de signe et localiser une racine de $p_n(\lambda) = 0$ par bissection. Les évaluations de $p_n(\lambda)$ sont faites à l'aide de la formule (4.3). Mais il existe une astuce interessante qui permet d'améliorer cet algorithme.

Théorème 4.1 *Si (4.2) est vérifié, les polynômes $p_i(\lambda)$ définis par (4.3) satisfont*

a) $p_n'(\widehat{\lambda})\, p_{n-1}(\widehat{\lambda}) < 0$ *si* $p_n(\widehat{\lambda}) = 0$ $(\widehat{\lambda} \in \mathbb{R})$;

b) $p_{i-1}(\widehat{\lambda})\, p_{i+1}(\widehat{\lambda}) < 0$ *si* $p_i(\widehat{\lambda}) = 0$ *pour un* $i \in \{1, \ldots, n-1\}$;

c) $p_0(\lambda)$ *ne change pas de signe sur* $\mathbb{R}$.

Démonstration. L'affirmation (c) est triviale.

Si $p_i(\widehat{\lambda}) = 0$ pour un $i \in \{1, \ldots, n-1\}$, la formule de récurrence (4.3) donne l'inégalité $p_{i+1}(\widehat{\lambda})p_{i-1}(\widehat{\lambda}) \leq 0$. Pour démontrer (b), il suffit d'exclure le cas $p_{i+1}(\widehat{\lambda})p_{i-1}(\widehat{\lambda}) = 0$. Si deux valeurs consécutives de la suite $\{p_i(\widehat{\lambda})\}$ sont nulles, la formule de récurrence montre que $p_i(\widehat{\lambda}) = 0$ pour tout i, ce qui contredit $p_0(\widehat{\lambda}) = 1$.

Nous démontrons par récurrence que

$$\text{toutes les racines de } p_i(\lambda) \text{ sont réelles, simples et séparées par celles de } p_{i-1}(\lambda). \tag{4.4}$$

Il n'y a rien à démontrer pour $i = 1$. Supposons la propriété vraie pour i et montrons qu'elle est encore vraie pour $i+1$. Comme les zéros $\lambda_1 < \ldots < \lambda_i$ de $p_i(\lambda)$ sont séparés par ceux de $p_{i-1}(\lambda)$ et comme $p_{i-1}(-\infty) = +\infty$, nous avons $\text{sign}p_{i-1}(\lambda_j) = (-1)^{j+1}$. Alors, on déduit de (b) que $\text{sign}p_{i+1}(\lambda_j) = (-1)^j$. Ceci et le fait que $p_{i+1}(\lambda) = (-1)^{i+1}\lambda^{i+1} + \ldots$ montrent que $p_{i+1}(\lambda)$ possède un zéro réel dans chacun des intervalles ouverts $(-\infty, \lambda_1), (\lambda_1, \lambda_2), \ldots, (\lambda_i, \infty)$.

L'affirmation (a) est maintenant une conséquence de (b) et de (4.4); voir la figure V.2. □

Définition 4.2 (suite de Sturm) *Une suite $(p_0, p_1, \ldots, p_n)$ de polynômes à coefficients réelles s'appelle une suite de Sturm, si elle vérifie les conditions (a), (b), (c) du Théorème 4.1.*

Théorème 4.3 *Considérons une suite de Sturm $(p_0, p_1, \ldots, p_n)$. Si l'on définit*

$$\omega(\lambda) = \textit{ nombre de changements de signes de } \{p_0(\lambda), p_1(\lambda), \ldots, p_n(\lambda)\}, \tag{4.5}$$

alors le polynôme $p_n(\lambda)$ possède exactement

$$\omega(b) - \omega(a) \tag{4.6}$$

zéros dans l'intervalle $[a, b)$ (si $p_i(\lambda) = 0$, on définit $\text{sign}p_i(\lambda) = \text{sign}p_{i-1}(\lambda)$).

Démonstration. Par continuité, l'entier $\omega(\lambda)$ peut changer sa valeur seulement si une valeur des fonctions $p_i(\lambda)$ devient nulle. La fonction $p_0(\lambda)$ ne change pas de signe. Supposons alors que $p_i(\widehat{\lambda}) = 0$ pour un $i \in \{1, \ldots, n-1\}$. La condition (b) et la continuité de $p_j(\lambda)$ montrent que seulement les deux situations suivantes sont possibles (ϵ petit):

	$\widehat{\lambda}-\epsilon$	$\widehat{\lambda}$	$\widehat{\lambda}+\epsilon$
$p_{i-1}(\lambda)$	$+$	$+$	$+$
$p_i(\lambda)$	$\pm$	0	$\mp$
$p_{i+1}(\lambda)$	$-$	$-$	$-$

	$\widehat{\lambda}-\epsilon$	$\widehat{\lambda}$	$\widehat{\lambda}+\epsilon$
$p_{i-1}(\lambda)$	$-$	$-$	$-$
$p_i(\lambda)$	$\pm$	0	$\mp$
$p_{i+1}(\lambda)$	$+$	$+$	$+$

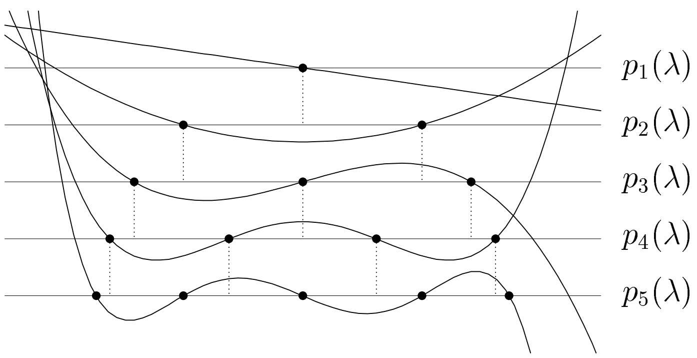


FIG. V.2 – *Suite de Sturm*

Chaque fois, on a $\omega(\widehat{\lambda}+\epsilon) = \omega(\widehat{\lambda}) = \omega(\widehat{\lambda}-\epsilon)$ et la valeur de $\omega(\lambda)$ ne change pas si λ traverse un zéro de $p_i(\lambda)$ pour $i \in \{1,\ldots,n-1\}$.

Il reste à étudier la fonction $\omega(\lambda)$ dans un voisinage d'un zéro $\widehat{\lambda}$ de $p_n(\lambda)$. La propriété (a) implique que pour les signes de $p_j(\lambda)$ on a seulement les deux possibilités suivantes:

	$\widehat{\lambda}-\epsilon$	$\widehat{\lambda}$	$\widehat{\lambda}+\epsilon$
$p_{n-1}(\lambda)$	$+$	$+$	$+$
$p_n(\lambda)$	$+$	0	$-$

	$\widehat{\lambda}-\epsilon$	$\widehat{\lambda}$	$\widehat{\lambda}+\epsilon$
$p_{n-1}(\lambda)$	$-$	$-$	$-$
$p_n(\lambda)$	$-$	0	$+$

c.-à-d., $\omega(\widehat{\lambda}+\epsilon) = \omega(\widehat{\lambda}-\epsilon)+1$. Ceci démontre que la fonction $\omega(\lambda)$ est constante par morceaux et augmente de 1 sa valeur si λ traverse un zéro de $p_n(\lambda)$. □

Méthode de bissection. Si l'on applique ce théorème à la suite (4.3), la différence $\omega(b)-\omega(a)$ est égale au nombre de valeurs propres de (4.1) dans l'intervalle $[a,b)$. On obtient toutes les valeurs propres de A de la manière suivante:

- on cherche un intervalle $[a,b]$ qui contienne toutes les valeurs propres de A (p.ex., en appliquant le théorème de Gershgorin). On a donc que $\omega(a)=0$ et $\omega(b)=n$.
- on pose $c=(a+b)/2$ et on calcule $\omega(c)$. Les différences $\omega(c)-\omega(a)$ et $\omega(b)-\omega(c)$ indiquent combien de valeurs propres de A sont dans $[a,c)$ et combien sont dans $[c,b)$.
- on continue à diviser les intervalles qui contiennent au moins une valeur propre de A.

On peut facilement modifier cet algorithme pour calculer la valeur propre la plus petite ou la 3ème plus grande valeur propre, etc.

Pour éviter un "overflow" dans le calcul de $p_n(\lambda)$ (si n et λ sont grands), il vaut mieux travailler avec

$$f_i(\lambda) := p_i(\lambda)/p_{i-1}(\lambda) \qquad i=1,\ldots,n \tag{4.7}$$

et utiliser le fait que

$$\omega(\lambda) = \text{ nombre d'éléments négatifs parmi } \{f_1(\lambda),\ldots,f_n(\lambda)\} \tag{4.8}$$

(attention: si $p_{i-1}(\lambda)$ est zéro, on pose $f_i(\lambda)=-\infty$; cette valeur compte pour un élément négatif). Pour une programmation de l'algorithme, on utilise la récurrence

$$\begin{aligned} f_1(\lambda) &= d_1-\lambda \\ f_i(\lambda) &= d_i-\lambda-\begin{cases} e_i^2/f_{i-1}(\lambda) & \text{si } f_{i-1}(\lambda)\neq 0 \\ |e_i|/\textit{eps} & \text{si } f_{i-1}(\lambda)=0\,. \end{cases} \end{aligned} \tag{4.9}$$

La formule pour le cas $f_{i-1}(\lambda)\neq 0$ est une conséquence de (4.3). Si $f_{i-1}(\lambda)=0$ (c.-à-d., $p_{i-1}(\lambda)=0$), on remplace cette valeur par $|e_i|\cdot\textit{eps}$. Ceci correspond à ajouter la perturbation $|e_i|\cdot\textit{eps}$ à d_{i-1}.

V.5 L'itération orthogonale

Dans ce paragraphe, nous allons généraliser la méthode de la puissance (voir le paragraphe V.2) afin de pouvoir calculer les deux (trois, ...) valeurs propres dominantes en même temps. Cette généralisation motivera l'itération QR qui constitue l'algorithme le plus important pour le calcul des valeurs propres d'une matrice.

Généralisation de la méthode de la puissance (pour calculer les deux valeurs propres dominantes). Considérons une matrice A dont les valeurs propres satisfont

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \ldots > |\lambda_n|. \tag{5.1}$$

La méthode de la puissance est basée sur l'itération $y_{k+1} = Ay_k$ (voir (2.1)) et nous permet d'obtenir une approximation de λ_1 à l'aide du quotient de Rayleigh. Pour calculer (en même temps) la deuxième valeur propre λ_2, nous prenons deux vecteurs y_0 et z_0 satisfaisant $y_0^* z_0 = 0$ et nous considérons l'itération

$$\begin{aligned} y_{k+1} &= Ay_k \\ z_{k+1} &= Az_k - \beta_{k+1} y_{k+1} \end{aligned} \tag{5.2}$$

où β_{k+1} est déterminé par la condition $y_{k+1}^* z_{k+1} = 0$. Par induction, on voit que

$$\begin{aligned} y_k &= A^k y_0 \\ z_k &= A^k z_0 - \gamma_k y_k \end{aligned} \tag{5.3}$$

où γ_k est tel que

$$y_k^* z_k = 0. \tag{5.4}$$

Ceci signifie que le calcul de $\{z_k\}$ correspond à la méthode de la puissance appliquée à z_0, combinée avec une orthogonalisation (projection de $A^k z_0$ sur le complément orthogonal de y_k).

En exprimant les vecteurs initiaux dans la base de vecteurs propres $v_1, \ldots, v_n$ de la matrice A (on suppose $\|v_i\|_2 = 1$),

$$y_0 = \sum_{i=1}^n a_i v_i, \qquad z_0 = \sum_{i=1}^n b_i v_i,$$

les vecteurs y_k, z_k deviennent

$$y_k = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^k v_i, \qquad z_k = \sum_{i=1}^n (b_i - \gamma_k a_i) \lambda_i^k v_i. \tag{5.5}$$

Comme nous l'avons constaté dans le paragraphe V.2, pour $k \to \infty$, le terme $a_1 \lambda_1^k v_1$ est dominant dans y_k (si $a_1 \neq 0$) et on obtient une approximation du premier vecteur propre v_1. Que peut-on dire pour la suite z_k?

La condition (5.4) d'orthogonalité implique que

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \bar{a}_i (b_j - \gamma_k a_j) \bar{\lambda}_i^k \lambda_j^k v_i^* v_j = 0. \tag{5.6}$$

Cette relation définit γ_k. Comme le terme avec $i = j = 1$ est dominant, on voit que $\gamma_k \approx b_1/a_1$. Par la suite, nous allons supposer que $a_1 \neq 0$ et $a_1 b_2 - a_2 b_1 \neq 0$. En divisant (5.6) par $\bar{\lambda}_1^k$, on obtient

$$\bar{a}_1 (b_1 - \gamma_k a_1) \lambda_1^k \Big(1 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k)\Big) = -\bar{a}_1 (b_2 - \gamma_k a_2) \lambda_2^k \Big(v_1^* v_2 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k) + \mathcal{O}(|\lambda_3/\lambda_2|^k)\Big).$$

Maintenant, on peut insérer cette formule dans (5.5) et on en déduit

$$z_k = \lambda_2^k (b_2 - \gamma_k a_2) \Big(v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1 + \mathcal{O}(|\lambda_2/\lambda_1|^k) + \mathcal{O}(|\lambda_3/\lambda_2|^k)\Big). \tag{5.7}$$

Visiblement, le vecteur z_k s'approche (pour $k \to \infty$) d'un multiple de $v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1$, qui est la projection orthogonale de v_2 à l'hyperplan $v_1^\perp$. Concernant les valeurs propres, on a le résultat suivant.

Théorème 5.1 *Considérons les vecteurs y_k, z_k donnés par (5.2) et notons*

$$U_k = (y_k/\|y_k\|_2,\ z_k/\|z_k\|_2) \tag{5.8}$$

(observer que $U_k^* U_k = I$). Si (5.1) est vérifié, on a que

$$U_k^* A U_k \ \to \ \begin{pmatrix} \lambda_1 & * \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \qquad \textit{pour} \qquad k \to \infty. \tag{5.9}$$

Démonstration. L'élément (1,1) de la matrice $U_k^* A U_k$ est le quotient de Rayleigh (2.3) qui converge vers λ_1. En utilisant (5.7), on voit que l'élément (2,2) satisfait

$$\frac{z_k^* A z_k}{z_k^* z_k} \ \to \ \frac{(v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1)^* (\lambda_2 v_2 - \lambda_1 v_1^* v_2 \cdot v_1)}{(v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1)^* (v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1)} = \frac{\lambda_2 (1 - |v_1^* v_2|^2)}{1 - |v_1^* v_2|^2} = \lambda_2.$$

De façon similaire, on obtient pour l'élément (2,1)

$$\frac{z_k^* A y_k}{\|z_k\|_2 \cdot \|y_k\|_2} \ \to \ \frac{(v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1)^* \lambda_1 v_1}{\|v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1\|_2 \cdot \|v_1\|_2} = 0.$$

Finalement, l'élément (1,2) de $U_k^* A U_k$ satisfait

$$\frac{y_k^* A z_k}{\|y_k\|_2 \cdot \|z_k\|_2} \ \to \ \frac{v_1^* (\lambda_2 v_2 - \lambda_1 v_1^* v_2 \cdot v_1)}{\|v_1\|_2 \cdot \|v_2 - v_1^* v_2 \cdot v_1\|_2} = \frac{(\lambda_2 - \lambda_1) v_1^* v_2}{\sqrt{1 - |v_1^* v_2|^2}}.$$

Cette expression est en général non nulle. □

Remarque. Avec la notation (5.8), l'itération (5.2) peut être écrite sous la forme

$$A U_k = U_{k+1} R_{k+1} \tag{5.10}$$

où R_{k+1} est une matrice 2×2 qui est triangulaire supérieure.

Méthode de la puissance (pour le calcul de toutes les valeurs propres) ou simplement **itération orthogonale.** La généralisation de l'algorithme précédent au cas où l'on veut calculer toutes les valeurs propres d'une matrice est évidente: on choisit une matrice orthogonale U_0, c.-à-d., on choisit n vecteurs orthogonaux (les colonnes de U_0) qui jouent le rôle de y_0, z_0, etc. Puis, on effectue l'itération

for $k = 1, 2, \ldots$
  $Z_k = A U_{k-1}$
  $U_k R_k = Z_k$ (décomposition QR)
end

Si (5.1) est vérifié et si la matrice U_0 est bien choisie ($a_1 \neq 0$, $a_1 b_2 - a_2 b_1 \neq 0$, etc), une généralisation du théorème précédent donne la convergence de

$$T_k := U_k^* A U_k \tag{5.11}$$

vers une matrice triangulaire dont les éléments de la diagonale sont les valeurs propres de A. On a donc transformé A en forme triangulaire à l'aide d'une matrice orthogonale (*décomposition de Schur*).

Il y a une possibilité intéressante pour calculer T_k de (5.11) directement à partir de T_{k-1}. D'une part, on déduit de (5.10) que

$$T_{k-1} = U_{k-1}^* A U_{k-1} = (U_{k-1}^* U_k) R_k. \tag{5.12a}$$

D'autre part, on a

$$T_k = U_k^* A U_k = U_k^* A U_{k-1} U_{k-1}^* U_k = R_k (U_{k-1}^* U_k). \tag{5.12b}$$

On calcule la décomposition QR de la matrice T_{k-1} et on échange les deux matrices de cette décomposition pour obtenir T_k.

V.6 L' algorithme QR

> La méthode QR, due à J.C.F. Francis et à V.N. Kublanovskaya, est la méthode la plus couramment utilisée pour le calcul de l'ensemble des valeurs propres . . . (P.G. Ciarlet 1982)
>
> . . . the QR iteration, and it forms the backbone of the most effective algorithm for computing the Schur decomposition. (G.H. Golub & C.F. van Loan 1989)

La version simple du célèbre algorithme QR n'est rien d'autre que la méthode du paragraphe précédent. En effet, si l'on pose $Q_k = U_{k-1}^* U_k$ et si l'on commence l'itération avec $U_0 = I$, les formules (5.11) et (5.12) nous permettent d'écrire l'algorithme précédent comme suit:

$T_0 = A$
for $k = 1, 2, \ldots$
    $Q_k R_k = T_{k-1}$ (décomposition QR)
    $T_k = R_k Q_k$
end

Les T_k qui sont les mêmes que dans V.5 convergent (en général) vers une matrice triangulaire. Ceci nous permet d'obtenir toutes les valeurs propres de la matrice A car les T_k ont les mêmes valeurs propres que A (voir (5.11)).

Cet algorithme a été développé indépendamment par J.G.F. Francis (1961) et par V.N. Kublanovskaya (1961). Un algorithme similaire, qui utilise la décomposition LR à la place de la décomposition QR, a été introduit par H. Rutishauser (1958).

Exemple numérique. Appliquons la méthode QR à la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 2 & 3 & 5 \\ 3 & 6 & 8 & 4 \\ 0 & 5 & 4 & 3 \\ 0 & 0 & 4 & 3 \end{pmatrix}. \tag{6.1}$$

On peut montrer (voir exercice 9) que, pour une matrice de Hessenberg A, toutes les matrices T_k sont aussi sous forme de Hessenberg. Pour étudier la convergence vers une matrice triangulaire, il suffit alors de considérer les éléments $t_{i+1,i}^{(k)}$ $(i = 1, \ldots, n-1)$ de la sous-diagonale. On constate que

$$\frac{t_{i+1,i}^{(k+1)}}{t_{i+1,i}^{(k)}} \approx \frac{\lambda_{i+1}}{\lambda_i} \tag{6.2}$$

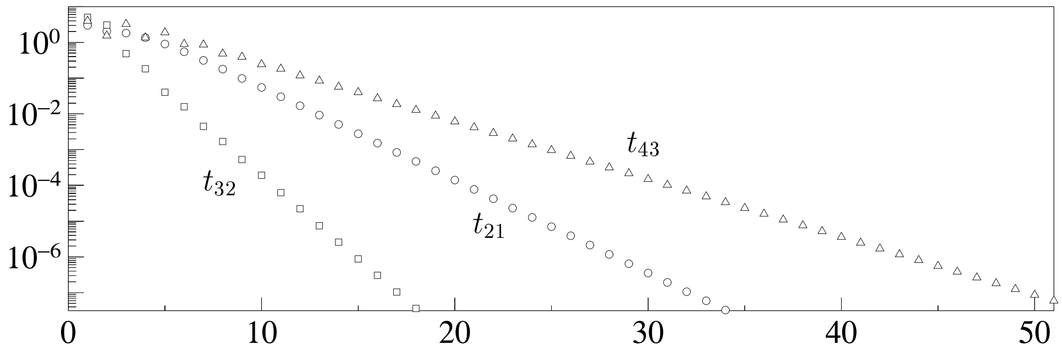


FIG. V.3 – *Convergence de la méthode QR (sans shift)*

($\lambda_1 \approx 14.3$, $\lambda_2 \approx 7.86$, $\lambda_3 \approx 2.70$, $\lambda_4 \approx -1.86$). Comme $|\lambda_{i+1}/\lambda_i| < 1$, les éléments $t^{(k)}_{i+1,i}$ convergent, pour $k \to \infty$, linéairement vers 0 (voir la Fig. V.3, où les valeurs $|t^{(k)}_{i+1,i}|$ sont dessinées en fonction du nombre k de l'itération).

Remarques. (a) Comme le calcul de la décomposition QR d'une matrice pleine est très coûteux ($\mathcal{O}(n^3)$ opérations), on applique l'algorithme QR uniquement aux matrices de Hessenberg. Dans cette situation une itération nécessite seulement $\mathcal{O}(n^2)$ opérations.

(b) La convergence est très lente en général (seulement *linéaire*). Pour rendre efficace cet algorithme, il faut absolument trouver un moyen pour accélérer la convérgence.

(c) Considérons la situation où A est une matrice réelle qui possède des valeurs propres complexes (l'hypothèse (5.1) est violée). L'algorithme QR produit une suite de matrices T_k qui sont toutes réelles. Dans cette situation, les T_k ne convergent pas vers une matrice triangulaire, mais deviennent *triangulaires par blocs* (sans démonstration). Comme la dimension des blocs dans la diagonale vaut en général 1 ou 2, on obtient également des approximations des valeurs propres.

Accélération de la convergence. D'après l'observation (6.2), nous savons que

$$t^{(k)}_{n,n-1} = \mathcal{O}(|\lambda_n/\lambda_{n-1}|^k). \tag{6.3}$$

La convergence vers zéro de cet élément ne va être rapide que si $|\lambda_n| \ll |\lambda_{n-1}|$. Une idée géniale est d'appliquer l'algorithme QR à la matrice $A - pI$ où $p \approx \lambda_n$. Comme les valeurs propres de $A - pI$ sont $\lambda_i - p$, on a la propriété $|\lambda_n - p| \ll |\lambda_i - p|$ pour $i = 1, \ldots, n-1$ et l'élément $t^{(k)}_{n,n-1}$ va converger rapidement vers zéro. Rien ne nous empêche d'améliorer l'approximation p après chaque itération. L'algorithme QR avec "shift" devient alors:

$T_0 = A$
for $k = 1, 2, \ldots$
  déterminer le paramètre p_{k-1}
  $Q_k R_k = T_{k-1} - p_{k-1} I$ (décomposition QR)
  $T_k = R_k Q_k + p_{k-1} I$
end

Les matrices T_k de cette itération satisfont

$$Q_k^* T_{k-1} Q_k = Q_k^* (Q_k R_k + p_{k-1} I) Q_k = R_k Q_k + p_{k-1} I = T_k. \tag{6.4}$$

Ceci implique que, indépendamment de la suite p_k, les matrices T_k ont toutes les mêmes valeurs propres que $T_0 = A$.

Pour décrire complètement l'algorithme QR avec shift, il faut encore discuter le choix du paramètre p_k et il faut donner un critère pour arrêter l'itération.

Choix du "shift"-paramètre. On a plusieurs possibilités:
- $p_k = t_{nn}^{(k)}$: ce choix marche très bien si les valeurs propres de la matrice sont réelles.
- on considère la matrice

$$\begin{pmatrix} t_{n-1,n-1}^{(k)} & t_{n-1,n}^{(k)} \\ t_{n,n-1}^{(k)} & t_{n,n}^{(k)} \end{pmatrix}. \tag{6.5}$$

Si les valeurs propres de (6.5) sont réelles, on choisit pour p_k celle qui est la plus proche de $t_{n,n}^{(k)}$. Si elles sont de la forme $\alpha \pm i\beta$ avec $\beta \neq 0$ (donc complexes), on prend d'abord $p_k = \alpha + i\beta$ et pour l'itération suivante $p_{k+1} = \alpha - i\beta$.

Critère pour arrêter l'itération. L'idée est d'itérer jusqu'à ce que $t_{n,n-1}^{(k)}$ ou $t_{n-1,n-2}^{(k)}$ soit suffisamment petit. Plus précisément, on arrête l'itération quand

$$|t_{\ell,\ell-1}^{(k)}| \leq \textit{eps} \cdot (|t_{\ell-1,\ell-1}^{(k)}| + |t_{\ell,\ell}^{(k)}|) \qquad \text{pour} \quad \ell = n \quad \text{ou} \quad \ell = n-1. \tag{6.6}$$

- Si (6.6) est vérifié pour $\ell = n$, on accepte $t_{n,n}^{(k)}$ comme approximation de λ_n et on continue l'itération avec la matrice $(t_{ij}^{(k)})_{i,j\leq n-1}$.
- Si (6.6) est vérifié pour $\ell = n-1$, on accepte les deux valeurs propres de (6.5) comme approximations de λ_n et λ_{n-1} et on continue l'itération avec la matrice $(t_{ij}^{(k)})_{i,j\leq n-2}$.

Exemple numérique. Nous avons appliqué l'algorithme QR à la matrice (6.1) avec le shift $p_k = t_{nn}^{(k)}$. La convergence de $t_{i+1,i}^{(k)}$ vers zéro est illustrée dans la Fig. V.4. Une comparaison avec la Fig. V.3 nous montre que la convergence est beaucoup plus rapide (convergence quadratique). Après 5 itérations, on a $|t_{43}^{(k)}| \leq 10^{-15}$. Encore 4 itérations pour la matrice de dimension 3 donnent $|t_{32}^{(k)}| \leq 10^{-15}$. Il ne reste plus que 3 itérations à faire pour la matrice de dimension 2 pour avoir $|t_{21}^{(k)}| \leq 10^{-15}$. En tout, 12 itérations ont donné toutes les valeurs propres avec une précision de 15 chiffres.

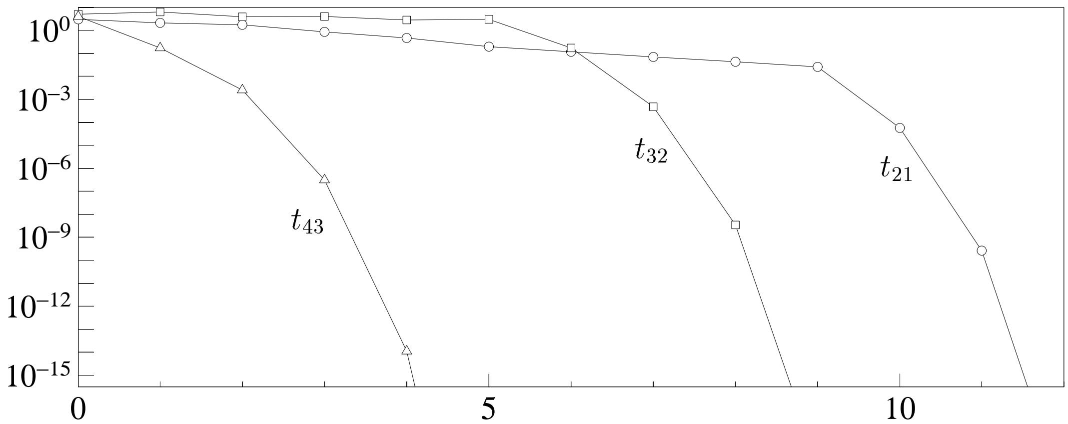


FIG. V.4 – *Convergence de la méthode QR (avec shift)*

Le "double shift" de Francis. Dans la situation où A est une matrice réelle ayant des valeurs propres complexes, il est recommandé de choisir un shift-paramètre p_k qui soit complexe. Une application directe de l'algorithme précédent nécessite un calcul avec des matrices complexes. L'observation suivante permet d'éviter ceci.

Lemme 6.1 *Soit T_k une matrice réelle, $p_k = \alpha + i\beta$ et $p_{k+1} = \alpha - i\beta$. Alors, on peut choisir les décompositions dans l'algorithme QR de manière à ce que T_{k+2} soit réelle.*

Remarque. La décomposition QR d'une matrice est unique sauf qu'on peut remplacer QR par $(QD)(D^{-1}R)$ où $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ avec $|d_i| = 1$.

Démonstration. La formule (6.4) montre que

$$T_{k+2} = (Q_{k+1}Q_{k+2})^* T_k (Q_{k+1}Q_{k+2}). \tag{6.7}$$

Il suffit alors de démontrer que le produit $Q_{k+1}Q_{k+2}$ est réel. Une manipulation à l'aide de formules pour T_k donne

$$\begin{aligned} Q_{k+1}Q_{k+2}R_{k+2}R_{k+1} &= Q_{k+1}(T_{k+1} - p_{k+1}I)R_{k+1} = Q_{k+1}(R_{k+1}Q_{k+1} + p_kI - p_{k+1}I)R_{k+1} \\ &= (Q_{k+1}R_{k+1})^2 + (p_k - p_{k+1})Q_{k+1}R_{k+1} = (T_k - p_kI)^2 + (p_k - p_{k+1})(T_k - p_kI) \\ &= T_k^2 - (p_k + p_{k+1})T_k + p_kp_{k+1}I =: M. \end{aligned} \tag{6.8}$$

On a donc trouvé une décomposition QR de la matrice M qui, en conséquence des hypothèses du lemme, est une matrice réelle. Si, dans l'algorithme QR, la décomposition est choisie de manière à ce que les éléments diagonaux de R_{k+1} et R_{k+2} soient réels, alors, à cause de l'unicité de la décomposition QR, les matrices $Q_{k+1}Q_{k+2}$ et $R_{k+2}R_{k+1}$ sont réelles. □

Une possibilité de calculer T_{k+2} à partir de T_k est de calculer M de (6.8), de faire une décomposition QR (réelle) de M et de calculer T_{k+2} à l'aide de (6.7). Cet algorithme n'est pas pratique car le calcul de T_k^2 nécessite $\mathcal{O}(n^3)$ opérations, même si T_k est sous forme de Hessenberg.

Il y a une astuce intéressante pour obtenir T_{k+2} à partir de T_k en $\mathcal{O}(n^2)$ opérations. Elle est basée sur la propriété suivante.

Théorème 6.2 *Soit T une matrice donnée et supposons que*

$$Q^*TQ = S \tag{6.9}$$

où Q est orthogonale et S est sous forme de Hessenberg satisfaisant $s_{i,i-1} \neq 0$ pour $i = 2, \ldots, n$. Alors, Q et S sont déterminées de manière "unique" par la première colonne de Q.

Remarque. On a "unicité" dans le sens suivant: si $\widehat{Q}^*T\widehat{Q}$ est de type Hessenberg avec une matrice orthogonale $\widehat{Q}$ satisfaisant $\widehat{Q}e_1 = Qe_1$, alors $\widehat{Q} = QD$ où $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ avec $|d_i| = 1$.

Démonstration. Notons les colonnes de Q par q_i. Alors, la relation (6.9) implique

$$Tq_i = \sum_{j=1}^{i+1} s_{ji}q_j, \qquad\qquad q_j^*Tq_i = s_{ji}. \tag{6.10}$$

Si q_1 est fixé, la valeur s_{11} est donnée par la deuxième formule de (6.10). Avec cette valeur, on obtient de la première formule de (6.10) que q_2 est un multiple de $Tq_1 - s_{11}q_1$. Ceci détermine q_2 à une unité d_2 près. Maintenant, les valeurs s_{21}, s_{12}, s_{22} sont déterminées et q_3 est un multiple de $Tq_2 - s_{21}q_1 - s_{22}q_2$, etc. □

Si les hypothèses du lemme précédent sont vérifiées, on peut calculer la matrice réelle T_{k+2} en $\mathcal{O}(n^2)$ opérations de la manière suivante:

- calculer Me_1, la première colonne de M (formule (6.8));
- déterminer une matrice de Householder H_1 telle que $H_1(Me_1) = \alpha e_1$;

- transformer $H_1^T T_k H_1$ sous forme de Hessenberg à l'aide de matrices de Householder $H_2, \ldots,$ H_{n-1} (voir le paragraphe V.3); c.-à-d., calculer $H^T T_k H$ où $H = H_1 H_2 \cdot \ldots \cdot H_{n-1}$.

Comme $H_i e_1 = e_1$ pour $i = 2, \ldots, n-1$, la première colonne de H est un multiple de celle de M (observer que $H_1^T = H_1$). Par la formule (6.8), la première colonne de $Q_{k+1}Q_{k+2}$ est aussi un multiple de Me_1. Par conséquent, pour un bon choix des décompositions $Q_{k+1}R_{k+1}$ et $Q_{k+2}R_{k+2}$, on a $H = Q_{k+1}Q_{k+2}$ et la matrice obtenue par cet algorithme est égale à T_{k+2} (voir (6.7)).

Un exemple instructif. Considérons la matrice

$$T_0 = A = \begin{pmatrix} 2 & a \\ \epsilon & 1 \end{pmatrix}$$

où ϵ est un nombre petit. Avec le choix $p_0 = 1$ pour le shift-paramètre, on obtient

$$T_0 - p_0 I = \begin{pmatrix} 1 & a \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1+\epsilon^2}} & -\frac{\epsilon}{\sqrt{1+\epsilon^2}} \\ \frac{\epsilon}{\sqrt{1+\epsilon^2}} & \frac{1}{\sqrt{1+\epsilon^2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\epsilon^2} & \frac{a}{\sqrt{1+\epsilon^2}} \\ 0 & -\frac{a\epsilon}{\sqrt{1+\epsilon^2}} \end{pmatrix} = Q_1 R_1$$

et

$$T_1 - p_0 I = R_1 Q_1 = \begin{pmatrix} * & * \\ -\frac{a\epsilon^2}{1+\epsilon^2} & * \end{pmatrix}.$$

- si A est symétrique (c.-à-d., $a = \epsilon$) on a $t_{n,n-1}^{(1)} = \mathcal{O}(\epsilon^3)$, donc convergence *cubique*.
- si A n'est pas symétrique (p.ex. $a = 1$) on a $t_{n,n-1}^{(1)} = \mathcal{O}(\epsilon^2)$, donc convergence *quadratique*.

Ces propriétés restent vraies pour des matrices générales (sans démonstration).

V.7 Exercices

1. Calculer les valeurs propres de la matrice tridiagonale (dimension n, $b \cdot c > 0$)

$$A = \begin{pmatrix} a & c & & & \\ b & a & c & & \\ & b & a & c & \\ & & b & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \end{pmatrix}.$$

Indication. Les composants du vecteur propre $(v_1, v_2, \ldots, v_n)^T$ satisfont une équation aux différences finies avec $v_0 = v_{n+1} = 0$. Vérifier que $v_j = Const \cdot (\alpha_1^j - \alpha_2^j)$ où

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \frac{\lambda - a}{c}, \qquad \alpha_1 \cdot \alpha_2 = \frac{b}{c}, \qquad \Big(\frac{\alpha_1}{\alpha_2}\Big)^{n+1} = 1.$$

Résultat. $\qquad \lambda_j = a - 2\sqrt{bc} \cdot \cos\Big(\frac{j\pi}{n+1}\Big), \qquad j = 1, 2, \ldots, n.$

2. Montrer par un contre-exemple que la formule (1.9) ne reste pas vraie si la matrice C n'est pas symétrique. Pour cela donner une matrice symétrique A et une matrice C (quelconque) telles que les valeurs propres $\lambda_i(\varepsilon)$ de $A + \varepsilon C$ ne vérifient pas

$$\lambda_i(\varepsilon) = \lambda_i + \varepsilon \cdot d_i + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

Pourquoi faut-il considérer des matrices ayant une dimension plus grande que 2 ?
Pourquoi suffit-il de considérer la matrice A, sous forme diagonale avec une valeur propre nulle de multiplicité plus grande que 2 ?

3. Considérer la matrice
$$A(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & \varepsilon & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1+\varepsilon & -\varepsilon \end{pmatrix}$$
D'après le théorème 1.2 (chapitre V) cette matrice possède une valeur propre de la forme
$$\lambda(\varepsilon) = i + \varepsilon \cdot d + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$
Calculer d et dessiner la tangente à la courbe $\lambda(\varepsilon)$ au point $\lambda(0)$.

4. (a) Calculer par la méthode de la puissance, la plus grande valeur propre de la matrice
$$A = \begin{pmatrix} 99 & 1 & 0 \\ 1 & 100 & 1 \\ 0 & 1 & 98 \end{pmatrix}.$$
   (b) Pour accélerer considérablement la vitesse de convergence, appliquer la méthode de la puissance à la matrice $A - pI$ avec un choix intelligent de p.
   (c) Avec quel choix de p obtient-on la valeur propre la plus petite?

5. Considérons la matrice tridiagonale
$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \end{pmatrix}.$$
Montrer que, si $a_i \cdot c_i > 0$ pour $i = 1, \ldots, n-1$, toutes les valeurs propres de A sont réelles.
Indication. Trouver $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ telle que DAD^{-1} soit symétrique.

6. Soit A une matrice symétrique et B quelconque. Montrer que pour chaque valeur propre λ_B de B il existe une valeur propre λ_A de A telle que
$$|\lambda_A - \lambda_B| \le \|A - B\|_2.$$
Indication. Montrer l'existence d'un vecteur v tel que $v = (A - \lambda_B)^{-1}(A - B)v$. En déduire que $1 \le \|(A - \lambda_B)^{-1}(A - B)\| \le \|(A - \lambda_B)^{-1}\| \|(A - B)\|$.

7. (Schur, 1909). Soit A une matrice symétrique. Montrer que pour chaque indice i il existe une valeur propre λ de A telle que
$$|\lambda - a_{ii}| \le \sqrt{\textstyle\sum_{j \ne i} |a_{ij}|^2}.$$
Indication. Appliquer l'exercice 4 avec une B convenable.

8. Soit A une matrice réelle avec pour valeur propre $\alpha + i\beta$. Montrer que l'itération
$$\begin{pmatrix} \bar{\alpha}I - A & -\bar{\beta}I \\ \bar{\beta}I & \bar{\alpha}I - A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k+1} \\ v_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$$
(où $\bar{\alpha} \approx \alpha$ et $\bar{\beta} \approx \beta$) permet de calculer la valeur propre $\alpha + i\beta$ et le vecteur propre correspondant.
Indication. Considérer les parties réelles et complexes de l'itération de Wielandt. On obtient alors
$$\frac{u_k^T A u_k + v_k^T A v_k}{u_k^T u_k + v_k^T v_k} \to \alpha, \qquad \frac{u_k^T A v_k - v_k^T A u_k}{u_k^T u_k + v_k^T v_k} \to \beta\,.$$

9. Considérons la matrice de Hilbert,

$$A = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 \end{pmatrix}$$

   (a) Transformer A en une matrice tridiagonale ayant les mêmes valeurs propres.

   (b) En utilisant une suite de Sturm, montrer que toutes les valeurs propres sont positives et qu'une valeur propre est plus petite que 0.001.

   (c) Calculer approximativement la condition de A pour la norme Euclidienne.

10. La formule de récurrence

$$(k+1)P_{k+1}(x) = (2k+1)xP_k(x) - kP_{k-1}(x)$$

pour les *polynômes de Legendre* (voir exercice 9 de la série 3) ressemble à

$$p_i(\lambda) = (d_i - \lambda)p_{i-1}(\lambda) - e_i^2 p_{i-2}(\lambda), \qquad i = 2, \ldots, n,$$

pour les polynômes $\det(A_i - \lambda I)$. Trouver une matrice tridiagonale A de dimension n telle que les valeurs propres de A sont les racines de $P_n(x)$.

11. Soit $p(x)$ un polynôme de degré n et supposons que toutes les racines soient simples. Démontrer que la suite définie par l'algorithme d'Euclid,

$$\begin{aligned} &p_n(x) = p(x), \quad p_{n-1}(x) = -p'(x) \\ &p_i(x) = q_i(x)p_{i-1}(x) - \gamma_i^2 p_{i-2}(x), \quad i = n, \ldots, 2, \end{aligned}$$

est une suite de Sturm.

Pour le polynôme $p(x) = x^5 - 5x^4 + 3x^3 + 3x^2 + 2x + 8$.

   (a) déterminer le nombre de racines réelles.

   (b) Combien de racines sont complexes?

   (c) Combien de racines sont réelles et positives?

12. Pour un φ donné notons $c = \cos\varphi$ et $s = \sin\varphi$. La matrice $\Omega_{k\ell}$, définie par

$$(\Omega_{k\ell})_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, j \neq k, j \neq \ell \\ c & \text{si } i = j = k \text{ où } i = j = \ell \\ s & \text{si } i = k \text{ et } j = \ell \\ -s & \text{si } i = \ell \text{ et } j = k \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

s'appelle *rotation de Givens*.

a) Montrer qu'elle est orthogonale.

b) Soit A une matrice symétrique. Déterminer φ tel que le (k, ℓ)-ième élément de $A' = \Omega_{k\ell} A \Omega_{k\ell}^T$ s'annule.

Resultat. ctg $2\varphi = (a_{kk} - a_{\ell\ell})/(2a_{k\ell})$.

13. La *méthode de Jacobi* (1846) pour le calcul des valeurs propres d'une matrice symétrique:

i) on choisit $a_{k\ell}$ $(k > \ell)$ tel que $|a_{k\ell}| = \max_{i>j} |a_{ij}|$;

ii) on détermine A' comme dans l'exercice 7.

Montrer que, si on répète cette procédure, on a convergence vers une matrice diagonale, dont les éléments sont les valeurs propres de A.

Indication. Montrer que $\sum_{i>j} |a'_{ij}|^2 = \sum_{i>j} |a_{ij}|^2 - |a_{k\ell}|^2$.

14. On considère la matrice
$$A = \begin{pmatrix} 7 & 0.5 \\ 0.0001 & 8 \end{pmatrix}$$
dont on cherche à calculer les valeurs propres.

    (a) Faire une itération de l'algorithme QR sans shift.

    (b) Faire une itération de l'algorithme QR avec shift.

    (c) Estimer la position des valeurs propres de A à l'aide du Théorème de Gershgorine.

    (d) Calculer les valeurs propres de A à l'aide du polynôme caractéristique.

15. Montrer que si la matrice $T_0 = A$ est une matrice de Hessenberg (ou tridiagonale), alors les matrices T_k, $k \geq 1$, construites par l'algorithme QR sont également des matrices de Hessenberg (tridiagonales).

16. Donner une estimation grossière du nombre d'opérations qui sont nécessaires pour effectuer la décomposition QR d'une matrice de Hessenberg et pour calculer ensuite le produit RQ.

17. Soit T_0 une matrice de Hessenberg dont tous les éléments de la sous-diagonale sont non-nuls. Montrer que, si p_0 est une valeur propre de T_0, une itération de l'algorithme QR avec shift p_0 donne $t^{(1)}_{n,n-1} = 0$.

18. Expliquer, comment le calcul de T_k à partir de T_{k-1}
$$Q_k R_k = T_{k-1} - p_{k-1} I, \qquad T_k = R_k Q_k + p_{k-1} I$$
peut être effectué sans soustraire (et additionner) explicitement la matrice $p_{k-1} I$.

    Indication. Laissez-vous inspirer par le "double shift" algorithme de Francis.

Chapitre VI

Méthodes Itératives – Equations Non Linéaires

En pratique, on est souvent confronté à la résolution d'un système d'équations non linéaires. C'est-à-dire pour une fonction $f : I\!R^n \to I\!R^n$ donnée, on cherche un point $x \in I\!R^n$ tel que

$$f(x) = 0. \tag{0.1}$$

En général, il n'y a pas d'algorithme fini pour trouver une solution. On est donc obligé d'utiliser des méthodes itératives.

Sans hypothèses supplémentaires, on ne sait rien sur l'existence d'une solution de (0.1). Par exemple, pour $f(x) = e^x$ il n'y a pas de solution, pour $f(x) = \sin x$ il y en a une infinité. Mais, le *théorème d'inversion locale* nous fournit un résultat sur l'unicité locale: si $f(a) = 0$ et si la matrice jacobienne $f'(a)$ est inversible, il existe un voisinage U de a et un voisinage V de 0 tels que $f : U \to V$ soit bijective. Ceci implique que a est la seule solution de (0.1) dans le voisinage U de a.

Bibliographie sur ce chapitre

J.M. Ortega & W.C. Rheinboldt (1970): *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables*. Academic Press, New York.

A.M. Ostrowski (1966): *Solution of Equations and Systems of Equations*. Academic Press, New York, 2nd edition. [MA 65/27]

VI.1 Méthode des approximations successives

On considère le problème du calcul d'un *point fixe* de l'application $\Phi : I\!R^n \to I\!R^n$; c.-à-d., on cherche $x \in I\!R^n$ tel que

$$x = \Phi(x). \tag{1.1}$$

Les problèmes (0.1) et (1.1) sont équivalents et il y a beaucoup de possibilités pour écrire (0.1) sous la forme (1.1). Par exemple, on peut définir Φ comme $\Phi(x) = x - f(x)$ ou $\Phi(x) = x - Bf(x)$ (ici B est soit un nombre non-nul, soit une matrice bien choisie).

Pour résoudre (1.1), on se donne une approximation initiale x_0 (arbitraire) et on considère la méthode itérative

$$x_{k+1} = \Phi(x_k). \tag{1.2}$$

Si la suite $\{x_k\}$ converge, disons vers $a \in I\!R^n$, et si la fonction $\Phi(x)$ est continue en a, la limite a est une solution de (1.1). Mais que peut-on dire sur l'erreur?

Théorème 1.1 *Si $\Phi(x)$ est 2 fois continûment différentiable et si $a \in I\!R^n$ est une solution de (1.1), l'erreur $e_k = x_k - a$ satisfait*

$$e_{k+1} = \Phi'(a)\, e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2). \tag{1.3}$$

Démonstration. Comme $a = \Phi(a)$, on obtient

$$e_{k+1} = x_{k+1} - a = \Phi(x_k) - \Phi(a) = \Phi'(a)e_k + \mathcal{O}(\|e_k\|^2). \qquad \square$$

On peut tirer plusieurs conclusions de la formule (1.3):

- si $\Phi'(a)$ possède une valeur propre λ_1 satisfaisant $|\lambda_1| > 1$, la composante de e_k dans la direction du vecteur propre v_1 va être agrandie – l'itération *ne converge pas* vers a.
- si toutes les valeurs propres de $\Phi'(a)$ satisfont $|\lambda_i| < 1$, on peut choisir une norme dans $I\!R^n$ telle que pour la norme matricielle correspondante $\|\Phi'(a)\| < 1$. Ceci et (1.3) impliquent que, pour $\|e_k\|$ suffisamment petit, on a $\|e_{k+1}\| \le \alpha \|e_k\|$ où α est un nombre entre $\|\Phi'(a)\|$ et 1. L'erreur e_k converge donc vers zéro.

Exemple. Pour résoudre numériquement $y' = f(y)$, on peut appliquer la méthode d'Euler implicite

$$y_1 = y_0 + hf(y_1) \tag{1.4}$$

qui définit implicitement l'approximation y_1 de la solution après un pas de longueur h. L'équation (1.4) est déjà sous la forme (1.1) avec $\Phi(x) = y_0 + hf(x)$. Si h est suffisamment petit, les valeurs propres de $\Phi'(y_1) = hf'(y_1)$ sont petites et l'itération (1.2) converge.

Critère pour arrêter l'itération. En pratique, on s'intéresse à une approximation x_k qui satisfasse $\|x_k - a\| \le$ *tol*. Une possibilité est d'accepter x_k comme approximation de la solution dès que $\|x_k - x_{k-1}\| \le$ *tol*.

Le critère qui va suivre est basé sur l'hypothèse que Φ soit une contraction et que

$$\|x_k - x_{k-1}\| \le \alpha \|x_{k-1} - x_{k-2}\| \qquad \text{avec} \qquad \alpha < 1.$$

En appliquant l'inégalité du triangle à l'identité

$$x_k - a = (x_k - x_{k+1}) + (x_{k+1} - x_{k+2}) + \ldots$$

(en cas de convergence), on obtient

$$\|x_k - a\| \le \frac{\alpha}{1-\alpha} \|x_k - x_{k-1}\|. \tag{1.5}$$

Le facteur de contractivité peut être estimé par

$$\alpha_k = \|x_k - x_{k-1}\| / \|x_{k-1} - x_{k-2}\|, \qquad k \ge 2.$$

L'idée est d'arrêter l'itération quand

$$\frac{\alpha_k}{1-\alpha_k} \|x_k - x_{k-1}\| \le \textit{tol} \tag{1.6}$$

et d'accepter x_k comme approximation de la solution.

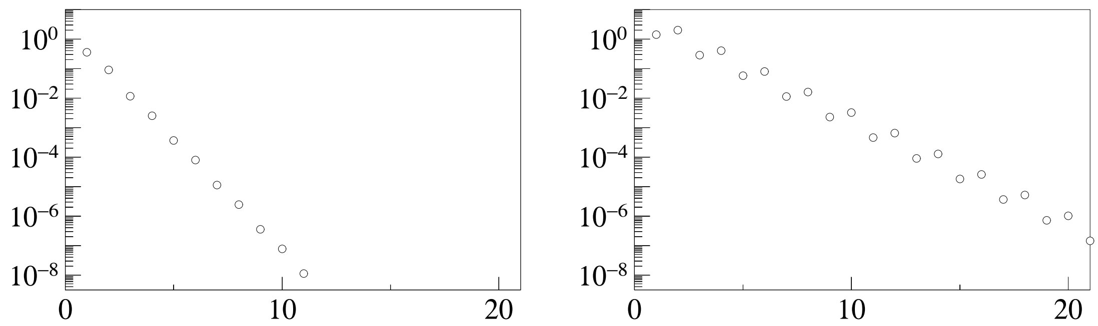


FIG. VI.1 – *Convergence des itérations (1.7)*

Exemples. Pour les deux itérations

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + 0.3 \begin{pmatrix} y_k \\ -\sin x_k \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -0.1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

la norme euclidienne de l'erreur de (x_k, y_k) est dessinée dans la fig. VI.1 (à gauche pour la première itération et à droite pour la deuxième). On peut bien observer la convergence linéaire. Le rayon spectral de $\Phi'(a)$ vaut $\rho \approx 0.177$ et $\rho \approx 0.447$ respectivement. C'est la raison pour laquelle la première itération converge plus rapidement que la seconde. Le dessin à droite montre aussi que la convergence n'est pas nécessairement monotone (pour la norme $\|\cdot\|_2$). Donc, le coefficient α_k de (1.6) peut être plus grand que 1 même si l'itération converge.

VI.2 Méthodes itératives pour systèmes linéaires

Pour la résolution des systèmes linéaires

$$Ax = b, \tag{2.1}$$

il y a des situations où les méthodes itératives sont très utiles. Par exemple, si la matrice A possède une très grande dimension et si beaucoup d'éléments de A sont nuls (matrice creuse), ce qui est le cas pour les discrétisations des équations aux dérivées partielles.

Pour se ramener à un problème de point fixe, on considère une décomposition $A = M - N$ ("splitting") et on définit l'itération

$$Mx_{k+1} = Nx_k + b, \qquad A = M - N. \tag{2.2}$$

Le choix de la décomposition $A = M - N$ est important pour la performance de la méthode. D'une part, M doit être choisie telle que le système (2.2) soit beaucoup plus facile à résoudre que le système (2.1). D'autre part, les valeurs propres de la matrice $M^{-1}N$ doivent satisfaire $|\lambda_i| < 1$ pour que l'itération (2.2) converge.

Il y a beaucoup de possibilités de définir la décomposition $A = M - N$. Si l'on dénote

$$L = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ a_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ a_{n1} & \dots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & a_{n-1,n} \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

et $D = \operatorname{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$ (afin que $A = L + D + U$) les itérations les plus connues sont:

- *Jacobi*: $M = D$, $N = -L - U$;
- *Gauss-Seidel*: $M = D + L$, $N = -U$.

Pour ces deux méthodes, la matrice M est choisie de manière à ce que le système (2.2) soit très facile à résoudre. Un avantage de la méthode de Gauss-Seidel est le fait que pour le calcul de la composante x_i^{k+1} du vecteur x_{k+1} on n'a besoin que des composantes $x_{i+1}^k, \ldots, x_n^k$ du vecteur x_k. Alors, on peut utiliser la même variable pour x_i^{k+1} que pour x_i^k. Une itération devient donc simplement:

for $i = 1, \ldots, n$
$x_i = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j)/a_{ii}.$

Une modification intéressante de cet algorithme est la *méthode SOR* ("successive over-relaxation"):

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= (1-\omega)x_k + \omega\widehat{x} \\ D\widehat{x} &= b - Lx_{k+1} - Ux_k \end{aligned} \tag{2.3}$$

où ω est un paramètre donné (pour $\omega = 1$, SOR se réduit à Gauss-Seidel). Elle est aussi simple à programmer que la précédente.

Les résultats suivants démontrent la convergence dans quelques situations particulières.

Théorème 2.1 *Si la matrice A est "diagonale dominante", c.-à-d.*

$$|a_{ii}| > \sum_{j\neq i} |a_{ij}| \qquad \textit{pour} \quad i = 1, \ldots, n, \tag{2.4}$$

alors l'itération de Jacobi converge.

Démonstration. Pour la méthode de Jacobi, on a $M^{-1}N = -D^{-1}(L+U)$. La condition (2.4) implique que $\|M^{-1}N\|_\infty < 1$ (voir la formule (4.5) du chapitre IV). □

Pour étudier la convergence de la méthode SOR (en particulier pour Gauss-Seidel), on l'écrit sous la forme équivalente

$$(D+\omega L)x_{k+1} = ((1-\omega)D - \omega U)x_k + \omega b$$

ou encore $x_{k+1} = H(\omega)x_k + \omega(D+\omega L)^{-1}b$ avec

$$H(\omega) = (D+\omega L)^{-1}((1-\omega)D - \omega U). \tag{2.5}$$

Théorème 2.2 *Si A est symétrique et définie positive et si $\omega \in (0,2)$, l'itération SOR, définie par (2.3), converge.*

Démonstration. Il faut démontrer que toutes les valeurs propres de $H(\omega)$ satisfont $|\lambda| < 1$. Soient λ une valeur propre et $x \neq 0$ le vecteur propre correspondant:

$$((1-\omega)D - \omega U)x = \lambda(D+\omega L)x. \tag{2.6}$$

Comme $(1-\omega)D - \omega U = D - \omega A + \omega L$, la formule (2.6) devient

$$\omega Ax = (1-\lambda)(D+\omega L)x. \tag{2.7}$$

En multipliant (2.6) et (2.7) avec x^*, on obtient pour $\alpha := x^*(D+\omega L)x$ (observer que $U = L^T$)

$$\lambda\alpha + \overline{\alpha} = (2-\omega)x^*Dx > 0, \qquad (1-\lambda)\alpha = \omega x^*Ax =: \beta > 0. \tag{2.8}$$

On en déduit

$$0 < \lambda\alpha + \overline{\alpha} = \beta\Big(\frac{\lambda}{1-\lambda} + \frac{1}{1-\overline{\lambda}}\Big) = \beta \cdot \frac{1-|\lambda|^2}{|1-\lambda|^2},$$

ce qui implique $|\lambda| < 1$. □

Pour quelques matrices, on connaît la valeur de ω qui minimise le rayon spectral de $H(\omega)$ et, par conséquent, qui accélère la convergence par rapport à l'itération de Gauss-Seidel. D'autres méthodes itératives pour des systèmes linéaires sont SSOR ("symmetric successive over-relaxation") et la méthode du gradient conjugué (avec préconditionnement). Voir le livre de Golub & Van Loan, déjà mentionné au chapitre IV, et les livres classiques

L.A. Hageman & D.M. Young (1981): *Applied Iterative Methods*. Academic Press, New York.

R.S. Varga (1962): *Matrix Iterative Methods*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

VI.3 Méthode de Newton

Considérons le problème de la résolution d'un système d'équations non linéaires

$$f(x) = 0 \tag{3.1}$$

où la fonction $f : I\!R^n \to I\!R^n$ est supposée être au moins une fois différentiable. Si $x_0 \in I\!R^n$ est une approximation de la solution cherchée, on linéarise $f(x)$ autour de x_0

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

et on calcule le zéro de cette linéarisation. Si l'on répète cette procédure avec la nouvelle approximation, on obtient l'algorithme suivant:

for $k = 0, 1, 2, \ldots$
  calculer $f(x_k)$ et $f'(x_k)$
  $f'(x_k)\Delta x_k = -f(x_k)$ (système linéaire à résoudre)
  $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
end for

Exemple 3.1 La méthode d'Euler implicite (voir (1.4)), appliquée à l'équation différentielle $x' = y$, $y' = 10(1 - x^2)y - x$ avec pour valeurs initiales $\xi = 2$, $\eta = -0.66$, nous conduit à l'équation non linéaire

$$\begin{aligned} x &= \xi + h \cdot y \\ y &= \eta + h \cdot (10(1 - x^2)y - x). \end{aligned} \tag{3.2}$$

L'itération (1.2) ne converge que pour h suffisamment petit. Par exemple, pour $h = 0.3$ elle diverge et on est obligé d'utiliser un autre algorithme. La méthode de Newton

$$\begin{pmatrix} 1 & -h \\ h(20x_k y_k + 1) & 1 - 10h(1 - x_k^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} - x_k \\ y_{k+1} - y_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} x_k - \xi - hy_k \\ y_k - \eta - h(10(1 - x_k^2)y_k - x_k) \end{pmatrix}$$

converge sans difficulté avec $h = 0.3$ si l'on commence l'itération avec $x_0 = \xi$ et $y_0 = \eta$. Les valeurs de x_k, y_k et les erreurs, mesurées dans la norme euclidienne, sont données dans le tableau VI.1.

Pour étudier la convergence de la méthode de Newton, considérons un terme de plus dans la série de Taylor:

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2} f''(x_k)(x - x_k, x - x_k) + \mathcal{O}(\|x - x_k\|^3). \tag{3.3}$$

TAB. VI.1 – *Convergence de la méthode de Newton*

k	x_k	y_k	erreur
0	2.00000000000000	−0.660000000000000	$5.31 \cdot 10^{-1}$
1	1.95099818511797	−0.163339382940109	$3.38 \cdot 10^{-2}$
2	1.96084279415163	−0.130524019494582	$4.27 \cdot 10^{-4}$
3	1.96072023704926	−0.130932543169149	$6.65 \cdot 10^{-8}$
4	1.96072021795300	−0.130932606823320	$1.79 \cdot 10^{-15}$

Si l'on pose $x = a$ dans cette formule (avec a comme solution de (3.1)) et si l'on soustrait

$$0 = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k)$$

(définition de x_{k+1}), on obtient pour l'erreur $e_k = x_k - a$ la formule

$$0 = f'(x_k)(-e_{k+1}) + \frac{1}{2}f''(x_k)(e_k, e_k) + \mathcal{O}(\|e_k\|^3).$$

On vient de démontrer le résultat suivant:

Théorème 3.2 *Supposons que $f(x)$ soit 3 fois continûment différentiable et que $f'(x)$ soit inversible dans un voisinage de a (solution de (3.1)). Alors, pour x_k suffisamment proche de a, l'erreur $e_k = x_k - a$ de la méthode de Newton satisfait*

$$e_{k+1} = \frac{1}{2}(f'(x_k))^{-1}f''(x_k)(e_k, e_k) + \mathcal{O}(\|e_k\|^3).) \tag{3.4}$$

Donc, la convergence de cette méthode est quadratique. □

Ce théorème montre la convergence *locale* de la méthode de Newton, c.-à-d., si x_0 est proche d'une solution a de (3.1), la suite $\{x_k\}$ converge vers a. Concernant la convergence *globale*, on en sait très peu et on ne sait analyser seulement que quelques cas de fonctions simples. L'exemple le plus connu est

$$f(z) = z^3 - 1 \qquad \text{ou} \qquad f(x,y) = \begin{pmatrix} x^3 - 3xy^2 - 1 \\ 3x^2y - y^3 \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

($z = x + iy$) pour lequel l'itération devient

$$z_{k+1} = z_k - \frac{z_k^3 - 1}{3z_k^2} = \frac{1}{3}\Big(2z_k + \frac{1}{z_k^2}\Big). \tag{3.6}$$

Il est intéressant de déterminer les ensembles (bassins d'attraction)

$$A(a) = \{z_0 \in \mathbb{C} \mid \{z_k\} \quad \text{converge vers} \;\; a\} \tag{3.7}$$

pour les trois solutions 1, $(-1 \pm i\sqrt{3})/2$ de $f(z) = 0$. Un calcul par ordinateur donne la fig. VI.2. Les z_0 du domaine blanc entraînent une convergence vers $a = 1$, ceux du domaine gris vers $a = (-1 - i\sqrt{3})/2$ et ceux du domaine noir vers $a = (-1 + i\sqrt{3})/2$. On observe que la suite $\{z_k\}$ ne converge pas nécessairement vers la solution la plus proche de z_0.

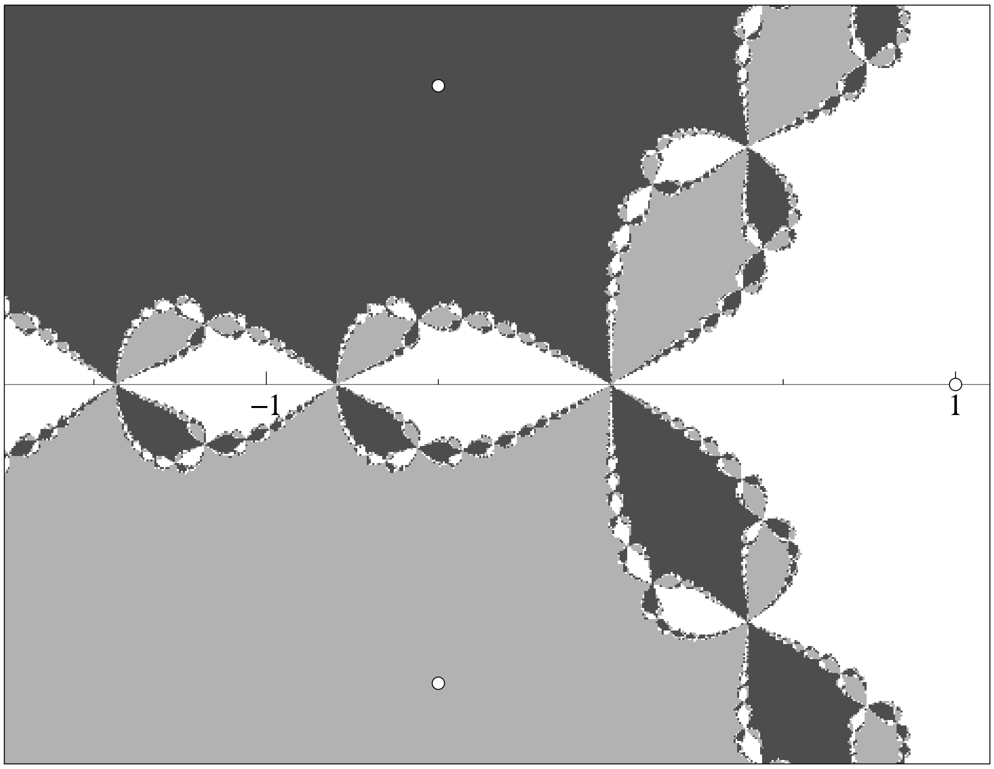


FIG. VI.2 – *Bassins d'attraction pour l'itération (3.6)*

Calcul numérique de la matrice jacobienne. En pratique, il arrive souvent que la forme analytique de la matrice $f'(x)$ est inconnue. Dans cette situation on approche les éléments $\partial f_i/\partial x_j$ de la matrice jacobienne par

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x_1,\ldots,x_n) \approx \frac{f_i(x_1,\ldots,x_j+\delta,\ldots,x_n)-f_i(x_1,\ldots,x_n)}{\delta}. \tag{3.8}$$

Mais comment doit-on choisir le δ? Pour simplifier la notation, considérons une fonction à une variable et notons-la par $g(x)$.

Un développement en série de Taylor montre que

$$\frac{g(x+\delta)-g(x)}{\delta} = g'(x) + \frac{\delta}{2}g''(x) + \mathcal{O}(\delta^2). \tag{3.9}$$

En conséquence, δ doit être petit pour que *l'erreur de la discrétisation* ne soit pas trop grande. D'autre part, la soustraction dans (3.9) est très mal conditionnée. Une étude des *erreurs d'arrondi* montre que l'expression obtenue par un calcul en virgule flottante vaut

$$\begin{aligned} &\frac{g((x+\delta)(1+\epsilon_1))(1+\epsilon_2)-g(x)(1+\epsilon_3)}{\delta} \\ &\qquad \approx \frac{g(x+\delta)-g(x)}{\delta} + \frac{1}{\delta}\Big(g'(x+\delta)(x+\delta)\epsilon_1 + g(x+\delta)\epsilon_2 - g(x)\epsilon_3\Big) \end{aligned}$$

où $|\epsilon_i| \le eps$ (*eps* est la précision de l'ordinateur, voir section II.3). L'idée est de choisir δ afin que les deux erreurs soient de la même grandeur :

$$\frac{\delta}{2}\big(\ldots\big) \approx \frac{1}{\delta}\big(\ldots\big)\textit{eps}. \tag{3.10}$$

Donc, on prend par exemple

$$\delta = \sqrt{eps} \qquad \text{ou} \qquad \delta = \sqrt{eps(1+|x|)}. \tag{3.11}$$

Modifications de la méthode de Newton. Si la dimension du problème (3.1) est très grande et/ou l'évaluation de la matrice $f'(x)$ est très coûteuse, on peut remplacer la définition de Δx_k par

$$f'(x_0)\Delta x_k = -f(x_k). \tag{3.12}$$

Dans ce cas, il suffit de calculer une fois pour toutes la décomposition LR de $f'(x_0)$, ce qui facilite grandement la résolution des systèmes linéaires successifs. Mais on perd la convergence quadratique car (3.12) n'est rien d'autre qu'une itération (1.2) avec $\Phi(x) = x - (f'(x_0))^{-1}f(x)$ et $\Phi'(a)$ est non nul en général.

En cas de mauvaise convergence, on remplace la définition de x_{k+1} par

$$x_{k+1} = x_k + \lambda_k \Delta x_k \tag{3.13}$$

et on détermine λ_k de façon à ce que $\|f(x_k + \lambda\Delta x_k)\|$ soit minimale.

VI.4 Méthode de Gauss-Newton

Dans ce paragraphe, on va s'intéresser à des systèmes non linéaires surdéterminés. On considère une fonction $f : I\!R^n \to I\!R^m$ où $m > n$ et on cherche une solution de $f(x) = 0$. Evidemment, comme on a plus de conditions que d'inconnues, ce problème ne possède en général pas de solution. On se contente donc de trouver un vecteur $x \in I\!R^n$ tel que

$$\|f(x)\|_2 \to \min . \tag{4.1}$$

Si $f(x)$ est différentiable, la fonction $F(x) = \|f(x)\|_2^2$ est aussi différentiable et une condition nécessaire pour que x soit un minimum local est d'avoir $F'(x) = 0$, c.-à-d.

$$f'(x)^T f(x) = 0. \tag{4.2}$$

Une possibilité pour résoudre (4.1) est d'appliquer une méthode itérative, par exemple la méthode de Newton, au système (4.2). Ceci nécessite le calcul de la deuxième dérivée de $f(x)$.

Une autre possibilité est de linéariser $f(x)$ dans (4.1) autour d'une approximation x_0 de la solution et de calculer x_1 de

$$\|f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0)\|_2 \to \min . \tag{4.3}$$

Une répétition de cette idée donne l'algorithme suivant (méthode de Gauss-Newton)

for $k = 0, 1, 2, \ldots$
  calculer $f(x_k)$ et $f'(x_k)$
  déterminer Δx_k de $\|f(x_k) + f'(x_k)\Delta x_k\|_2 \to \min$ (moindres carrés)
  $x_{k+1} = x_k + \Delta x_k$
end for

Pour calculer Δx_k on peut soit résoudre les équations normales (section IV.6)

$$(f'(x_k))^T f'(x_k)\Delta x_k = -(f'(x_k))^T f(x_k) \tag{4.4}$$

soit calculer la décomposition QR de $f'(x_k)$ et appliquer l'algorithme de la section IV.7.

Pour l'étude de la convergence de la méthode de Gauss-Newton, développons la fonction

$$g(x) = (f'(x))^T f(x), \qquad g_i(x) = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f_j}{\partial x_i}(x)\, f_j(x) \tag{4.5}$$

en série de Taylor. Pour ceci, calculons

$$\frac{\partial g_i}{\partial x_\ell} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial^2 f_j}{\partial x_\ell \partial x_i}(x)\, f_j(x) + \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial f_j}{\partial x_i}(x)\, \frac{\partial f_j}{\partial x_\ell}(x). \tag{4.6}$$

Matriciellement, la formule (4.6) s'écrit

$$g'(x) = B(x)(f(x),\ \cdot\ ) + (f'(x))^T f'(x) \tag{4.7}$$

où $B(x) : I\!\!R^m \times I\!\!R^n \to I\!\!R^n$ est l'application bilinéaire définie par

$$\Big(B(x)(u,v)\Big)_i = \sum_{\ell=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial^2 f_j}{\partial x_\ell \partial x_i}(x) \cdot u_j \cdot v_\ell .$$

Avec cette notation, la formule de Taylor donne

$$g(x) = (f'(x_k))^T f(x_k) + (f'(x_k))^T f'(x_k)(x-x_k) + B(x_k)(f(x_k), x-x_k) + \mathcal{O}(\|x-x_k\|^2). \tag{4.8}$$

Soit maintenant a une solution de (4.1). Elle satisfait $g(a) = 0$. En posant $x = a$ dans (4.8) et en soustrayant (4.4), nous obtenons ainsi le résultat suivant.

Théorème 4.1 *Supposons que $f : I\!\!R^n \to I\!\!R^m$ (avec $m > n$) soit 3 fois continûment différentiable, que le rang de $f'(x)$ soit maximal et que a soit une solution de (4.1). Alors, pour x_k suffisamment proche de a, l'erreur $e_k = x_k - a$ de la méthode de Gauss-Newton satisfait*

$$e_{k+1} = -\Big((f'(x_k))^T f'(x_k)\Big)^{-1} B(x_k)(f(x_k), e_k) + \mathcal{O}(\|e_k\|^2). \qquad \square$$

Une conséquence de cette formule est :

- en général, la convergence est linéaire;
- on a convergence quadratique si $f(a) = 0$;
- si $f(a)$ est trop grand, la méthode diverge.

Terminons ce chapitre avec une application typique de cet algorithme.

Exemple (Identification de paramètres). La fig. VI.3 montre une photographie de la Vallée Blanche (prise par G. Wanner). On y reconnaît le Col des Grandes Jorasses, l'Aiguille du Géant, l'Aiguille Blanche de Peterey, l'Aiguille du Tacul, le Petit Rognon et l'Aiguille du Moine. La fig. VI.4 est une copie d'une carte géographique de cette région. Le problème consiste à trouver la position de la caméra, ses caractéristiques (foyer) et les angles d'inclinaison.

Pour la formulation mathématique de ce problème, nous avons choisi des coordonnées (u, v) sur la photographie (fig. VI.3, l'origine est au centre) et des coordonnées (x, y, z) sur la carte (z représente l'altitude). Les valeurs mesurées pour les 6 points reconnus sont données dans le tableau VI.2.

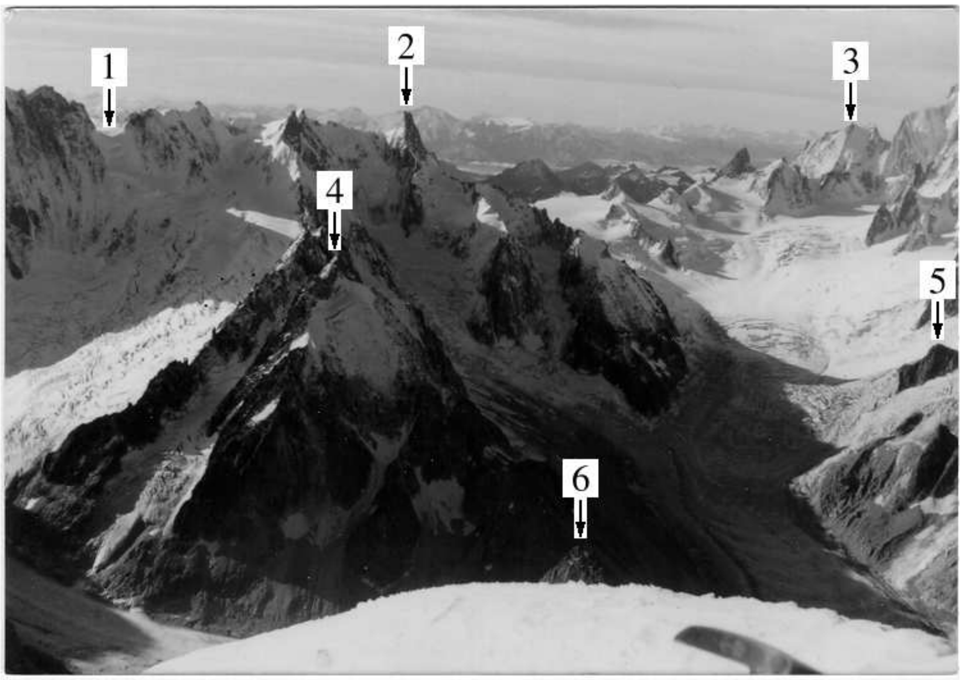


FIG. VI.3 – *Photographie de la Vallée Blanche*

TAB. VI.2 – *Les données pour le problème "Vallée Blanche"*

k	u_k	v_k	x_k	y_k	z_k
1. Col des Grandes Jorasses	-0.0480	0.0290	9855	5680	3825
2. Aiguille du Géant	-0.0100	0.0305	8170	5020	4013
3. Aig. Blanche de Peterey	0.0490	0.0285	2885	730	4107
4. Aiguille de Tacul	-0.0190	0.0115	8900	7530	3444
5. Petit Rognon	0.0600	-0.0005	5700	7025	3008
6. Aiguille du Moine	0.0125	-0.0270	8980	11120	3412

Pour fixer les *inconnues*, notons par $(\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z})$ la position de la caméra (centre de l'objectif), par (a, b, c) le vecteur en direction de l'objet (orthogonal au plan du film) et par θ l'angle de rotation de la caméra autour du vecteur (a, b, c). On a donc 7 paramètres à trouver. De plus, considérons la base orthogonale

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}, \qquad h = \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}} \begin{pmatrix} b \\ -a \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad g = \frac{1}{\sqrt{(a^2+b^2)(a^2+b^2+c^2)}} \begin{pmatrix} -ac \\ -bc \\ a^2+b^2 \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

dont les deux vecteurs h et g engendrent le plan du film, h étant horizontal et g vertical. Alors, le vecteur dans l'espace qui montre du centre $(\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z})$ de la lentille vers le point (u_k, v_k) sur le film est donné par

$$\begin{pmatrix} w_{1k} \\ w_{2k} \\ w_{3k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} + \alpha_k \cdot h + \beta_k \cdot g \qquad \text{où} \qquad \begin{pmatrix} \alpha_k \\ \beta_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}.$$

Les conditions à satisfaire sont que les vecteurs (w_{1k}, w_{2k}, w_{3k}) et $(x_k - \widehat{x}, y_k - \widehat{y}, z_k - \widehat{z})$ soient

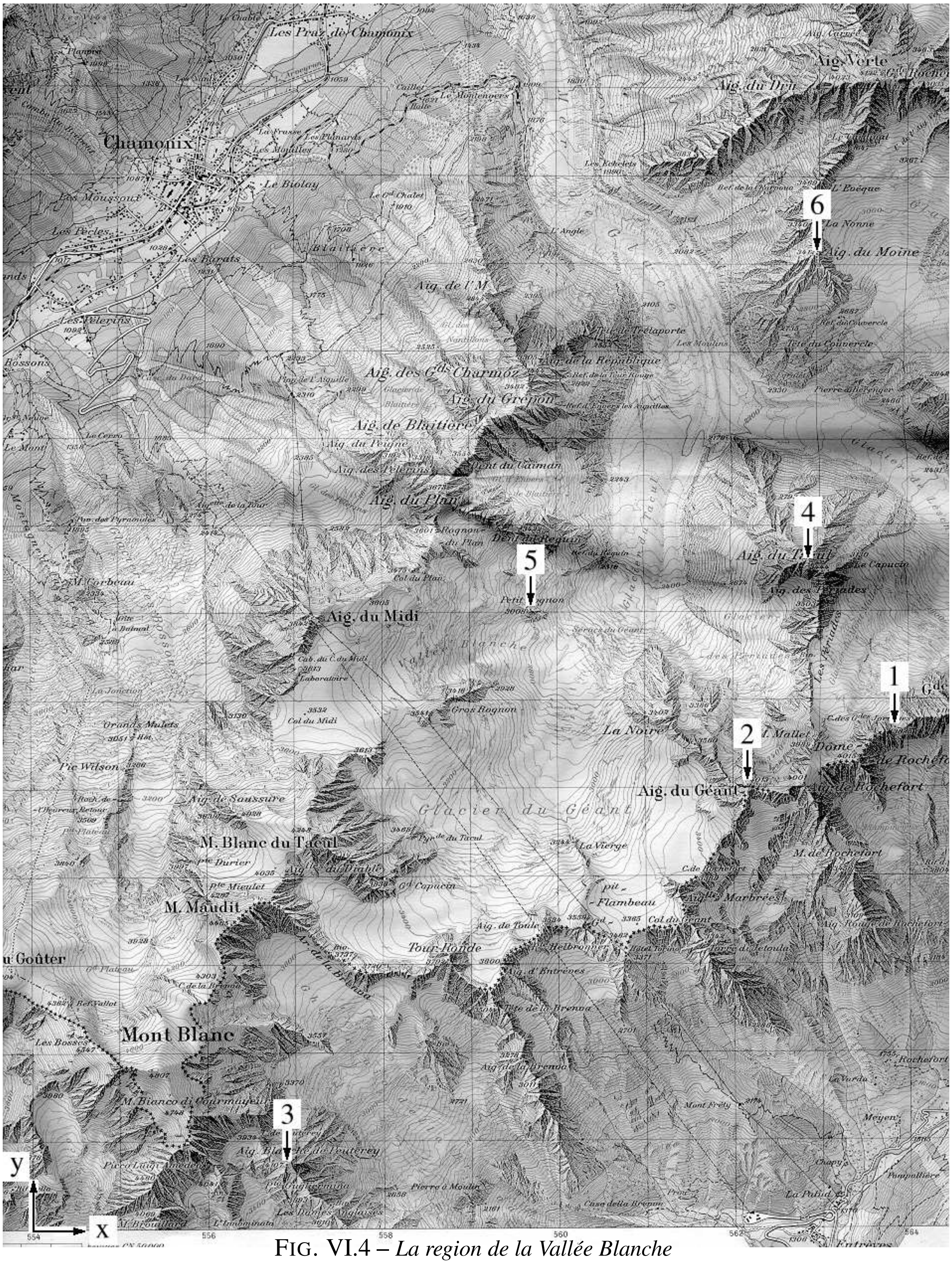


FIG. VI.4 – *La region de la Vallée Blanche*

colinéaires. Ceci donne deux conditions pour chaque k. Mais, par symétrie, il est plus naturel de considérer les trois conditions (pour chaque k)

$$0 = \begin{pmatrix} w_{1k} \\ w_{2k} \\ w_{3k} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_k - \widehat{x} \\ y_k - \widehat{y} \\ z_k - \widehat{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{2k}(z_k - \widehat{z}) - w_{3k}(y_k - \widehat{y}) \\ w_{3k}(x_k - \widehat{x}) - w_{1k}(z_k - \widehat{z}) \\ w_{1k}(y_k - \widehat{y}) - w_{2k}(x_k - \widehat{x}) \end{pmatrix}. \qquad (4.10)$$

En tout, ceci donne $3 \cdot 6 = 18$ conditions pour 7 inconnues. Voici le programme FORTRAN pour la fonction $f : I\!R^7 \to I\!R^{18}$.

```
      SUBROUTINE FCN(N,XSOL,M,F)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      PARAMETER(ND=50)
      DIMENSION XSOL(N),F(M)
      COMMON/DAT/NDAT,XDAT(ND),YDAT(ND),ZDAT(ND),UDAT(ND),VDAT(ND)
C ------ NOTATION LOCALE --------
      X0=XSOL(1)
      Y0=XSOL(2)
      Z0=XSOL(3)
      A=XSOL(4)
      B=XSOL(5)
      C=XSOL(6)
      THETA=XSOL(7)
C ------ VECTEUR HORIZONTAL ------
      RAC=SQRT(A*A+B*B)
      H1=B/RAC
      H2=-A/RAC
      H3=0.
C ----- VECTEUR VERTICAL ---------
      RAC=SQRT((A*C)**2+(B*C)**2+(A**2+B**2)**2)
      G1=-A*C/RAC
      G2=-B*C/RAC
      G3=(A**2+B**2)/RAC
C ------- LES POINTS --------
      DO I=1,NDAT
C ------ ROTATION INITIALE ------
         U= UDAT(I)*COS(THETA)+VDAT(I)*SIN(THETA)
         V=-UDAT(I)*SIN(THETA)+VDAT(I)*COS(THETA)
C ------ LES VECTEURS A ALIGNER -------
         W1=A+H1*U+G1*V
         W2=B+H2*U+G2*V
         W3=C+H3*U+G3*V
         Q1=XDAT(I)-X0
         Q2=YDAT(I)-Y0
         Q3=ZDAT(I)-Z0
C -------- LES FONCTIONS A ANNULER -----------
         F(3*(I-1)+1)=W1*Q2-W2*Q1
         F(3*(I-1)+2)=W2*Q3-W3*Q2
         F(3*(I-1)+3)=W3*Q1-W1*Q3
      END DO
      RETURN
      END
```

En appliquant la méthode de Gauss-Newton à ce système avec comme valeurs initiales $\widehat{x} = 8000$, $\widehat{y} = 15000$, $\widehat{z} = 1000$, $a = 0$, $b = -1$, $c = 0$, $\theta = 0$, après peu d'itérations on obtient la solution $\widehat{x} = 9664$, $\widehat{y} = 13115$, $\widehat{z} = 4116$ avec une précision de 5 chiffres (voir le tableau VI.3). On a donc bien trouvé la position de la caméra. C'est à l'Aiguille Verte (altitude 4122) que Gerhard a pris cette photo.

TAB. VI.3 – *Convergence de la méthode de Gauss-Newton*

k	$\widehat{x}_k$	$\widehat{y}_k$	$\widehat{z}_k$	a	b	c	θ
0	8000	15000	1000	0.000	−1.000	0.000	0.000
1	8030	9339	1169	−0.003	−0.085	−0.003	0.047
2	8680	11163	4017	−0.014	−0.114	−0.021	0.017
3	9577	13034	3993	−0.040	−0.167	−0.032	−0.094
4	9660	13107	4116	−0.043	−0.169	−0.032	−0.074
5	9664	13115	4116	−0.043	−0.169	−0.032	−0.074
6	9664	13115	4116	−0.043	−0.169	−0.032	−0.074

VI.5 Exercices

1. Pour une fonction $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$, considérons l'itération $(x_k, x_{k-1}) \to x_{k+1}$ définie par

$$0 = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x_{k+1} - x_k). \tag{5.1}$$

   (a) Donner une interprétation géométrique.

   (b) Démontrer que l'erreur $e_k = |x_k - \zeta|$, où ζ est une racine simple de $f(x) = 0$, satisfait

$$e_{k+1} \approx C e_k e_{k-1}, \quad \text{avec} \quad C = \left| \frac{f''(\zeta)}{2f'(\zeta)} \right|.$$

   (c) Déduire de (b) que

$$e_{k+1} \approx D e_k^p, \quad \text{avec} \quad p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \approx 1.618.$$

   (d) Soit $f(x)$ un polynôme, nous avons que le travail pour évaluer $f(x)$ et $f'(x)$ est approximativement le même. Supposons que le coût des opérations d'additions, de soustractions, de multiplications et de divisions sont négligeables par rapport à l'évaluation de $f(x)$. Quelle méthode choisiriez-vous entre la méthode de Newton et la méthode de la sécante (5.1) pour calculer une racine de $f(x)$ à travail égal?

2. Soit $D \subset \mathbf{R}$ et $f : D \to \mathbf{R}^n$ continûment différentiable. Pour un $x_0 \in D$ supposons que $f(x_0) \neq 0$ et que $f'(x_0)$ soit inversible. Montrer que

$$p_0 = -f'(x_0)^{-1} f(x_0)$$

   est la seule direction ayant la propiété suivante:
   Pour toute matrice inversible A, il existe $\lambda_0 > 0$ tel que pour $0 < \lambda < \lambda_0$

$$\|Af(x_0 + \lambda p_0)\|_2 < \|Af(x_0)\|_2 \ .$$

Chapitre VII

Travaux Pratiques

Cet appendice contient une collection de travaux pratiques, dont les thèmes reprennent (dans l'ordre chronologique) les sujets abordés dans le cours. La dernière partie de cet appendice est consacrée à une introduction au language `FORTAN90/95` qui n'a pas, et de loin, la prétention d'être complète.

VII.1 Introduction au FORTRAN 90

1. Le programme ci-dessous évalue la fonction $\sin(x) \cdot x$ en des points équidistants $h = \frac{i}{n}\pi$, où $i = 1, 2, \ldots, 20$ et $n = 20$. Essayer de le comprendre, puis dessiner au moyen de **gnuplot** le graphe $(x_i, f(x_i))$, pour $n = 20, 50$ dans les intervalles $[0, \pi]$ et $[0, 2\pi]$.

```
program eval ! ce programme évalue une fonction
  implicit none
  integer, parameter :: n=20
  integer :: i
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  real(kind=dp), parameter :: pi=3.14159265358979324_dp
  real(kind=dp) :: v,x,rn
  real(kind=dp) :: f
  open (8,file='s1eval.out') ! fichier qui stocke les données
  rn=n
  do i=1,n
     x=(i/rn)*pi
     v=f(x)
     write(8,100) x,v ! écrit (x_i,f(x_i)) s1eval.out
     100 format(2f18.15) ! format des données
  end do
end program eval

function f(x) ! fonction à évaluer
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  real(kind=dp) ::x,f
  f=sin(x)*x
end function
```

2. Ecrire (sur le modèle du programme ci-dessus) un programme qui évalue la fonction

$$f(x) = \begin{cases} 2x & \text{si } 0 \leq x \leq \frac{1}{2} \\ 2 - 2x & \text{si } \frac{1}{2} < x \leq 1 \end{cases}$$

en n points équidistants de $(0, 1)$ (n étant choisi par l'utilisateur). Dessiner les résultats.

3. Ecrire un programme qui détermine le plus petit n tel que $\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k} \geq M$ où M est donné par l'utilisateur. Combien de termes faut-il si $M = 3$? Même question en remplaçant $\frac{1}{k}$ par $\frac{1}{k^2}$ dans la fonction.

VII.2 Intégration par la règle du Trapèze et Simpson

Le programme ci-dessous évalue l'intégrale $\int_0^3 cos(x)e^{sin(x)}$ avec la règle du trapèze. Donner le résultat pour $n = 2, 4, 8, 16, 32$, et dessiner sur une échelle logarithmique l'erreur en fonction du nombre d'évaluations de la fonction. Adapter ensuite ce programme pour la règle de Simpson.

```
program integration ! intégration avec la règle du trapèze
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  integer :: i,n ,...
  real(kind=dp) :: a,b,res,err,...
  open (7,file='trapeze.out')
  a=0._dp
  b=3._dp
  n=1
  call trapeze(a,b,n,res)
  write(7,*) 'n= ',n,' res= ',res ! écrit  dans trapeze.out
subroutine trapeze(a,b,n,res) ! méthode du trapèze
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  integer :: n,i
  real(kind=dp) :: a,b,res,f,h
  h=(b-a)/n
  res=0.5_dp*(f(a)+f(b))
  do i=1,n-1
    res=res+f(i*h)
  end do
  res=res*h
end subroutine trapeze

function f(x) ! fonction à intégrer
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  real(kind=dp) ::x,f
  f=cos(x)*exp(sin(x))
end function
```

VII.3 Calcul de racines par la méthode de la bissection

1. Ecrire un programme qui pour n donné calcule les racines de $P_n(x)$, le $n$ième polynôme de Legendre, en utilisant la méthode de bissection.

   Indications:

   (a) Localiser les racines de $P_n(x)$ en utilisant celles de $P_{n-1}(x)$.

   (b) Si $[a, b]$ est un intervalle avec $P_n(a) \cdot P_n(b) < 0$, poser centre=$\frac{a+b}{2}$, $\mathtt{pa} = P_n(a)$, $\mathtt{pb} = P_n(b)$, $\mathtt{pc} = P_n(\mathtt{centre})$.

   (c) Tant que $P_n(\mathtt{centre}) \neq 0$ et a$\neq$centre et b$\neq$centre, itérer

      i. si $P_n(a) \cdot P_n(\mathtt{centre}) < 0$ poser `b=centre, pb=pc`

      ii. sinon poser `a=centre, pa=pc`

   Pour écrire la `function p(n,x)` qui calcule les polynômes de Legendre $P_n(x)$, utiliser la formule de récurrence pour ces polynômes qui s'écrit

   $$(n + 1)P_{n+1}(x) = (2n + 1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

2. A l'aide du programme obtenu en 1, calculer les poids b_i pour une formule de Gauss d'ordre 30.

VII.4 Wegral: programme d'intégration d'ordre 8

1. Le but de ce tp est d'écrire un programme adaptatif d'intégration numérique basé sur l'algorithme expliqué au cours (I.6). On vous propose d'utiliser la formule de Weddle d'ordre 8 (voir polycopié p.3). Il faut d'abord trouver une méthode emboîtée convenable, par exemple la méthode de Newton d'ordre 4, puis programmer l'algorithme de division. Pour l'erreur sur un sous-intervalle utiliser

   abserr=abs(res-resem),

   où `res` est le résultat obtenu avec la formule de Weddle et `resem` celui obtenu avec la formule emboîtée. Le programme pourrait avoir la structure suivante:

```
program wegral !  programme adaptatif d'intégration
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  integer,parameter :: maxdiv=1000 ! borne les subdivisions
  integer :: ndiv, ...
  real (kind=dp),parameter :: a=...,b=...,tol=10._dp**(-14)
  real(kind=dp) :: centre,errtot,weedabs,...
  ...
! ----- première intégration h=b-a
  ...
  call weddle(.,.,.,.,.)
! ----- l'algorithme de subdivision
  do ndiv=2,maxdiv
! ----- on teste si la précision est suffisante
```

```
    if (errtot <= tol*weedabs) then
      ...
    end if
! ----- on cherche l'erreur maximale
    ...
! ----- on divise l'intervalle où l'erreur est maximale
    centre=
    call weddle(.,centre,.,.,.)
    call weddle(centre,.,.,.,.)
    ...
  end do
  ...
end program wegral

subroutine weddle(a,b,res,abserr,resabs)
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  integer :: i,...
  real(kind=dp) :: a,b,res,resem,abserr,resabs,f,h,...
  real (kind=dp),dimension(4):: poidw
  real (kind=dp),dimension(2):: poidn
  data (poidw(i),i=1,4)/ 4.880952380952380 96E-2_dp,\&
  0.25714285714285712_dp,3.2142857142857 1397E-2_dp,\&
  0.32380952380952382_dp/
  data (poidn(i),i=1,2)/ 0.125_dp,0.375_dp/
  ...
end subroutine weddle

function f(x)
  ...
end function
```

2. Calculer à l'aide de votre programme les intégrales suivantes

$$\int_0^{10} e^{-x^2} dx, \qquad \int_0^1 \sin x^2 dx, \qquad \int_0^1 \cos x^2 dx.$$

3. On sait que

$$\int_{-1}^{3} (1 + ce^{-c^2x^2}) dx \longrightarrow 4 + \sqrt{\pi} \quad \text{pour} \quad c \longrightarrow \infty.$$

Appliquer votre programme à l'intégrale ci-dessus avec plusieurs valeurs de c croissantes ($c = 1, 2, \ldots, 10, \ldots$). Observer et expliquer ce qui se passe.

VII.5 Interpolation

1. Le but de ce tp est d'écrire un programme `newton` qui interpole une fonction donnée grâce au polynôme d'interpolation de Newton. Ensuite, on va évaluer ce polynôme à l'aide de la méthode de Horner (voir exercices théoriques) et calculer l'erreur entre une fonction donnée et son polynôme d'interpolation.

   Remarque: Une façon plus élégante pour définir la précision des variables est d'utiliser un `module`.

   ```
   module accuracy
     integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
   end module accuracy
   ```

   Il suffit d'insérer au début du programme principal ainsi que dans les sous-routines l'instruction `use accuracy` et l'extension `dp` peut être utilisée.

   On vous propose la démarche suivante pour écrire votre programme:

   (a) Ecrire une sous-routine `equidist` ainsi qu'une sous-routine `chebychev` pour calculer des noeuds équidistants et des noeuds de Chebyshev respectivement. La sous-routine `equidist` pourrait avoir la structure suivante:

   ```
   subroutine equidist(a,b,n,grid)
     use accuracy  ! l'extension dp est definie par le module
     implicit none
     real (kind=dp),dimension(0:n) :: grid
     real (kind=dp) :: a, b
     integer :: n
   ```

   (b) Ecrire une sous-routine `diffdiv` qui calcule les différences divisées. Pour cela on a seulement besoin d'un vecteur `dd` pour le résultat. La sous-routine `diffdiv` pourrait avoir la structure suivante:

   ```
   subroutine diffdiv(n,noeuds,dd)
     use accuracy
     implicit none
     real (kind=dp), dimension(0:n) :: dd
     real (kind=dp), dimension(0:n) :: noeuds
     integer :: n
   ```

2. Après avoir écrit le programme `newton`, écrire une fonction `horner` qui évalue ce polynôme à l'aide de la méthode de Horner. La sous-routine `horner` pourrait avoir la structure suivante:

   ```
   function horner(n,dd,noeuds,x)
     use accuracy
     implicit none
     real (kind=dp) :: horner
     real (kind=dp) :: x
     real (kind=dp),dimension(0:n) :: dd, noeuds
     integer :: n
   ```

3. En utilisant `gnuplot` vérifier votre programme en dessinant les fonctions ci-dessous ainsi que leurs polynômes d'interpolation.

$$\begin{array}{ll} \sin x, & x \in [0,\ 5\pi], \\ \frac{1}{1+25x^2}, & x \in [-1,\ 1], \\ e^{-1/(1+x^2)}, & x \in [-4,\ 4], \\ e^{-x^2}, & x \in [-4,\ 4]. \end{array}$$

4. Ecrire une sous-routine qui calcule l'erreur maximale

$$\max_{x_i} |f(x_i) - p(x_i)| \quad i = 0, 1, \ldots, m,$$

sur une grille de m points donnés. Tester cette sous-routine sur les fonctions ci-dessus.

VII.6 Interpolation et erreur

Ecrire un programme qui, pour une fonction donnée, calcule ses polynômes d'interpolations (pour des points équidistants et pour les points de Chebyshev), ainsi que l'erreur dans les différentes normes suivantes:

$$\begin{array}{l} \|f-p\|_\infty = \max_{x\in[a,b]} |f(x)-p(x)| \text{ norme maximale,} \\ \|f-p\|_{L^1} = \int_a^b |f(x)-p(x)| \text{ norme } L^1, \\ \|f-p\|_{L^2} = \left(\int_a^b |f(x)-p(x)|^2\, dx\right)^{1/2} \text{ norme } L^2. \end{array}$$

Pour cela il faudra utiliser le programme d'intégration `wegral` ainsi que les programmes d'interpolations du tp précédent.

1. Il sera utile de pouvoir passer une sous-routine comme argument d'une fonction en utilisant l'instruction `external`. Par exemple la fonction `fmax`, qui calcule le maximum de `fcn` (sous-routine) sur un intervalle $[a, b]$

```
function fmax(fcn,a,b,m)
  use accuracy
  implicit none
  integer :: m
  real (kind=dp) :: a,b
  external fcn
  real (kind=dp) :: fmax,...
  ...
  call fcn(fmax,a)
  ...
end function fmax
```

a comme argument la sous-routine `fcn`

```
subroutine fcn(x,fx)   ! fx=f(x)
...
```

Compléter cette fonction `fmax`, nécessaire pour le calcul de l'erreur dans la norme maximale.

2. Ecrire des sous-routines `errequ` et `errch` qui déterminent l'erreur $|f(x) - p(x)|$ (au point x) entre f et ses polynômes d'interpolation p (basé respectivement sur des points équidistants et sur les points de Chebyshev).

```
subroutine errequ(x,e) ! evalue e=|f(x)-p(x)|
  use accuracy
  use equi
  implicit none
  real (kind=dp) :: e
  real (kind=dp) :: x
...
end subroutine errequ
```

Cette sous-routine va faire appel à la fonction `horner`. Pour pouvoir utiliser les paramètres de la fonction `horner` sans les passer comme arguments, on peux utiliser un `module`. En définissant

```
module equi
  use accuracy
  real (kind=dp),dimension(:),allocatable :: noeuds, dd
  integer :: n
end module equi
```

et par l'instruction `use equi` dans la sous-routine `errequ`, les variables contenues dans le module `equi` sont visibles et utilisables dans cette sous-routine. Ces variables sont les mêmes que dans le programme `newton` si l'on ajoute dans ce dernier l'instruction `use equi` (elles n'ont alors plus besoin d'être définies dans le programme `newton`). De même, on utilisera pour la sous-routine `errch` un module similaire.

3. Modifier le programme `wegral` (VII.4) pour en faire une fonction

```
function wtegral(fcn,a,b,tol)
  implicit none
  integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
  real (kind=dp) :: a,b,tol
  real (kind=dp) :: wtegral
  external fcn
```

4. Finalement, modifier le programme `newton` pour en faire un programme qui, pour une fonction donnée, calcule ses polynômes d'interpolation (pour des points équidistants et pour les points de Chebyshev), ainsi que l'erreur dans les différentes normes du début de l'énoncé. Appliquer votre programme aux fonctions de la série 4 et donner les différentes erreurs pour des polynômes jusqu'au degré 20.

VII.7 Résolution d'équations différentielles et calcul de la trajectoire des planètes

1. On aimerait résoudre l'équation différentielle

$$\begin{array}{rclcrcl} y_1' & = & y_2 & & y_1(0) & = & 0 \\ y_2' & = & -y_1 & & y_2(0) & = & 1 \end{array}$$

   dans $[0, \frac{\pi}{4}]$ avec les méthodes d'Euler et de Runge (voir le cours). Donner les résultats numériques et calculer l'erreur en $x = \frac{\pi}{4}$ (on connaît la solution exacte de cette équation différentielle). Pour cela il faudra écrire des sous-routines Euler et Runge.

```
subroutine euler(n,fcn,y,x,xend,npas)
...
subroutine runge(n,fcn,y,x,xend,npas)
...
! n dimension du système
! npas le nombre de pas dans l'intervalle [x,xend]
! fcn la sous-routine qui contient la fonction y'=fcn(x,y)
! y vecteur qui contient les valeurs initiales à l'entrée
!                         les valeurs y(xend) à la sortie
```

   Résoudre ensuite à l'aide de votre programme l'équation différentielle de Ricatti (1712)

$$y' = x^2 + y^2, \qquad y(0) = 0, \qquad y(\frac{1}{2}) = ?$$

   Combien d'évaluations de la fonction sont nécessaires pour arriver à une précision de 6 chiffres, respectivement pour la méthode d'Euler et de Runge ?
   Remarque: Cette équation différentielle ne possède pas de solution élémentaire.
   Résultat (solution de référence): $y(\frac{1}{2}) = 0.041791146154681863220768.$

2. Ecrire une sous-routine

```
subroutine rk4(n,fcn,y,x,xend,h,tol)
```

   qui permet la résolution d'un système d'équations différentielles à l'aide de pas variables. On veut que le programme puisse choisir le pas d'intégration h afin que l'erreur locale soit partout environ égale à la tolérance tol, fournie par l'utilisateur. Prenez la méthode Runge-Kutta $3/8$ avec la méthode emboîtée vue au cours.

   Tester votre programme sur les équations différentielles ci-dessus.

3. Utiliser vos programmes pour calculer la position autour du soleil des 5 planètes Jupiter, Saturne, Uranus, Neptune, Pluton en septembre 2004. Effectuer des calculs avec différents pas et différentes tolérances et observer la convergence.
   La loi de Newton $f = ma$ conduit aux équations du mouvement suivantes

$$q_k'' = -G \sum_{j=0, j\neq k}^{5} \frac{m_j (q_k - q_j)}{\|q_k - q_j\|^3}$$

où les $q_j \in I\!R^3$ représentent la position des planètes et du soleil, q_j'' leurs accélérations et $G = 2.95912208286 \cdot 10^{-4}$ la constante de gravitation. Les valeurs initiales du problème calculées le 5 septembre 1994 sont données par le tableau ci-dessous, pour le soleil $q_0(t_0) = (0,0,0)$, $q_0'(t_0) = (0,0,0)$. Les unités de masse choisies sont des unités relatives au soleil. Pour celui-

TAB. VII.1 – *Valeurs initiales pour le système solaire*

planète	masse	position initiale	vitesse initiale
Jupiter	$m_1 = 0.000954786104043$	-3.5023653 -3.8169847 -1.5507963	0.00565429 -0.00412490 -0.00190589
Saturne	$m_2 = 0.000285583733151$	9.0755314 -3.0458353 -1.6483708	0.00168318 0.00483525 0.00192462
Uranus	$m_3 = 0.0000437273164546$	8.3101420 -16.2901086 -7.2521278	0.00354178 0.00137102 0.00055029
Neptune	$m_4 = 0.0000517759138449$	11.4707666 -25.7294829 -10.8169456	0.00288930 0.00114527 0.00039677
Pluton	$m_5 = 1/(1.3 \cdot 10^8)$	-15.5387357 -25.2225594 -3.1902382	0.00276725 -0.00170702 -0.00136504

ci on a encore rajouté les masses des planètes proches, ainsi $m_0 = 1.00000597682$. Les distances sont en unités astronomiques 1 [A.U.] $= 149\,597\,870$ [km] et le temps est compté en jours terrestres. Calculer la solution pour $t_{end} = 3652$.
Remarque: Pour appliquer votre programme à cet exemple il faudra transformer l'équation différentielle en une équation du premier ordre.

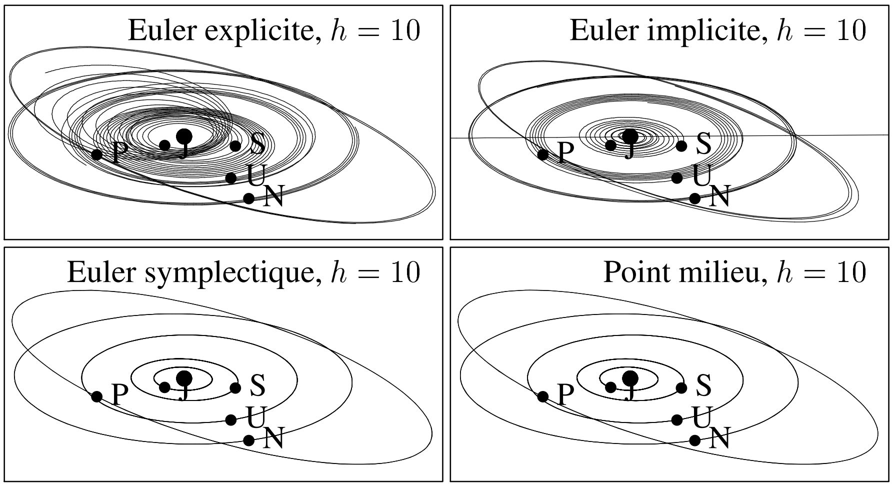


FIG. VII.1 – *Solutions du mouvement des planètes par différentes méthodes pour de longs intervalles de temps*

VII.8 Décomposition LR

1. En utilisant l'algorithme d'élimination de Gauss avec recherche de pivot résoudre le système linéaire
$$Ax = b, \tag{8.1}$$
où A est une matrice carrée.

Pour cela, écrire une sous-routine de la forme

```
subroutine dec(n,A,ip)
  use accuracy
  ...
  integer, dimension(n) :: ip
  real (kind=dp),dimension(n,n) :: A
```

qui effectue la décomposition $PA = LR$, où P est une matrice de permutation, L une matrice triangulaire inférieure et R une matrice triangulaire supérieure.
Les paramètres sont : `n` = dimension de la matrice; `A` = la matrice en entrée/sortie; `ip` = le vecteur de permutation (`ip(k)` = index de la ligne du k$^{\mathrm{e}}$ pivot).

Ecrivez ensuite une sous-routine de la forme

```
subroutine sol(n,A,b,ip)
   use accuracy
   ...
   integer, dimension(n) :: ip
   real (kind=dp),dimension(n) :: b
   real (kind=dp),dimension(n,n) :: A
```

qui étant donné la matrice `A` obtenue par `dec`, résoud le système (1). La solution du problème se trouvera dans le vecteur `b`.

2. Ecrire un programme qui permet de résoudre $Ax = b$ et testez-le sur les exemples ci-dessous.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2^{-1} & 2^{-2} & 2^{-3} \\ 1 & 3^{-1} & 3^{-2} & 3^{-3} \\ 1 & 4^{-1} & 4^{-2} & 4^{-3} \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \quad \text{résultat:} \begin{pmatrix} 10 \\ -35 \\ 50 \\ -24 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Remarque: En utilisant les instructions `allocate(A(ndim,ndim),...)` on peut utiliser les mêmes tableaux pour des matrices (vecteurs) de dimensions différentes. Il suffit d'écrire `deallocate(A,..)` puis `allocate(A(ndim2,ndim2),...)`.

VII.9 Décomposition QR et trajectoire d'un astéroïde

Pour résoudre un système surdéterminé

$$Ax = b, \quad x \in I\!\!R^n, \quad b \in real^m, \quad m \geq n,$$

une méthode efficace (voir le cours) est d'utiliser la décomposition QR de la matrice A. On vous propose dans la première partie de ce tp d'écrire un programme effectuant cette décomposition. Dans une deuxième partie on traitera un problème surdéterminé de façon complète (estimation de l'erreur, test de confiance du modèle).

1. Pour effectuer la décompostiton QR, on utilise (voir cours) l'algorithme de Householder - Businger - Golub. On commence par écrire une sous-routine `decqr`

   ```
   subroutine decqr(m,n,A,alpha)
     use accuracy
     implicit none
     integer :: m,n,...
     real (kind=dp),dimension(n) :: alpha
     real (kind=dp),dimension(m,n) :: A
     ...
   ```

   qui effectue la décomposition QR d'une matrice A possèdant m lignes et n colonnes. Cette sous-routine doit retourner la matrice A modifiée comme suit:

   (a) les vecteurs $v_i \in I\!\!R^{m-i+1} \quad i = 1, \ldots, n$ (voir cours), dans la partie “triangulaire” inférieure de la matrice A,

   (b) la matrice triangulaire R (**sans** les α_i) dans la partie “triangulaire” supérieure de la matrice A.

   La diagonale de la matrice triangulaire R (les α_i) est stockée dans le vecteur `alpha`. On vous conseille de faire un schéma de la matrice A à la sortie, pour illustrer la description ci-dessus.

2. Ecrivez ensuite une sous-routine `solqr` qui calcule $Q^T b$ ainsi que la solution du système triangulaire $Rx = c$.

   ```
   subroutine solqr(m,n,a,alpha,b)
     use accuracy
     implicit none
     integer :: m,n,...
     real (kind=dp),dimension(n) :: alpha
     real (kind=dp),dimension(m) :: b
     real (kind=dp),dimension(m,n) :: A
     ...
   ```

   Pour réaliser la multiplication $Q^T b$, on effectue les multiplications successives $H_i b \quad i = 1, \ldots, n$ de la même façon que l'on a effectué les multiplications $H_i A$ pour la décomposition QR ($H_n \cdot \ldots \cdot H_2 H_1 = Q^T$).

   Remarque. On ne demande pas de traiter le cas où les colonnes de A seraient linéairement dépendantes.

3. Ecrire un programme qui permet de résoudre $Ax = b$ à l'aide de la décomposition QR et testez-le sur l'exemple ci-dessous pour lequel la solution se calcule facilement (faire un dessin). Vous pouvez aussi tester votre programme sur les exemples de la série 7.

$$\begin{array}{rcrl} \text{x} & + & 2\text{y} & = 1 \\ 3\text{x} & + & 4\text{y} & = 2 \\ 5\text{x} & + & 6\text{y} & = 3 \end{array}$$

4. Afin d'effectuer une estimation de l'erreur (pour des observations donnant lieu à un système surdéterminé) on doit calculer $diag(A^TA)^{-1}$ (voir cours). On remarque que

$$(A^TA) = (R^TR),$$

où R est la matrice triangulaire supérieure obtenue par la décomposition QR (à laquelle on a rajouté la diagonale "`alpha(i)`". On peut alors calculer $diag(A^TA)^{-1}$ en résolvant successivement les systèmes linéaires (pour $i = 1, \ldots, n$)

$$\begin{aligned} R^Tc = &\; e_i, \quad \text{où} \quad e_i = (0, \ldots, 1, \ldots, 0)^T \text{ ième vecteur de base de } I\!R^n, \\ Rx = &\; c. \end{aligned}$$

5. (*Sur les traces de Gauss*)
Un astéroïde en orbite autour du soleil a pu être observé pendant quelques jours avant de diparaître. Voici 10 observations:

$x_{i=1,\ldots,5}$	-1.024940	-0.949898	-0.866114	-0.773392	-0.671372
$x_{i=6,\ldots,10}$	-0.559524	-0.437067	-0.302909	-0.155493	-0.007464
$y_{i=1,\ldots,5}$	-0.389269	-0.322894	-0.265256	-0.216557	-0.177152
$y_{i=6,\ldots,10}$	-0.147582	-0.128618	-0.121353	-0.127348	-0.148885

On veut calculer sa trajectoire à partir de ces observations, afin de pouvoir prédire l'instant où son orbite sera à nouveau visible. On suppose un modèle ellipsoïdal pour l'orbite

$$x^2 = ay^2 + bxy + cx + dy + e.$$

Cela conduit à un système surdéterminé que l'on résoud par les "moindres carrés" pour déterminer a, b, c, d, e. Faire ensuite une estimation de l'erreur ainsi qu'un test de confiance du modèle.

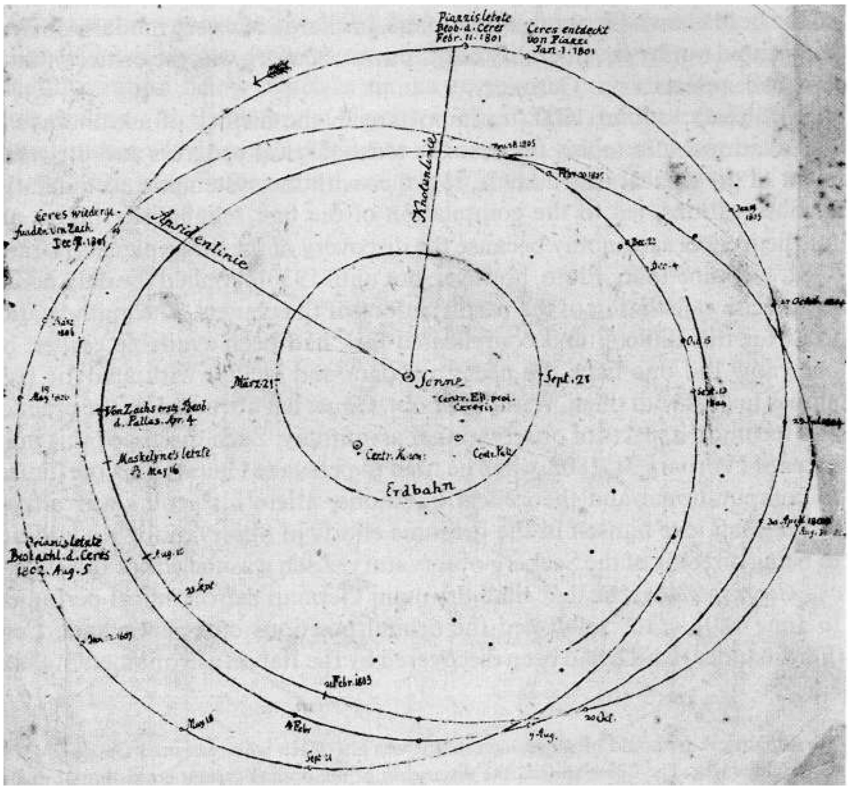
Faire la même étude pour le modèle parabolique

$$x^2 = ay + e.$$

Quelle est la trajectoire la plus probable ?

En janvier 1801, l'astronome italien G.Piazzi découvre une nouvelle planète *Ceres* (entre Mars et Jupiter), et observe son orbite pendant quelques jours, avant que celle-ci ne disparaisse. Tous les astronomes de l'époque s'attendent à ce que cette planète réaparaisse à la fin de l'année 1801 où au début de l'année 1802. Une grande effervescence habite le monde scientifique européen et plusieurs prédictions quant à la trajectoire de l'orbite sont effectuées.

Le 29 septembre 1801, un jeune mathématicien allemand (alors peu connu), du nom de C.F. Gauss, publie une trajectoire qui diffère sensiblement des autres prévisions, utilisant notamment sa méthode des "moindres carrés", Le 7 décembre 1801, Zach, un des astronomes les plus connus d'Allemagne, redécouvre la planète sur la trajectoire prévue par Gauss. Ce résultat publié en février 1802 dans les *Monatliche Correspondenz* fait de Gauss une célébrité européenne.



Esquisse de Gauss des orbites de Ceres et Pallas (planète découverte en 1802). Tiré de W.K. Bühler: *Gauss, a biographical study.*

VII.10 FORTRAN 90/95

Le `Fortran90` est la nouvelle version du language de programmation `Fortran77`, largement utilisé pour les calculs scientifiques. Les instructions de `Fortran77` sont pour la plupart encore valables en `Fortran90`.

Compiler

L'extension pour un programme en Fortran 90 est ".f90". Pour compiler un programme taper `f90 nom.f90` et ensuite `a.out` pour l'exécuter.

Découpage des lignes en zones

La longueur de la ligne est de 132 caractères, et commence dès la première colonne. Tout ce qui est à droite d'un "!" est en commentaire. Pour continuer une ligne sur la ligne suivante, terminer la première par un "&". Pour écrire plusieurs instructions sur une même ligne, les séparer par des ";".

Structure d'un programme

```
program exemple
  zone de déclaration des variables
  ...
  instructions exécutables
  ...
end program exemple

subroutine et function
  ...
```

Un programme peut appeler des sous-programmes qui sont des `subroutine` ou des `function`. Voir la série 1 pour des exemples de la structure et de l'utilisation des sous-routines et des fonctions.

Types de données

`Fortran90` contient 5 types intrinsèques:

1. **Types numériques:** `integer`, `real` et `complex`.

2. **Types non numériques:** `character` et `logical`.

Il est possible de définir de nouveaux types de données à partir des types intrinsèques. Aux 5 types intrinsèques sont associés un entier non négatif appelé le **"kind type parameter"** (dépend du système et indique en général le nombre de bytes utilisés pour stocker une valeur). Quand celui-ci n'est pas spécifé, c'est la valeur par défaut qui est utilisée.

Exemples:

1. `real (kind=8) :: x!` x est de type réel double précision sur sun (ultra), simple précision sur Cray. La double précision correspond à un type prédéfini qui donne environ 15 chiffres significatifs, la simple précision où précision réelle par défaut en donne environ 7.

2. `integer, parameter:: dp=kind(1.d0)` ! le paramètre `dp` (constante littérale) prend la valeur de kind qui correspond à la double précision.
   `real (kind=dp) :: x` ! x est de type réel double précision (défini ci-dessus)

3. `real :: x` ! x est de type réel par défaut (simple précision)

4. `integer, parameter:: q=select_real_kind(15,60)` ! choisi `q` de sorte que `real (kind=q)` possède au moins 15 chiffres significatifs et une étendue égale où supérieure à $10^{-60}, 10^{60}$ (pour autant que le compilateur en question supporte cette précision). C'est donc une façon indépendante du compilateur de définir des sous-types numériques.

5. ```
   1234 ! constante de type ``entier''
   1234. ! constante de type ``réel''
   1234._dp! constante de type ``dp'' (préalablement défini)
   ```

Entrées et Sorties

1. `read(5,*) x` ! lit un caractère et l'assigne à la variable `x`. L'étiquette 5 indique que le caractère est lu du clavier.

2. `read(8,*) x` ! comme ci-dessus, sauf que l'étiquette 8 indique que le caractère est lu dans le fichier avec l'étiquette 8 (la lecture se fait de façon séquentielle en commençant par la première valeur du fichier).

3. `write(6,*) x` ! écrit le contenu de la variable x à l' écran

4. `write(8,*) x` ! écrit le contenu de la variable x dans le fichier avec l'étiquette 8

5. `write(6,*) 'valeur de x'` ! écrit les charactères entre apostrophes à l'écran

Remarque: L'étoile * (format par défaut) dans la description ci-dessus peut-être remplacée par un descripteur de format (voir les sorties formatées).

Affectation des variables

L'opération d'affectation des variables est la suivante:
variable réceptrice=expression source

Déclaration de paramètres et initialisations

1. `integer, parameter:: n=20` ! défini un paramètre entier et lui assigne la valeur 20. Cette assignation est définitive et ne peut plus être changée dans le programme.

2. `real(kind=dp) :: rn=20` ! défini une variable `rn` réelle de type `dp` et lui donne `20` comme valeur initiale. Cette assignation peut-être changée dans le programme. On peut aussi déclarer `rn` comme variable `real(kind=dp)` et l'initialiser dans le programme.

Opérateurs et fonctions

+ , - , * , / , ** (exponentiation)
`abs(x)` (valeur absolue), `sin(x), cos(x), sqrt(x)` (racine carrée), etc.
   ```

Opérations arithmétiques

Lors de calculs arithmétiques avec des constantes où des variables, il est souvent dangereux de mélanger dans une même expression plusieurs types numériques. Pour l'assignation

```
variable=expression,
```

où `variable` est une variable numérique et `expression` est une expression numérique, si `expression` n'est pas du même type que `variable`, `expression` va être converti dans le type de `variable`. Cette conversion peut donner lieu à des pertes de précision. Lors d'opérations arithmétiques mélangeant plusieurs types numériques, les "types moins précis" sont convertis dans le "type le plus précis" de l'expression.

Exemples:

1.
```
integer :: i,j
integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
real(kind=dp) :: a,b
a=1;b=3;i=1;j=3
write(6,*) a/b,a/j,i/j
real(kind=dp) :: a,b
```

   résultats: `0.33333333333333331, 0.33333333333333331, 0`

   Pour `a/b` les entiers sont convertis en `dp` (de façon exacte) et le calcul est effectué en precision `dp`. Pour `a/j` le contenu de la variable entière `i` est converti (de façon exacte) en `dp` et le calcul est effectué en precision `dp`. Pour `i/j` le calcul est fait en division entière et le résultat est faux.

2.
```
integer, parameter :: dp=kind(1.d0)
real(kind=dp) :: a,b
a=1.123456789;b=1.123456789_dp
write(6,*) a,b
write(6,*) a/b,a-b
a=1.123456789_dp;b=1.123456789
write(6,*) a/b,a-b
a=1.123456789_dp;b=1.123456789_dp
write(6,*) a/b,a-b
```

   résultats: `1.1234568357467651, 1.123456789`
```
1.0000000416097581, 4.67467651255049077E-8
0.99999995839024369, -4.67467651255049077E-8
1., 0.E+0
```

L'expression `a=1.123456789` mélange le mode réel `dp` pour `a` et le mode réel simple précision (précision réelle par défaut) pour la constante `1.123456789`. Lors de la conversion on perd 3 chiffres significatifs. Ceci explique pourquoi toutes les opérations arithmétiques ci-dessus mélangeant plusieurs types numériques (excepté la dernière) donnent des résultats faux.

Les sorties formatées

Exemples:

1. `write(6,i5) 123456` ! écrit l'entier 123456 ("i" pour "integer") dans un champ de 5 charactères

2. `write(6,f10.5) 1.23456` ! écrit le réel 1.23456 dans un champ de 10 charactères dont 5 sont réservés pour la partie décimale.

Ces instructions peuvent également s'écrire

1. ```
   write(6,100) 123456
   100 format(i5)
   ```

2. ```
   write(6,100) 1.23456
   100 format(f10.5)
   ```

Remarque: L'étiquette 6 dans la description ci-dessus peut-être remplacée par un label indiquant une autre sortie, par exemple une sortie fichier (voir "fichiers").

Les fichiers

Ecriture des résultats dans un fichier:

```
open(8,file='fich1')
```

ouvre un fichier fich1 et lui assigne l'étiquette 8

```
write(8,*) a
```

écrit dans le fichier avec l'étiquette 8 la valeur de a

```
read(8,*) a
```

lit dans le fichier avec l'étiquette 8 la valeur de a.

Remarque: Le format par défaut dans la description ci-dessus peut-être remplacé par un format spécifié par l'utilisateur (voir "sorties formatées").

Structures de contrôles

1. `if` (expression-logique) `then`
   traitements
   `else`
   traitements
   `end if`

2. `do` variable=i,n,m
   traitements
   `end do`
   où i,n,m sont des entiers. La boucle se fait de i à n avec un pas m.

3. `do while` (expression-logique)
   traitements
   `end do`

Les opérateurs de comparaison

$>$: plus grand que;
$>=$: plus grand ou égal à;
$==$: égal;
$/=$: différent de;
$<=$: plus petit ou égal à;
$<$: plus petit que.

Les tableaux

Exemple de déclaration:

```
real,dimension(2,3):: tabr1,tabr2
```

déclare un tableau 2×3 à valeurs réelles.

Remarque: Il est permis de créer des nouveaux tableaux à l'intérieur des fonctions et des sous-routines.

Allocation dynamique:

Pour déclarer un tableau à deux dimensions, mais dont la taille n'est pas connue au début du programme:

```
real,dimension(:,:),allocatable:: tabdyn1
```

et plus loin dans le programme:

```
n1=4;n2=8
allocate(tabdyn(n1,n2))
```

Références

1. *Programmer en Fortran 90* de Claude Delannoy.
2. *Fortran 90 explained* de M.Metcalf et J.Reid.
3. Et sur l'internet:
4. www-curri.u-strasbg.fr/DOCtechnique/fortran.htm
5. http://perso.wanadoo.fr/jean-pierre.moreau/fortran.html
6. http://csep1.phy.ornl.gov:80/CSEP/PL/PL.html
7. http://www.psc.edu/ burkardt/src/f_src.html