Corrigé du test de Calcul Scientifique

Pierre WERNY

16 mai 2014

EXERCICE I

1. Type de la méthode itérative

La méthode itérative étudiée nécessite uniquement des évaluations de f et de f' aux points x et $y(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$, il s'agit donc d'une méthode à deux points sans mémoire.

On pose pour $k \in \{2, 3, 4\}$

$$c_k = \frac{1}{k!} \frac{f^{(k)}(x^*)}{f'(x^*)}$$

soit

$$c_2 = \frac{1}{2} \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}, \quad c_3 = \frac{1}{6} \frac{f'''(x^*)}{f'(x^*)}, \quad c_4 = \frac{1}{4!} \frac{f^{(4)}(x^*)}{f'(x^*)}$$

2. Expression de $\dfrac{f(x^* + h)}{f'(x^* + h)}$ et de A

f étant de classe C^4 sur U, on peut écrire les développements suivants

$$f(x^*+h) = hf'(x^*)+\frac{h^2}{2}f''(x^*)+\frac{h^3}{3!}f'''(x^*)+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x^*)+o(h^4) = hf'(x^*)\Big(1+c_2h+c_3h^2+c_4h^3+o(h^3)\Big)$$

et

$$f'(x^*+h) = f'(x^*)+hf''(x^*)+\frac{h^2}{2}f'''(x^*)+\frac{h^3}{3!}f^{(4)}(x^*)+o(h^4) = f'(x^*)\Big(1+2c_2h+3c_3h^2+4c_4h^3+o(h^3)\Big)$$

On en déduit

$$\begin{aligned}
\frac{f(x^* + h)}{f'(x^* + h)} &= h\frac{1 + c_2h + c_3h^2 + c_4h^3 + o(h^3)}{1 + 2c_2h + 3c_3h^2 + 4c_4h^3 + o(h^3)} \\
&= h\Big(1 + c_2h + c_3h^2 + c_4h^3 + o(h^3)\Big)\Big(1 - 2c_2h - 3c_3h^2 - 4c_4h^3 + (2c_2h + 3c_3h^2)^2 - 8{c_2}^3h^3 + o(h^3)\Big) \\
&= h\Big(1 + c_2h + c_3h^2 + c_4h^3 + o(h^3)\Big)\Big(1 - 2c_2h - 3c_3h^2 + 4c_2^2h^2 - 4c_4h^3 - 8c_2^3h^3 + 12c_2c_3h^3 + o(h^3)\Big) \\
&= h\Big(1 - c_2h + Ah^2 + Bh^3 + o(h^3)\Big)
\end{aligned}$$

avec

$$A = c_3 - 2c_2^2 - 3c_3 + 4c_2^2 = 2(c_2^2 - c_3)$$

et

$$B = -3c_4 - 4c_2^3 + 7c_2c_3$$

<u>NB</u> : Il n'est nullement demandé de calculer B. On verra par la suite que la connaissance de l'expression explicite de B n'est pas utile.

3. Développement limité de $f(y(x^*+h))$ à l'ordre 4

$$\begin{aligned}
f\Big(y(x^*+h)\Big) &= f\left(x^*+h-\frac{f(x^*+h)}{f'(x^*+h)}\right)\\
&= f\Big(x^*+h-h+c_2h^2-Ah^3-Bh^4+o(h^4)\Big)\\
&= f\Big(x^*+c_2h^2-Ah^3-Bh^4+o(h^4)\Big)\\
&= \Big(c_2h^2-Ah^3-Bh^4\Big)f'(x^*)+\frac{\Big(c_2h^2-Ah^3-Bh^4\Big)^2}{2!}f''(x^*)+o(h^4)\\
&= c_2f'(x^*)h^2-Af'(x^*)h^3+\Big(\frac{c_2^2}{2}f''(x^*)-Bf'(x^*)\Big)h^4+o(h^4)\\
&= f'(x^*)\Big(c_2h^2-Ah^3+(c_2^3-B)h^4\Big)+o(h^4)\\
&= f'(x^*)h^2\Big(c_2-Ah+(c_2^3-B)h^2+o(h^2)\Big)
\end{aligned}$$

4. Développement limité de $D=2f(y(x^*+h))-f(x^*+h)$ à l'ordre 4

On en déduit le développement limité de D

$$\begin{aligned}
D &= 2f(y(x^*+h))-f(x^*+h)\\
&= 2f'(x^*)\Big(c_2h^2-Ah^3+(c_2^3-B)h^4\Big)-f'(x^*)\Big(h+c_2h^2+c_3h^3+c_4h^4\Big)+o(h^4)\\
&= f'(x^*)\Big(-h+c_2h^2-(2A+c_3)h^3+(2c_2^3-2B-c_4)h^4\Big)+o(h^4)\\
&= -f'(x^*)h\Big(1-c_2h+(2A+c_3)h^2-(2c_2^3-2B-c_4)h^3+o(h^3)\Big)
\end{aligned}$$

5. Développement limité du quotient à l'ordre 4

On cherche à calculer un développement limité de $Q=\dfrac{N}{D}$ avec $N=\Big(y(x^*+h)-(x^*+h)\Big)f\Big(y(x^*+h)\Big)$

$$y(x^*+h)-(x^*+h)=-\frac{f(x^*+h)}{f'(x^*+h)}=-h\Big(1-c_2h+Ah^2+Bh^3+o(h^3)\Big)=-h\Big(1-c_2h+Ah^2+o(h^2)\Big)$$

$$\begin{aligned}
N &= -f'(x^*)h^3\left[\Big(1-c_2h+Ah^2+o(h^2)\Big)\Big(c_2-Ah+(c_2^3-B)h^2+o(h^2)\Big)\right]\\
&= -f'(x^*)h^3\Big(c_2-Ah+(c_2^3-B)h^2-c_2^2h+Ac_2h^2+Ac_2h^2+o(h^2)\Big)\\
&= -f'(x^*)h^3\Big(c_2-(A+c_2^2)h+(c_2^3+2Ac_2-B)h^2\Big)+o(h^5)
\end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned}
Q=\frac{N}{D} &= \frac{-f'(x^*)h^3}{-f'(x^*)h}\times\frac{c_2-(A+c_2^2)h+(c_2^3+2Ac_2-B)h^2+o(h^2)}{1-c_2h+(2A+c_3)h^2+o(h^2)}\\
&= h^2\Big(c_2-(A+c_2^2)h+(c_2^3+2Ac_2-B)h^2+o(h^2)\Big)\Big(1+c_2h-(2A+c_3)h^2+c_2^2h^2+o(h^2)\Big)\\
&= h^2\Big(c_2+c_2^2h-(2A+c_3)c_2h^2+c_2^3h^2-(A+c_2^2)h-(A+c_2^2)c_2h^2+(c_2^3+2Ac_2-B)h^2+o(h^2)\Big)\\
&= h^2\Big(c_2-Ah+h^2(-2Ac_2-c_3c_2+c_2^3-Ac_2-c_2^3+c_2^3+2Ac_2-B)+o(h^2)\Big)\\
&= h^2\Big(c_2-Ah+h^2(c_2^3-c_3c_2-Ac_2-B)+o(h^2)\Big)\\
&= c_2h^2-Ah^3+(c_2^3-c_3c_2-Ac_2-B)h^4+o(h^4)
\end{aligned}$$

6. Développement limité de $F(x^* + h)$ à l'ordre 4

On en déduit

$$\begin{aligned} F(x^* + h) &= x^* + h - h + c_2h^2 - Ah^3 - Bh^4 - c_2h^2 + Ah^3 + Bh^4 + Ac_2h^4 + c_3c_2h_c^4 - 2^3h^4 + o(h^4) \\ &= x^* + c_2h^4\Big(A + c_3 - c - 2^2\Big) + o(h^4) \qquad\qquad \text{avec } \ A = 2\Big(c_2^2 - c_3\Big) \\ &= x^* + c_2\Big(c_2^2 - c_3\Big)h^4 + o(h^4) \end{aligned}$$

Le développement limité de F en x^* ne comportant pas de termes du premier ordre, x^* est un point hyperattractif de la méthode itérative donnée par F et la méthode est bien évidemment convergente.

7. Etude de l'ordre et de l'indice d'efficacité de la méthode itérative F

La méthode est **d'ordre 4** si $c_2 \neq 0$ et $c_2^2 - c_3 \neq 0$ cad si $f''(x^*) \neq 0$ et $\dfrac{1}{4}\left(\dfrac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right)^2 \neq \dfrac{1}{6}\dfrac{f'''(x^*)}{f'(x^*)}$ soit (on rappelle que $f'(x^*) \neq 0$, x^* étant un zéro simple de f)

$$f''(x^*) \neq 0 \qquad \text{et} \qquad \Big(f''(x^*)\Big)^2 \neq \frac{2}{3}f'''(x^*)f'(x^*)$$

L'indice d'efficacité I de la méthode vaut $I = \rho^{\frac{1}{\sigma}}$ où ρ désigne l'ordre de la méthode (4 dans notre cas) et σ le nombre d'évaluations de fonction par itérations soit 3 dans notre cas (f en x, f' en x et f en $y(x)$). On en déduit

$$I = \sqrt[3]{4} \qquad \text{et} \qquad \rho_{opt} = 2^{\sigma-1} = 2^2 = 4 = \rho$$

La méthode étudiée est dite optimale.

EXERCICE II

Préambule

1. et 2. Etude de la formule de quadrature

Soit $u(x)$ un polynôme de degré inférieur à deux, u s'écrit sous la forme $u(x) = ax^2 + bx + c$ avec a, b,c réels.

$$\int_0^1 u(x)dx = \int_0^1 (ax^2 + bx + c)\ dx = \frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c$$

et

$$\alpha u(0) + \beta u(\gamma) = \alpha c + \beta\gamma^2 a + \beta\gamma b + \beta c$$

Pour que l'égalité $\int_0^1 u(x)dx = \alpha u(0) + \beta u(\gamma)$ soit réalisée pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à deux, il faut que

$$\forall (a, b, c) \in \mathbb{R}^3, \quad \frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = \alpha c + \beta\gamma^2 a + \beta\gamma b + \beta c$$

ce qui donne par identification le système suivant

$$\begin{cases} \beta\gamma^2 = \dfrac{1}{3} \\ \beta\gamma = \dfrac{1}{2} \\ \alpha + \beta = 1 \end{cases}$$

Ce système admet une unique solution $(\alpha, \beta, \gamma) = \left(\dfrac{1}{4}, \dfrac{3}{4}, \dfrac{2}{3}\right)$

3. Première approximation

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx$$

En effectuant le changement de variable $x = x_n + th_n$, on obtient

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + h_n\int_0^1 y'(x_n + th_n)dt$$

soit, en utilisant l'approximation précédente pour $g = y'$

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + h_n \left[\frac{1}{4} y'(x_n) + \frac{3}{4} y'(x_n + \frac{2}{3} h_n) \right]$$

soit

$$y(x_{n+1}) \approx y(x_n) + h_n \left[\frac{1}{4} f\Big(x_n, y(x_n)\Big) + \frac{3}{4} f\Big(x_n + \frac{2}{3} h_n, y(x_n + \frac{2}{3} h_n)\Big) \right]$$

4. Seconde approximation

Si on considère en plus l'approximation du premier ordre

$$y\Big(x_n + \frac{2}{3} h_n\Big) \approx y(x_n) + \frac{2}{3} h_n y'(x_n) \approx y(x_n) + \frac{2}{3} h_n f\Big(x_n, y(x_n)\Big)$$

On obtient bien le schéma associé à la fonction Φ définie par

$$\Phi(x, y, h) = \frac{1}{4} f(x, y) + \frac{3}{4} f\Big(x + \frac{2}{3} h, y + \frac{2}{3} h f(x, y)\Big)$$

5. Convergence du schéma

Le schéma est convergent s'il est consistant et stable.
Consistance

$$\Phi(x, y, 0) = \frac{1}{4} f(x, y) + \frac{3}{4} f(x, y) = f(x, y)$$

Stabilité : on utilise le fait que f est L-lipschitzienne par rapport à sa seconde variable. On calcule

$$\begin{aligned}
\Big|\Phi(x, y_1, h) - \Phi(x, y_2, h)\Big| &= \left| \frac{1}{4} f(x, y_1) + \frac{3}{4} f\Big(x + \frac{2}{3} h, y_1 + \frac{2}{3} h f(x, y_1)\Big) - \frac{1}{4} f(x, y_2) - \frac{3}{4} f\Big(x + \frac{2}{3} h, y_2 + \frac{2}{3} h f(x, y_2)\Big) \right| \\
&\leq \frac{1}{4} \Big| f(x, y_1) - f(x, y_2) \Big| + \frac{3}{4} \left| f\Big(x + \frac{2}{3} h, y_1 + \frac{2}{3} h f(x, y_1)\Big) - f\Big(x + \frac{2}{3} h, y_2 + \frac{2}{3} h f(x, y_2)\Big) \right| \\
&\leq \frac{L}{4} \big|y_1 - y_2\big| + \frac{3L}{4} \left| \Big(y_1 + \frac{2}{3} h f(x, y_1)\Big) - \Big(y_2 + \frac{2}{3} h f(x, y_2)\Big) \right| \\
&\leq \frac{L}{4} \big|y_1 - y_2\big| + \frac{3L}{4} \big|y_1 - y_2\big| + \frac{3L}{4} \left| \frac{2}{3} h \Big(f(x, y_1) - f(x, y_2)\Big) \right| \\
&\leq L \big|y_1 - y_2\big| + \frac{HL}{2} \Big| f(x, y_1) - f(x, y_2) \Big| \\
&\leq L \big|y_1 - y_2\big| + \frac{HL^2}{2} \big|y_1 - y_2\big| \\
&\leq \Big(L + \frac{HL^2}{2}\Big) \big|y_1 - y_2\big|
\end{aligned}$$

6. et 7. Ordre du schéma

On rappelle que si f est deux fois continuement dérivable dans $[x_0, X] \times \mathbb{R}$ et si Φ, $\dfrac{\partial \Phi}{\partial h}$ et $\dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2}$existent et sont continues dans $[x_0, X] \times \mathbb{R} \times [0, H]$ alors le schéma est au moins d'ordre 2 si et seulement si

$$\begin{cases} \Phi(x, y, 0) = f(x, y) \\ \dfrac{\partial \Phi}{\partial h}(x, y, 0) = \dfrac{1}{2} \left(\dfrac{\partial f}{\partial x}(x, y) + f(x, y) \dfrac{\partial f}{\partial y}(x, y) \right) = \dfrac{1}{2} f^{[1]}(x, y) \end{cases}$$

et exactement d'ordre 2 si de plus

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2}(x, y, 0) \neq \frac{1}{3} \left(\frac{\partial f^{[1]}}{\partial x}(x, y) + f(x, y) \frac{\partial f^{[1]}}{\partial y}(x, y) \right)$$

Pour le schéma étudié, on obtient

$$\Phi(x, y, 0) = \frac{1}{4} f(x, y) + \frac{3}{4} f(x, y) = f(x, y)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial h}(x,y,h) = \frac{3}{4}\times\frac{2}{3}\frac{\partial f}{\partial x}\Big(x+\frac{2}{3}h, y+\frac{2}{3}hf(x,y)\Big)+\frac{3}{4}\times\frac{2}{3}\frac{\partial f}{\partial y}\Big(x+\frac{2}{3}h, y+\frac{2}{3}hf(x,y)\Big)f\Big(x+\frac{2}{3}h, y+\frac{2}{3}hf(x,y)\Big)$$

soit en $h=0$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial h}(x,y,0) = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)+f(x,y)\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\right) = \frac{1}{2}f^{[1]}(x,y)$$

La méthode est donc au moins d'ordre 2. Pour montrer qu'elle n'est pas d'ordre 3 en général, il suffit de trouver une fonction f pour laquelle l'ordre de la méthode n'est que 2.
On prend $f(x,y)=x+y$
alors

$$f^{[1]}(x,y) = 1+(x+y)\times 1 = 1+x+y$$

et

$$f^{[2]}(x,y) = 1+(x+y)\times 1 = 1+x+y$$

et

$$\forall n\in\mathbb{N}^*,\ f^{[n]}(x,y) = 1+x+y$$

$$\Phi(x,y,h) = \frac{1}{4}(x+y)+\frac{3}{4}\Big[x+\frac{2}{3}h+y+\frac{2}{3}h(x+y)\Big] = x+y+\frac{h}{2}(1+x+y)$$

Alors $\dfrac{\partial \Phi}{\partial h}(x,y,h) = \dfrac{1}{2}(1+x+y)$ et $\dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial h^2}(x,y,h) = 0$: la méthode n'est donc pas d'ordre 3.

8. Tableau de Butcher

Il s'agit a priori d'une méthode de Runge-Kutta **explicite** à **deux** étages. Son tableau de Butcher est de la forme suivante

$$\begin{array}{c|cc} c_1 & 0 & 0 \\ c_2 & a_{21} & 0 \\ \hline & b_1 & b_2 \end{array}$$

$$\begin{aligned} x_{n,1} &= x_n + c_1 h \\ x_{n,2} &= x_n + c_2 h \\ y_{n,1} &= y_n \\ y_{n,2} &= y_n + h_n a_{21} f(x_{n,1}, y_{n,1}) = y_n + h_n a_{21} f(x_n + c_1 h, y_n) \\ y_{n+1} &= y_n + h_n\Big(b_1 f(x_{n,1},y_{n,1}) + b_2 f(x_{n,2},y_{n,2})\Big) = y_n + h_n \Phi(x_n,y_n,h_n) \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \Phi(x,y,h) &= b_1 f(x+c_1h, y) + b_2 f\Big(x+c_2h, y+a_{21}hf(x+c_1h,y)\Big) \\ &= \frac{1}{4}f(x,y) \qquad\quad + \frac{3}{4}f\Big(x+\frac{2}{3}h, y+\frac{2}{3}hf(x,y)\Big) \end{aligned}$$

Et par identification $b_1 = \dfrac{1}{4}$, $b_2 = \dfrac{3}{4}$, $c_1 = 0$, $c_2 = \dfrac{2}{3}$ et $a_{21} = \dfrac{2}{3}$.
Ce qui donne le tableau de Butcher suivant

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ \hline & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \end{array}$$