

Itérations - suites et accélération de convergence

1 Rappels

1.1 Conditionnement d'un problème

Les problèmes ne sont jamais résolus exactement et, ce, pour de multiples raisons : dans un processus itératif on ne peut pas attendre que $k \rightarrow \infty$; plus généralement, les calculs sont effectués sur ordinateur en précision finie et les erreurs d'arrondis (de troncature ou de cancellation) s'accumulent. Une question cruciale pour la fiabilité des résultats est de savoir si ces erreurs restent "confinées" durant les calculs ou, au contraire, si elles peuvent se propager. La notion de *conditionnement d'un problème* permet de caractériser ce phénomène mais aussi de le quantifier.

Considérons l'équation

$$f(x) - a = 0.$$

Ici f sera supposée aussi régulière que nécessaire, par exemple $\mathcal{C}^1(I)$. Nous nous intéressons aux variations de la solution lorsque la donnée a varie : dans un monde idéal la solution de l'équation change peu si a varie faiblement. Supposons que f admette une fonction réciproque sur I . On a alors

$$f^{-1}(a) = \xi \text{ et } (f^{-1})'(a) = \frac{1}{f'(\xi)}.$$

Soient $a' = a + h$ et ξ' la solution de $f(\xi') - a' = 0$. Nous avons

$$\xi' - \xi = f^{-1}(a') - f^{-1}(a) \simeq (a' - a)(f^{-1})'(a).$$

Ainsi

$$\xi' - \xi \simeq \frac{h}{f'(\xi)}.$$

La quantité $\frac{1}{|f'(\xi)|}$ mesure donc la variation relative de la solution et des données. On se donne la

Définition 1 *Les conditionnements absolus et relatifs du problèmes sont respectivement les nombres*

$$K_{abs}(a) = \frac{1}{|f'(\xi)|}, \quad K_{rel} = \frac{a}{|\xi||f'(\xi)|}.$$

Exemple (voir aussi [3])

Soit $f(x) = (x - 1)^4$ et $f_\epsilon(x) = (x - 1)^4 - \epsilon$. Les racines de f sont $\xi = 1$ avec multiplicité égale à 4, celles de f_ϵ sont

$$\xi = 1 + \sqrt[4]{\epsilon}$$

Si $\epsilon = 10^{-4}$, on trouve comme racines

$$\xi_1 = 1.1, \xi_2 = 1 + i0.1, \xi_3 = 1 - i0.1, \xi_4 = 0.9 \text{ où } i = \sqrt{-1}.$$

La recherche des racines d'un polynôme est un problème mal conditionné : lorsque la perturbation ϵ vaut 10^{-4} la variation relative du résultat vaut 10^{-1} , soit une erreur de 10% .

1.2 Vitesse de convergence

Définition 2 Une suite $x^{(k)}$ converge vers ξ à l'ordre p si

$$\exists C > 0, \exists k_0 \in \mathbb{N} / \lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x^{(k+1)} - \xi|}{|x^{(k)} - \xi|^p} \leq C, \forall k \geq k_0$$

C est le facteur de convergence.

Lorsque $\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x^{(k+1)} - \xi|}{|x^{(k)} - \xi|} = c < 1$, on parle de *convergence géométrique* ou *linéaire* et de *convergence superlinéaire* quand $p > 1$. La suite $x^{(k)}$ converge *quadratiquement* pour $p = 2$ et *cubiquement* pour $p = 3$.

Toutes ces suites convergent relativement raisonnablement, c'est à dire qu'on peut espérer obtenir numériquement une bonne approximation de la solution en itérant assez. Il existe pourtant des suites qui convergent tellement lentement, que le calcul numérique de leur limite est entâché des erreurs d'arrondis ou tout simplement ne converge pas. Ces suites correspondent au cas $p = 1$ et $c = 1$, elles sont dites *logarithmiques*, on pourra consulter [1].

Exemple Illustration de la vitesse convergence.

Donnons-nous tout d'abord un critère pratique. Supposons que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{x^{(k+1)} - \xi}{x^{(k)} - \xi} = c \in]0, 1[.$$

On ne connaît pas ξ en général. Pour calculer numériquement le facteur de convergence, on considère le rapport

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}$$

dont la limite vaut c (exercice).

Une autre technique consiste à supposer que $x^{(N)}$ est une bonne approximation de la limite pour N assez grand et d'étudier le rapport

$$\frac{x^{(k+1)} - x^{(N)}}{x^{(k)} - x^{(N)}}.$$

Voici une suite convergent linéairement : la série harmonique

$$S_n = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k^2},$$

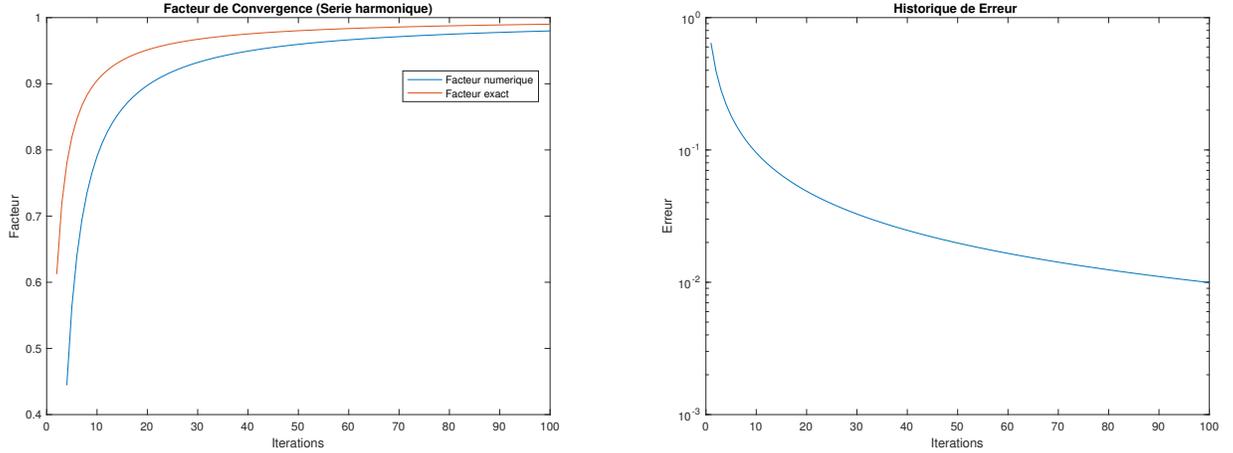


Figure 1: Facteurs de convergence exact et numérique pour la série harmonique (gauche). Historique de l'erreur (droite)

de limite $\frac{\pi^2}{6}$.

On gagne un chiffre significatif à chaque itération, ceci est caractéristique des convergences linéaires.

k	S_n	$ S_n - \frac{\pi^2}{6} $
97	1.634677746497866	1.025632035036073e-02
98	1.634781869779832	1.015219706839487e-02
99	1.634883900184892	1.005016666333414e-02
100	1.634983900184892	9.950166663334148e-03

Table 1: Valeurs approchées de $\frac{\pi^2}{6}$ par la la série harmonique

Voici une suite convergeant quadratiquement vers $\sqrt{2}$: la suite de Héron

$$x^{(k+1)} = \frac{1}{2} \left(x^{(k)} + \frac{2}{x^{(k)}} \right)$$

On gagne deux chiffres significatifs à chaque itération, ceci est caractéristique des convergences quadratiques.

Plus généralement et de la même façon, nous pouvons calculer numériquement la racine n-ième d'un réel $a > 0$ en construisant la suite

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^n - a}{n x_k^{n-1}} = x_k \left(1 + \frac{1}{n} \left(\frac{a}{x_k^n} - 1 \right) \right) = \left(1 - \frac{1}{n} \right) x_k + \frac{1}{n} \frac{a}{x_k^{n-1}}.$$

Les itérations de point fixe $x^{(k+1)} = f(x^{(k)})$ convergent en général linéairement. Nous avons plus précisément le

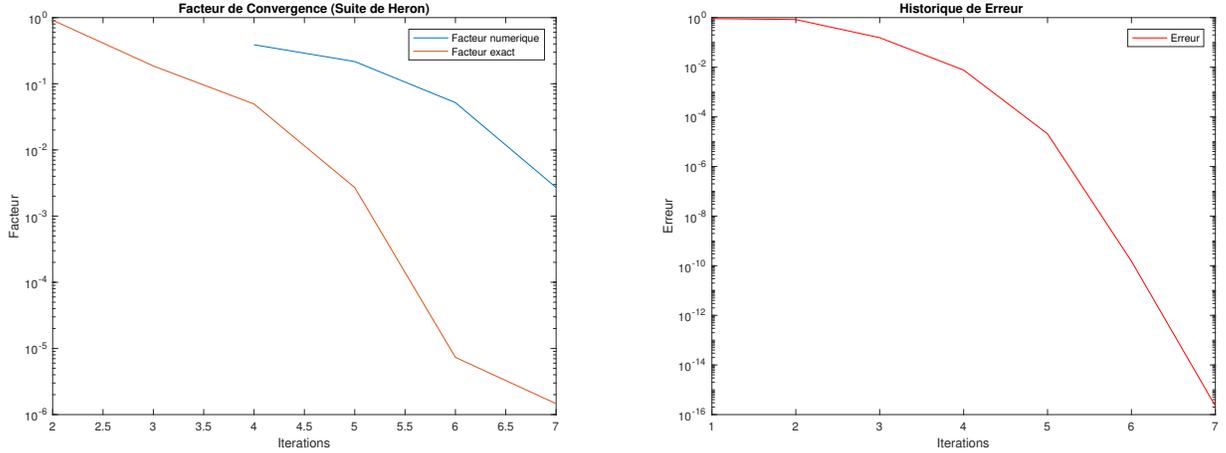


Figure 2: Facteurs de convergence exact et numérique pour la suite de Héron (gauche). Historique de l'erreur (droite)

k	x_k	$ x_k - \sqrt{2} $
0	5.000000000000000e+000	3.585786437626905e+000
1	2.700000000000000e+000	1.285786437626905e+000
2	1.720370370370370e+000	3.061568079972752e-001
3	1.441455368177650e+000	2.724180580455493e-002
4	1.414470981367771e+000	2.574189946757954e-004
5	1.414213585796884e+000	2.342378846442728e-008

Table 2: Valeurs approchées de $\sqrt{2}$ par la méthode de Newton, $x_0 = 5$

Théorème 3 Soit $I = [a, b]$ un intervalle fermé et borné et f une fonction telle que

i $\forall x \in [a, b], f(x) \in [a, b]$

ii $f \in \mathcal{C}^1([a, b])$

iii $\exists \kappa \in]0, 1[/ |f'(x)| \leq \kappa, \forall x \in [a, b]$

Alors f a un unique point fixe x dans $[a, b]$ et la suite $x^{(k)}$ converge vers x^* pour tout $x^{(0)} \in [a, b]$. De plus, nous avons

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{x^{(k+1)} - x}{x^{(k)} - x} = f'(x^*)$$

Preuve. L'hypothèse *iii* implique que f est fortement contractante, c'est une conséquence du théorème des accroissements finis. En effet, pour tout x, y de I , il existe un ξ de I tel que

$$f(x) - f(y) = f'(\xi)(x - y).$$

Il en découle que

$$|f(x) - f(y)| \leq \kappa|x - y|.$$

Les hypothèses du théorème précédent sont satisfaites, nous sommes assurés de l'existence et de l'unicité du point fixe x^* de f ainsi que de la convergence de la suite $x^{(k)}$.

Pour établir le résultat de vitesse de convergence, on écrit

$$x^{(k+1)} - x^* = f(x^{(k)}) - f(x^*) = f'(\xi^{(k)})(x^{(k)} - x^*)$$

Comme $x^{(k)}$ converge vers x^* et que $\xi^{(k)}$ est compris entre $x^{(k)}$ et x^* , $\xi^{(k)}$ converge vers x^* et, puis que f est $\mathcal{C}^1([a, b])$, $\lim_{k \rightarrow +\infty} f'(\xi^{(k)}) = f'(x^*)$, d'où le résultat. ■

1.3 Accélération de convergence

Etant donnée une suite $x^{(k)}$ convergente vers ξ , l'accélération de convergence consiste à construire à partir de $x^{(k)}$ une suite $y^{(k)}$ convergente aussi vers ξ , mais à un ordre supérieur. Plus précisément, nous avons la

Définition 4 Soit $(x^{(k)})_k$ une suite de réels convergente vers ξ . On dit que la suite $(y^{(k)})_k$ construite à partir de $(x^{(k)})_k$ accélère $(x^{(k)})_k$ si

•

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} y^{(k)} = \xi$$

•

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{y^{(k)} - \xi}{x^{(k)} - \xi} = 0$$

1.3.1 Méthodes d'Aitken et de Steffensen

Aitken

Considérons une suite $x^{(k)}$ qui converge géométriquement vers ξ , c'est à dire que pour k assez grand, on peut écrire (avec une faible erreur)

$$x^{(k+1)} - \xi = \theta(x^{(k)} - \xi), \text{ avec } \theta \in]-1, 1[.$$

En écrivant cette relation à l'étape suivante, il vient

$$x^{(k+2)} - \xi = \theta(x^{(k+1)} - \xi)$$

si bien que θ peut être déterminé à partir des valeurs $x^{(k+j)}$, $j = 0, 1, 2$

$$\theta = \frac{x^{(k+2)} - x^{(k+1)}}{x^{(k+1)} - x^{(k)}}$$

et, en remplaçant θ par cette expression dans la première relation, nous trouvons

$$\xi = \frac{x^{(k)}x^{(k+2)} - (x^{(k+1)})^2}{x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}} = x^{(k)} - \frac{(\Delta x^{(k)})^2}{\Delta^2 x^{(k)}}$$

où Δ et Δ^2 sont les opérateurs aux différences

$$\Delta x^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)}, \quad \Delta^2 x^{(k)} = \Delta x^{(k+1)} - \Delta x^{(k)} = x^{(k+2)} - 2x^{(k+1)} + x^{(k)}$$

La méthode du Δ^2 d'Aitken consiste à construire la suite $y^{(k)}$ par

Méthode du Δ^2 d'Aitken

Initialisation	x_0 et x_1 donnés
Pour $k = 0, \dots$	
poser	$y^{(k)} = x^{(k)} - \frac{(\Delta x^{(k)})^2}{\Delta^2 x^{(k)}}$

On montre le

Théorème 5 *On suppose qu'il existe $\theta \in]-1, 1[$ tel que la suite $(x^{(k)})_k$, $x^{(k)} \neq \xi$ vérifie*

$$x^{(k+1)} - \xi = (\theta + \delta_k)(x^{(k)} - \xi), \text{ avec } \lim_{k \rightarrow +\infty} \delta_k = 0$$

alors la suite $(y^{(k)})$ est bien définie et

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{y^{(k)} - \xi}{x^{(k)} - \xi} = 0.$$

Preuve. Par hypothèse l'erreur $e^{(k)} = x^{(k)} - \xi$ vérifie

$$e^{(k+1)} = (\theta + \delta_k)e^{(k)}$$

il s'ensuit que, d'une part,

$$\begin{aligned}\Delta^2 x^{(k)} &= e^{(k+2)} - 2e^{(k+1)} + e^{(k)} \\ &= ((\theta + \delta_{k+1})(\theta + \delta_k) - 2(\theta + \delta_k) + 1) e^{(k)} \\ &= ((1 - \theta)^2 + \eta_k)\end{aligned}$$

où $\lim \eta_k = 0$. D'autre part

$$\begin{aligned}\Delta x^{(k)} &= e^{(k+1)} - e^{(k)} \\ &= ((\theta - 1) + \delta_k) e^{(k)}\end{aligned}$$

Nous en déduisons que $\Delta^2 x^{(k)} \neq 0$ pour k assez grand puisque $(1 - \theta)^2 \neq 0$, $e^{(k)} \neq 0$ et $\eta_k \rightarrow 0$. Du coup, $y^{(k)}$ est bien définie et nous pouvons écrire

$$y^{(k)} - \xi = e^{(k)} - e^{(k)} \frac{((\theta - 1) + \delta_k)^2}{((1 - \theta)^2 + \eta_k)}$$

il s'ensuit que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{y^{(k)} - \xi}{x^{(k)} - \xi} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{((\theta - 1) + \delta_k)^2}{(1 - \theta)^2 + \eta_k} \right) = 0$$

■ Considérons une suite à convergence géométrique, générée par exemple par une méthode de point fixe

$$x^{(k+1)} = F(x^{(k)})$$

Steffensen

La méthode de Steffensen consiste à réutiliser la suite $y^{(k)}$ dans le Δ^2 d'Aitken en remplaçant $x^{(k)}$ par $y^{(k)}$. Plus précisément soit F la fonction d'itération de la suite $x^{(k)}$, c'est à dire la fonction liant $x^{(k+1)}$ à $x^{(k)}$ par la relation

$$x^{(k+1)} = F(x^{(k)})$$

La méthode du Δ^2 s'écrit comme

$$\begin{aligned}\alpha_k &= F(x^{(k)}), \quad \beta_k = F(\alpha_k) \\ y^{(k+1)} &= x^{(k)} - \frac{(\alpha_k - x^{(k)})^2}{\beta_k - 2\alpha_k + x^{(k)}}.\end{aligned}$$

La méthode de Steffensen s'obtient prenant comme nouvelle fonction d'itération, celle du Δ^2 , c'est à dire

$$G : x \mapsto x - \frac{(F(x) - x)^2}{F(F(x)) - 2F(x) + x}$$

Méthode de Steffensen

Initialisation	x_0 et x_1 donnés
Pour $k = 0, \dots$	
poser	$x^{(k+1)} = G(x^{(k)}) = \frac{x^{(k)} F(F(x^{(k)})) - F(x^{(k)})^2}{F(F(x^{(k)})) - 2F(x^{(k)}) + x^{(k)}}$

La méthode de Steffensen est donc une méthode de point fixe avec une nouvelle fonction d'itération. Pour autant, ces deux fonctions ont-elles toujours le même point fixe ? En général oui, c'est à dire sous une condition simple portant sur F' . On peut démontrer le

Théorème 6 Si $G(\xi) = \xi$ alors $F(\xi) = \xi$. Inversement, si $F(\xi) = \xi$ et $F'(\xi) \neq 1$ alors $G(\xi) = \xi$.

Preuve. Nous avons

$$(\xi - G(\xi))(F(F(\xi)) - 2F(\xi) + \xi) = (\xi - F(\xi))^2$$

Ainsi si $G(\xi) = \xi$ alors $F(\xi) = \xi$.

Réciproquement, supposons que $F(\xi) = \xi$ et $F'(\xi) \neq 1$. On peut appliquer la règle de l'Hôpital, il vient

$$G(\xi) = \frac{F(F(\xi)) + \xi F'(F(\xi))F'(\xi) - 2F(\xi)F'(\xi)}{F'(F(\xi))F'(\xi) - 2F'(\xi) + 1} = \frac{\xi + \xi F'(\xi)^2 - 2\xi F'(\xi)}{1 + F'(\xi)^2 - 2F'(\xi)} = \xi.$$

■

1.3.2 Illustration

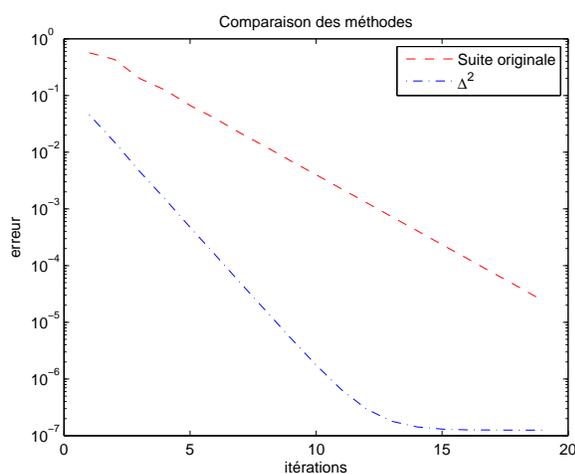


Figure 3: Comparaison des erreurs produite par la méthode de point fixe et par son accélérée par le Δ^2 d'Aitken

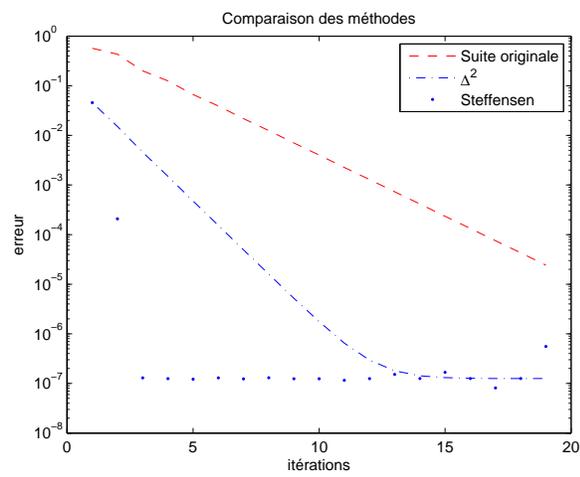


Figure 4: Comparaison des erreurs produites par la méthode de point fixe, Δ^2 d'Aitken et Steffensen

1.3.3 Extrapolation de Richardson

Soit $A(h)$ une suite de nombres réels convergeant vers a_0 lorsque h tend vers 0. Supposons que $Q(h)$ admette le développement

$$A(h) = a_0 + a_1h + a_2h^2 + \dots + a_nh^n + R_{n+1}(h)$$

Si $a_1 \neq 0$, la suite $A(h)$ approche a_0 au premier ordre. De manière générale, soit k_0 le plus petit indice tel que $a_{k_0} \neq 0$. Alors $A(h)$ approche a_0 à l'ordre k_0 . Pour rendre la convergence plus rapide, il faudrait pouvoir "éliminer" les coefficients successifs de a_{k_0} . A cet effet, on construit de proche en proche une suite $B(h)$ convergeant aussi vers a_0 mais plus vite puisqu'avec un développement en 0 sous la forme

$$B(h) = a_0 + b_{k_1}h^{k_1} + \dots$$

avec $k_1 \gg k_0$.

Remarquons qu'en remplaçant h par δh , nous avons

$$A(\delta h) = a_0 + a_1\delta h + a_2\delta^2h^2 + \dots + a_n\delta^n h^n + R_{n+1}(h)$$

Ainsi, en définissant $B(h)$ par

$$B(h) = \frac{A(\delta h) - A(h)}{1 - \delta} = a_0 + b_2h^2 + \dots +$$

La nouvelle suite $B(h)$ approche a_0 à l'ordre 2. Nous pouvons généraliser ce procédé comme suit :

Méthode de Romberg

Initialisation	$\mathcal{A}_{m,0} = A(\delta^m h), m = 0, \dots, n$
Pour $k = 0, \dots,$	
poser	$\mathcal{A}_{m,k+1} = \frac{\mathcal{A}_{m,k} - \delta^{2(k+1)}\mathcal{A}_{m-1,k}}{1 - \delta^{2(k+1)}}$

2 Quelques critères pratiques

2.1 Calcul de série

2.1.1 Critères analytiques

Il faut évidemment, avant tout, exploiter les propriétés éventuelles de la série $\sum_{i=1}^{+\infty} a_i$.

Si par exemple la série est alternée ($a_i = (-1)^i b_i, b_i > 0, b_{i+1} < b_i, \forall i \geq 1$), on vérifie aisément que $|S - S_n| \leq b_{n+1}$. On pourra alors déterminer à l'avance, pour ϵ donné, la valeur de n telle que $|S - S_n| < \epsilon$.

2.1.2 Critères numériques

Bien évidemment, on ne dispose pas toujours de critère d'arrêt et *a fortiori* pas d'estimation d'erreur (ce qui implique que l'on somme à l'endroit en général). On peut néanmoins arrêter les itérations lorsque la quantité ajoutée est considérée comme "petite" i.e. si

$$|a_n| < \epsilon \text{ ou } \frac{|a_n|}{|S_n|} < \epsilon$$

Si on dispose d'une estimation d'erreur (de $|S - S_n|$), il convient de sommer la série "à l'envers", pour éviter les effets de cumul, comme le montre l'exemple suivant :

Application : $S_n = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{(-1)^{n+1}}{n}$. Calculer (en simple précision) cette série en partant du début, en partant de la fin, avec une précision de 10^{-6} et comparer le résultat obtenu avec $\log(2.0)$.

2.2 Les suites

2.2.1 Critères analytiques

Même remarque que pour le cas des séries.

2.2.2 Critères numériques

On peut considérer les critères $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon$ ou $\frac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_n|} < \epsilon$

2.2.3 Autres tests

Lorsque l'on met en œuvre une méthode itérative, il faut se donner un nombre maximal d'itérations au delà duquel on décide qu'il est inutile de poursuivre le processus. En effet, dans le cas contraire, une erreur de programmation peut conduire à une boucle effectuée indéfiniment.

2.3 Contrôles *a posteriori*

Prendre des précautions dans la construction du programme ne suffit pas toujours. Il faut pouvoir analyser les résultats obtenus, ce qui permet de détecter des erreurs (s'il y en a).

2.3.1 Nombre de chiffres exacts

Soit x_n une suite convergente vers x^* . On mesure le nombre de chiffres décimaux exacts par

$$e(x_n, x^*) = \log_{10} \left(\frac{|x^*|}{|x_n - x^*|} \right).$$

Le nombre de chiffres exacts gagnés de x_n à x_{n+1} est alors donné par

$$d_n = e(x_{n+1}, x^*) - e(x_n, x^*) = \log_{10} \frac{|x_n - x^*|}{|x_{n+1} - x^*|}.$$

Si x_n est une suite d'ordre r i.e. si

$$0 < \lim \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^r} \leq \overline{\lim} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^r} < +\infty$$

alors le nombre de chiffres exacts est à peu près multiplié par r à chaque itération.

Exercice : comparer les résultats intermédiaires dans les exercices

3 Exercices

Exercice 1 On considère la suite

$$x^{(k+1)} = \frac{1}{2} \left(x^{(k)} + \frac{2}{x^{(k)}} \right)$$

où $a > 0$.

1. Montrer que cette suite est convergente pour tout $x^{(0)} > 0$. Quelle est sa limite ?
2. Calculer $x^{(k+1)} - \sqrt{a}$ en fonction de $x^{(k)} - \sqrt{a}$.

Exercice 2 (Calcul de séries) On considère les séries suivantes

- $S_n = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k^2}$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} S_n = \frac{\pi^2}{6}$

- $T_n = \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^{k+1}}{k}$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} T_n = \ln(2)$

- La formule de Gregory-Leibnitz $U_n = 4 \sum_{k=1}^n \frac{(-1)^{k+1}}{2k-1}$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} U_n = \pi$

- $V_n = 8 \sum_{k=0}^n \frac{1}{(4k+1)(4k+3)}$, $\lim_{n \rightarrow +\infty} V_n = \pi$

- La (fameuse) formule de Simon Plouffe

$$\pi = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\frac{4}{8i+1} - \frac{2}{8i+4} - \frac{1}{8i+5} - \frac{1}{8i+6}}{16^i}.$$

1. Calculer les sommes partielles pour différentes valeurs de n .
2. Appliquer les techniques d'accélération de convergence d'Aitken et Steffensen. Qu'observe-t-on ?

Exercice 3 (Suite d'Archimède) On considère la suite d'Archimède

$$a_n = 3 \cdot 2^n \tan\left(\frac{\pi}{3 \cdot 2^n}\right), \quad b_n = 3 \cdot 2^n \sin\left(\frac{\pi}{3 \cdot 2^n}\right).$$

1. En développant par Taylor pour n grand a_n et b_n , retrouver l'extrapolation $4/3 - 1/3$ permettant d'accélérer la convergence.
2. Programmer cette extrapolation. et comparer les résultats obtenus à ceux de la suite initiale. Qu'observez-vous ?

References

- [1] C. Brezinski, *Algorithmes d'accélération de la convergence; Etude numérique*, Paris, Ed. Technip, 1978.
- [2] J.-L. Chabert et al., *Histoire d'Algorithmes, du caillou à la puce*, Belin collection Regards sur la Science, 592 p., 1994, rimpression 1995.
- [3] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Méthodes numériques pour le calcul scientifique*, Springer Paris, 2000.
- [4] M. Schatzman, *Analyse numérique pour la licence*, InterEdition, 1993.
- [5] J. Stoer, R. Burlisch, *Introduction to Numerical Analysis*, text in Applied Mathematics, 12, Springer, 3rd Edition 2002