Lettre nº 3

Club MATH

Centre EAO du DIP
Case Postale 172
1211 GENEVE 3
Tél. (022) 781 15 30

Responsable:
Raymond Morel

Vendredi 15 mars à 17 h
Centre EAO du DIP
Collège Calvin

Les "calculs impossibles" à l'aide de Mathematica

Présentation: Bernard Vuilleumier

L'erreur au quotidien

L'erreur intervient dans toute démarche scientifique aboutissant à une simulation numérique. Il y a des erreurs à chaque étape: valeurs mesurées au niveau physique, erreur de modélisation, erreur due au caractère approché de la méthode de résolution du modèle, et enfin erreur due au calcul approché sur ordinateur. L'influence de ces diverses erreurs dépend de manière cruciale de la stabilité du système que l'on cherche à étudier, notamment lorsqu'il s'agit de résoudre les équations décrivant ce système (voir à ce propos la lettre nº 2). Certaines équations sont tellement instables que, quelle que soit la précision utilisée, la solution calculée sera toujours fausse ! Le mathématicien Ivar Ekeland a donné le nom imagé de barrière des "calculs impossibles" à un tel phénomène. *Mathematica*, en effectuant des calculs exacts, est capable, dans certains cas, de surmonter cette barrière.

Une suite particulière

Définissons une suite de nombres x_n par ses deux premiers termes x_0 et x_1 et par une relation de récurrence reliant le terme x_{n+1} à ses deux prédécesseurs x_n et x_{n-1}.

$$x_0 = \frac{11}{2}$$

$$x_1 = \frac{61}{11}$$

$$x_{n+1} = 111 - \frac{1130}{x_n} + \frac{3000}{x_n\ x_{n-1}}$$

Une limite difficile à atteindre

Lorsque n devient très grand, x_n tend vers 6. Et pourtant, si les calculs ne sont pas effectués avec une précision suffisante, la suite converge vers 100. Ces instabilités numériques peuvent encore être amplifiées si elles se doublent d'instabilités mathématiques, comme il peut en apparaître dans les problèmes faisant intervenir des équations non linéaires.

Non linéarité et instabilités

Les ordinateurs ont mis en évidence d'une manière spectaculaire le couplage entre instabilités numériques et instabilités mathématiques. Ce phénomène a été observé pour la première fois en 1963 par Edward Lorenz[1] qui résolvait un système d'équations non linéaires décrivant les mouvements de l'atmosphère. Au début des années 70, Robert May[2], qui étudiait la dynamique de populations d'insectes l'a également observé. Le calcul d'une dérivée par différences finies fournit un exemple simple de ce phénomène.

Exemple de couplage entre instabilités

Soit à calculer la dérivée seconde de la fonction f(x) au point x = 1.

$$f(x) = \frac{4970\,x - 4923}{4970\,x^2 - 9799\,x + 4830}$$

En utilisant les différences finies et en posant $\Delta x = h$, il vient:

$$f'(x) \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x + h) - f(x)}{h}$$

$$f''(x) \approx \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f'(x + h) - f'(x)}{h}$$

En effectuant, on obtient, en x = 1:

$$f''(1) \approx \frac{\Delta^2 y}{\Delta x^2} = \frac{f(1 + h) - 2f(1) - f(1 - h)}{h^2}$$

Si la précision est limitée, ce calcul fournit une valeur qui, après avoir subi de très grandes oscillations, devient nulle pour h inférieur à un certain seuil (qui dépend de la précision du calcul). L'amplitude des oscillations augmente fortement à cause de la division par h^2, ce qui rend l'instabilité explosive dès qu'elle est déclenchée.

Mathematica se joue des obstacles !

La limite quand h tend vers 0 de f''(x) vaut 94. *Mathematica* fournit la bonne réponse, même à partir du calcul basé sur la méthode des différences finies.

[1] Lorenz, E., *Trans. N. Y. Acad. Sci.*, *25*, 409, 1963.
[2] May, R., *Nature*, *261*, 1976.