MAT6470. Calcul Scientifique.

2 septembre 2010

1 Introduction

La terminologie "calcul scientifique" désigne tout calcul à l'usage de la science (*Pironneau*). Plus précisément, le calcul scientifique s'intéresse au développement des outils, des téchniques et des théories requis pour résoudre sur un ordinateur des problèmes mathématiques en science et ingénierie (*Golub et Ortega*).

En gros, ceux ou celles qui travaillent dans la finance mathématique sont souvent sollicités pour faire des recommendations numériques qui ne peuvent être faites qu'en utilisant des modèles sophistiqués, mis en oeuvre sur des ordinateurs de haute vitesse. Si l'utilisation du calcul scientifique pour les problèmes économiques semble parfois limitée c'est à cause de la grande difficulté d'écrire des modèles fiables (*Bernardi*, dans un rapport sur le calcul scientifique rédigé à la demande du C.N.R.S).

1.1 Sources des erreurs (Voir "*Calcul Scientifique*" par A. Quarteroni et F. Saleri, (Springer, 2006))

Plusieurs niveaux d'erreur peuvent être identifiés dans l'approximation et la résolution d'un problème physique:

- e_m (erreur de modélisation): qui provient du fait qu'on a réduit le problème physique PP à un modèle mathématique (MM). De telles erreurs limitent l'application du modèle mathématique à certaines situations et ne sont pas dans le champ du contrôle du calcul scientifique,

- e_t (erreur de troncature): souvent c'est nécessaire d'introduire d'autres erreurs liées au fait qu'un ordinateur ne peut effectuer que de manière approximative des calculs impliquant un nombre fini d'opérations arithmétiques. L'exemple le plus courant est celui d'une série infinie de Taylor dont on ne retient que quelques termes. La solution x_h du problème numérique (PN) diffère de x (la solution exacte de MM) d'une erreur e_t (c.à.d. $e_t := x - x_h$).

- e_a (erreur d'arrondi): la résolution du problème numérique entraîne immanquablement l'introduction et la propagation d'erreurs d'arrondi. Ces erreurs proviennent du fait que les calculs se font toujours sur une suite limitée de chiffres en machine.

- e_c (erreur de calcul): la somme des erreurs de troncature et d'arrondi constitue l'erreur de calcul.

Une de nos grandes préoccupations dans la construction d'algorithmes dans ce cours sera la réduction des erreurs de calcul.

Définition (Erreurs absolues et relatives)

L'erreur de calcul *absolue* e^{abs} est la valeur absolue (plus généralement, la norme) de la différence entre x, la solution exacte du modèle mathématique, et $\hat{x}$, la solution obtenue à la fin de la résolution,

$$e^{\text{abs}} := |e_c| = |x - \hat{x}|. \tag{1}$$

L'erreur de calcul relative e^{rel} est définie par

$$e^{\text{rel}} := \frac{|e_c|}{|x|} = \frac{|x - \hat{x}|}{|x|}. \tag{2}$$

Définition (Convergence et ordre de convergence)

Le calcul numérique consiste généralement à approcher le modèle mathématique en faisant intervenir un paramètre de discrétisation (qu'on désignera par h). Si la solution $\hat{x}$ du calcul numérique tend vers celle du MM lorsque $h \to 0$, on dit que le calcul numérique est convergent et nous écrivons $e_c \to 0$. Si de plus, l'erreur de calcul absolue peut être majorée par une fonction de h de la manière suivante:

$$e^{\text{abs}} \leq Ch^p, \tag{3}$$

où C est une constante indépendante de h et où p est un nombre positif, nous disons que la méthode est convergente d'ordre p. Par exemple, soit f une fonction dérivable en un point $t \in (a, b)$ et telle que f'' existe en $[a, b]$. Soit

$$x := f'(t). \tag{4}$$

Une approximation numérique à cette dérivée peut être calculée en utilisant

$$x_h := \frac{f(t+h) - f(t)}{h}, \tag{5}$$

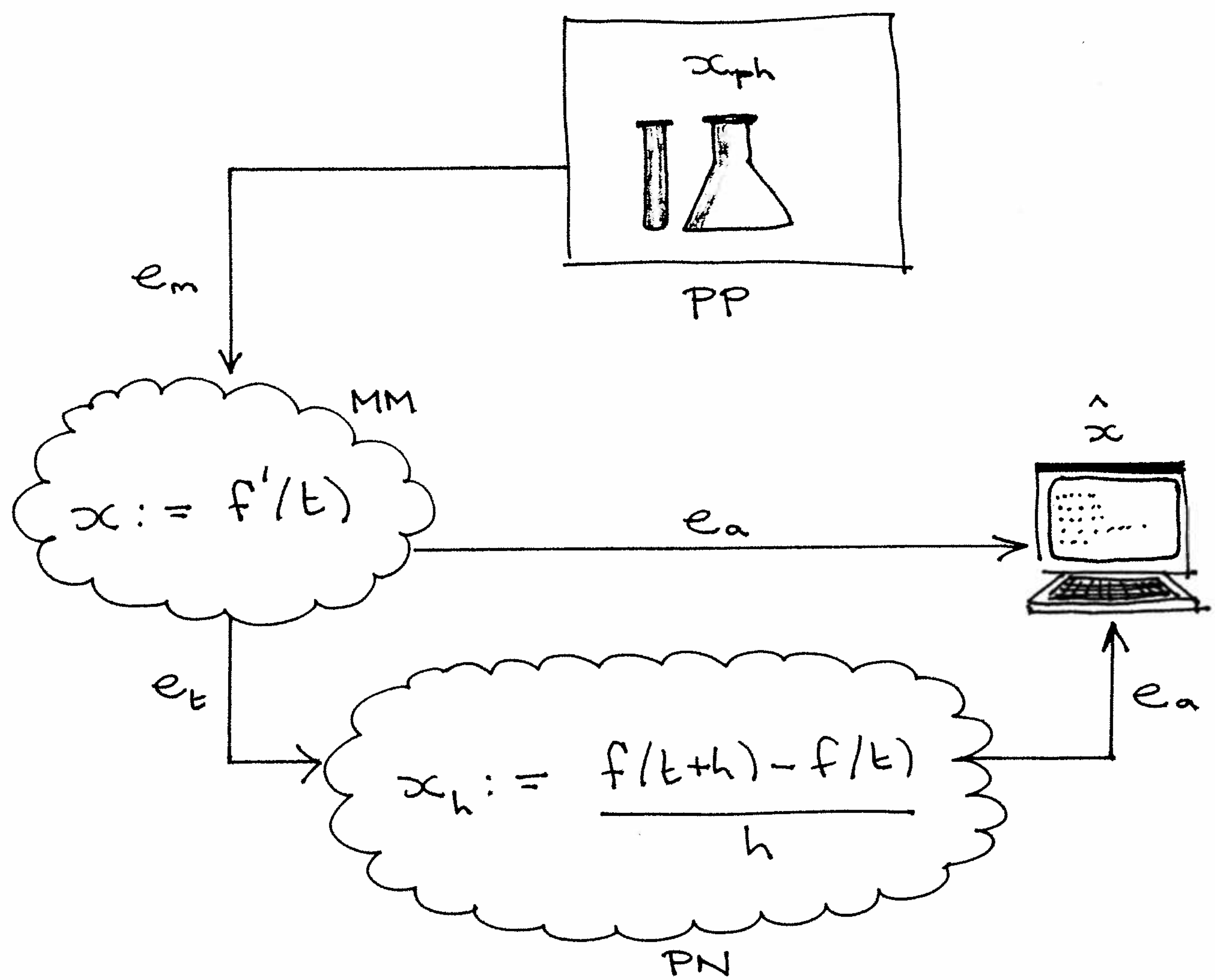
pour un certain choix de h, choisi tel que $t + h \in (a, b)$. Par le théorème de Taylor nous avons

$$f(t+h) = f(t) + hf'(t) + \frac{h^2}{2} f''(\theta),$$

pour quelque $\theta \in (t, t+h)$. Si nous négligeons les erreurs d'arrondi, alors

$$e^{\text{abs}} = |\hat{x} - x| \leq Ch, \tag{6}$$

où C majore $f''/2$ sur (a, b). L'ordre de convergence est donc 1.



x_{ph}
PP
e_m
MM
$x := f'(t)$
e_a
$\hat{x}$
e_t
$x_h := \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$
e_a
PN