Projet : Différences finies à pas complexe et application au problème de la chaînette

Sujet proposé par Nicole Spillane

2 décembre 2015

L'objectif de ce projet est d'effectuer la simulation numérique du problème dit de la *chaînette*. Il s'agit de trouver la position d'une corde fixée en ses deux extrêmités et soumise seulement à son propre poids. Pour cela nous formulerons le problème comme un problème d'optimisation (minimisation de l'énergie potentielle) et appliquerons une méthode de gradient. Nous proposons d'améliorer la précision du calcul du gradient dans l'algorithme d'optimisation en utilisant une méthode de différences finies à pas complexes. Cette méthode, qui n'est pas plus compliquée conceptuellement ou à implémenter que les méthodes de différences finies classiques, peut permettre de gagner en précision.

Consignes Les documents seront à envoyer à `nicole.spillane@cmap.polytechnique.fr`. La présentation du code devra être soignée, en particulier grâce à la présence de commentaires. N'hésitez pas à créer des fonctions intermédiaires dans des fichiers séparés. Si vous ne parvenez pas à répondre à une question ou si le résultat que vous trouvez ne correspond pas à ce qui est attendu, faites en la remarque dans votre rapport.

1 Gain de précision avec les différences finies à pas complexe

1.1 Phénomène d'annulation

Au sein d'un code de calcul (tel que Scilab) les nombres réels sont représentés avec une précision finie. Cette précision finie peut conduire à de grandes imprécisions numériques lorsque l'on calcule la différence de deux nombres très proches. Même si le formalisme n'est pas tout à fait le même, nous allons expliquer ce phénomène en terme de chiffres significatifs.

Supposons que l'on ait $y = 0.12345678912345678 90$ et que le système de représentation permette 10 chiffres significatifs. La représentation de y est alors $\overline{y} = 0.1234567891$. La différence est très petite puisque $(y - \overline{y})/y < 10^{-9}$ et sera anodine dans la plupart des cas. Cependant, si l'on calcule $\overline{y} - 0.1234567890 = 0.0000000001$ on ne récupère qu'un chiffre significatif et la précision est donc très mauvaise par rapport à $y - 0.1234567890 = 0.0000000001234567890$ (environ 20% d'erreur). Ceci est connu sous le nom de *phénomène d'annulation* ou *cancelling* en anglais.

1.2 Différences finies à pas complexe

Nous avons vu en cours qu'à partir du développement limité d'une fonction f (régulière et à valeurs réelles) au voisinage de $x \in \mathbf{R}$, on déduit des approximations de la dérivée en ce point. On a par exemple :

$$f'(x) = \frac{f(x+\delta) - f(x)}{\delta} + O(\delta) \quad \text{(Différences finies décentrées aval)} \tag{1}$$

ou encore

$$f'(x) = \frac{f(x+\delta) - f(x-\delta)}{2\delta} + O(\delta^2) \quad \text{(Différences finies centrées).} \tag{2}$$

Ces formules nous assurent qu'en arithmétique exacte, il suffit de faire tendre le pas de discrétisation δ vers 0 pour approcher $f'(x)$ aussi précisément que souhaité. Malheureusement, il peut y avoir une perte de précision dans le calcul de la différence $\Delta f = f(x+\delta) - f(x)$ ou $\Delta f = f(x+\delta) - f(x-\delta)$ par l'ordinateur à cause du phénomène d'annulation.

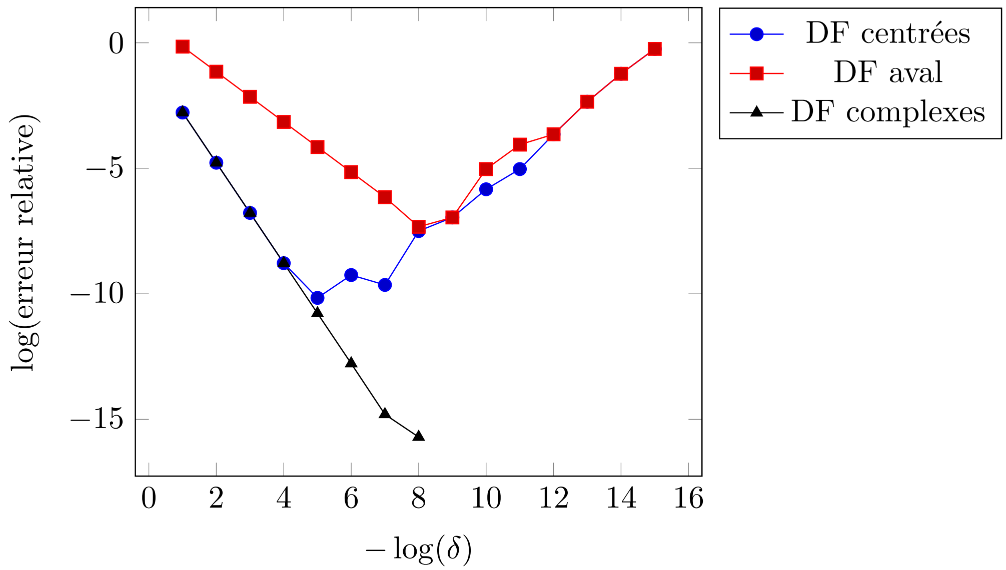


Figure 1 – Comparaison de l'erreur dans le calcul approché de $f'(1.5)$ par les trois méthodes.

Pour cette raison les différences finies à pas complexe ont été introduites [1]. Si f est une fonction analytique à valeurs réelles on peut calculer son développement de Taylor pour une perturbation purement complexe $\mathrm{i}\delta$ autour du point $x \in \mathbf{R}$:

$$f(x+\mathrm{i}\delta) = f(x) + \mathrm{i}\delta f'(x) - \delta^2 \frac{f''(x)}{2} - \mathrm{i}\delta^3 \frac{f'''(x)}{6} + \dots \tag{3}$$

Question 1 : En utilisant (3) justifier le fait que l'approximation

$$f'(x) \approx \frac{\mathrm{Im}(f(x+\mathrm{i}\delta))}{\delta} \tag{4}$$

est d'ordre 2 (où $\mathrm{Im}(z)$ désigne la partie imaginaire de $z \in \mathbf{C}$). Au vu de ce qui a été expliqué dans le paragraphe précédent, pourquoi peut on s'attendre à une plus grande précision numérique avec la formule (4) qu'avec les approximations classiques (1) et (2) ?

1.3 Exemple

On considère la fonction $f(x) = \sin(x)$ et on souhaite approcher $f'(1.5) = \cos(1.5)$ par différences finies. Bien sûr ceci n'est qu'un exemple permettant de bien comprendre le comportement des différentes méthodes puisqu'on connait déjà la valeur exacte de la dérivée.

Dans la Figure 1, on a tracé l'erreur relative entre la valeur exacte de $f'(1.5)$ et l'approximation calculée par la méthode des différences finies pour des valeurs de δ allant de 1 à 10^{-15}. Les trois courbes correspondent aux trois versions de la méthode des différences finies que nous avons évoquées : centrées (2), décentrées aval (1) et complexes (4).

Question 2 : Réaliser la même expérimentation numérique et représenter les résultats dans une figure similaire à la Figure 1.

Question 3 : Commenter ces résultats.

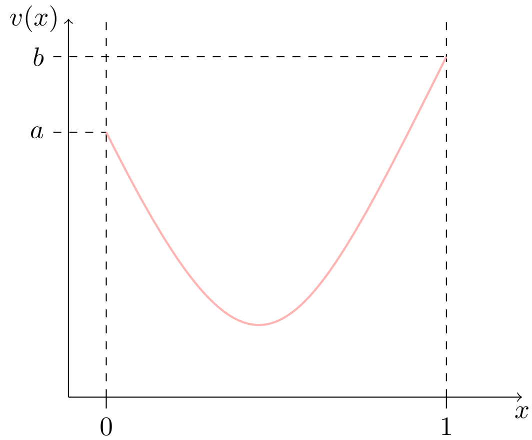
1. Pour plus de détails, vous pouvez consulter l'article *Martins, J. R., Sturdza, P., et Alonso, J. J. (2003). The complex-step derivative approximation. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), 29(3), 245-262.*

2 Problème de la chaînette

Le problème dit de la chaînette est de trouver la forme prise par un fil pesant flexible infiniment mince homogène inextensible suspendu entre deux points, placé dans un champ de pesanteur uniforme [2]. Dans ce projet, nous allons résoudre ce problème numériquement en utilisant une méthode de gradient où ∇J est approché par la méthode des différences finies à pas complexe.

2.1 Modélisation du problème

On considère un fil pesant fixé à ses deux bouts. On note x l'abscisse et $v(x)$ la hauteur du fil au point x.



Notations. On notera $v(0) = a$ et $v(1) = b$ les hauteurs des deux extrémités du fil et on considérera les abscisses entre 0 et 1. La longueur totale du fil est notée L et sa densité massique constante ρ.

Modélisation. Le principe de moindre action de la mécanique nous dit que la forme prise par le fil pesant minimise l'énergie potentielle. Il faut donc établir la formule de l'énergie potentielle du fil suivant sa forme décrite par la fonction $v(\cdot)$.

Question 4 : (facultative) Montrer que la contrainte de longueur du fil peut s'écrire comme :

$$\int_0^1 \sqrt{1 + v'(x)^2}\mathrm{d}x = L.$$

Question 5 : (facultative) En établissant l'énergie potentielle d'un élément infinitésimal du fil fonction de $v(\cdot)$, $v'(\cdot)$ et de ρ établir que l'énergie potentielle du fil pesant vaut :

$$E_{\text{pot}} = \rho \int_0^1 v(x)\sqrt{1 + v'(x)^2}\mathrm{d}x.$$

Optimisation. Nous avons donc à résoudre le problème suivant sur l'espace des fonctions $\mathcal{C}^1$:

$$\begin{cases} \min\limits_{v \in \mathcal{C}^1} E_{\text{pot}} \\ v(0) = a \\ v(1) = b \\ \displaystyle\int_0^1 \sqrt{1 + v'(x)^2}\mathrm{d}x = L \end{cases} \tag{5}$$

2. Galilée pensait que c'était un arc de parabole, mais Leibniz, Jean Bernoulli, et Huygens ont montré en 1691, indépendamment, qu'il n'en était rien.

Nous choisissons d'injecter la contrainte sur la longueur du fil dans la fonctionnelle à minimiser. Ce procédé (décrit dans le poly) est connu sous le nom de pénalisation. On cherchera désormais

$$\min_{v\in\mathcal{C}^1;v(0)=a;v(1)=b} E_{\text{pot}} + \frac{1}{\epsilon}\left(\int_0^1 \sqrt{1+v'(x)^2}\mathrm{d}x - L\right)^2,$$

où ϵ est *un petit paramètre* à choisir qui permet de pondérer l'importance relative de l'énergie potentielle et de la contrainte de longueur dans la fonctionnelle à minimiser.

Pour résoudre ce problème, nous allons le discrétiser. Nous considérons $N+1$ points sur le fil, et nous notons $(v_j)_{j\in[\![1,N+1]\!]}$ leurs hauteurs respectives ainsi que $h = 1/N$ la distance entre deux points de discrétisation. Après avoir fait tout cela, le problème devient le suivant :

Trouver $v = (v_j) \in \mathbf{R}^{N+1}$, tel que $v_1 = a$ et $v_{N+1} = b$, minimisant :

$$J(v) = h\sum_{j=1}^{N} \frac{v_j + v_{j+1}}{2}\left(1+\left(\frac{v_{j+1}-v_j}{h}\right)^2\right)^{1/2} + \frac{1}{\epsilon}\left(h\sum_{j=1}^{N}\left(1+\left(\frac{v_{j+1}-v_j}{h}\right)^2\right)^{1/2} - L\right)^2 \tag{6}$$

2.2 Résolution numérique

Posons[3] $a = b = 0$ et $L = 2 * \sinh(1/2)$. On va mettre en place une méthode de gradient pour résoudre le problème. Partant de la solution $v_1^0 = a$, $v_{N+1}^0 = b$ et $v_j^0 = -0.1$ pour $1 < j < N+1$ on réalisera les itérations suivantes :

$$v^{k+1} = v^k - \alpha\frac{\nabla(J(v^k))}{\|\nabla(J(v^k))\|_2}.$$

Question 6 : Implémenter la méthode du gradient, en utilisant la méthode de différences finies à pas complexe pour approcher chaque composante de $\nabla(J(v^k))$. Notons que puisque les conditions aux limites sont connues, on ne met pas à jour les valeurs de v_1^{k+1} et v_{N+1}^k qui restent égales à a et b respectivement. Tracer l'évolution de J en fonction du numéro de l'itération et la solution finale obtenue ainsi que plusieurs solutions intermédiaires. Un choix de paramètres possibles est $N = 50$, $\alpha = 10^{-3}$, $\delta = 10^{-10}$, $\epsilon = 10^{-3}$. Préciser le critère d'arrêt utilisé pour stopper l'algorithme d'optimisation.

Question 7 : Étudier l'influence du paramètre de pénalisation ϵ. Pour cela vous pouvez tracer séparément l'évolution des deux termes dans la somme qui constitue J.

Question 8 : Effectuer le même processus d'optimisation en approchant le gradient avec une méthode de différences finies classiques. Faites varier δ. La méthode de différentiation complexe apporte-t-elle une amélioration sur ce cas ?

3. Dans ce cas la solution analytique du problème avant discrétisation est connue et vaut $v(x) = \cosh(x - 1/2) - \cosh(1/2)$.