CHG1771 – Méthodes numériques et programmation en génie chimique

- Chapter 2: Équations non linéaires – Trouver le(s) racine(s)

Johnny Matta, M.A.Sc.

Hiver 2020

Section 2.1

INTRODUCTION

INTRODUCTION

De nombreux processus d'ingénierie sont décrits par des équations non linéaires. Dans certains cas, les équations peuvent être résolues explicitement.

$$y = 3x^2 + 4x + 2 \xrightarrow{y=0} x = \frac{-4 \pm \sqrt{4^2 - 4(3)(2)}}{2(3)}$$

Dans d'autres cas, il s'agit nécessairement d'utiliser des approximations numériques.

$$e^x = x^2$$

TYPES DE MÉTHODES DE RECHERCHE DE RACINES

Méthodes d'entourage (Bracketing Methods)

- Nécessite **deux** valeurs initiales qui entoure la racine.
- Stable pour les fonctions bien comportées, mais pas nécessairement efficace pour la convergence.

Méthodes ouvertes (Open Methods)

- **Une** seule estimation initiale est nécessaire
- Nécessite parfois la dérivée de la fonction
- Généralement rapide à converger pour des fonctions bien comportées, mais peut même diverger dans certains cas.

TROUVER NUMÉRIQUEMENT UNE RACINE

Tous les problèmes de recherche de racines doivent être mis en place de telle sorte que l'équation est égale à 0.

$$f(x) = 0$$

Exemples:

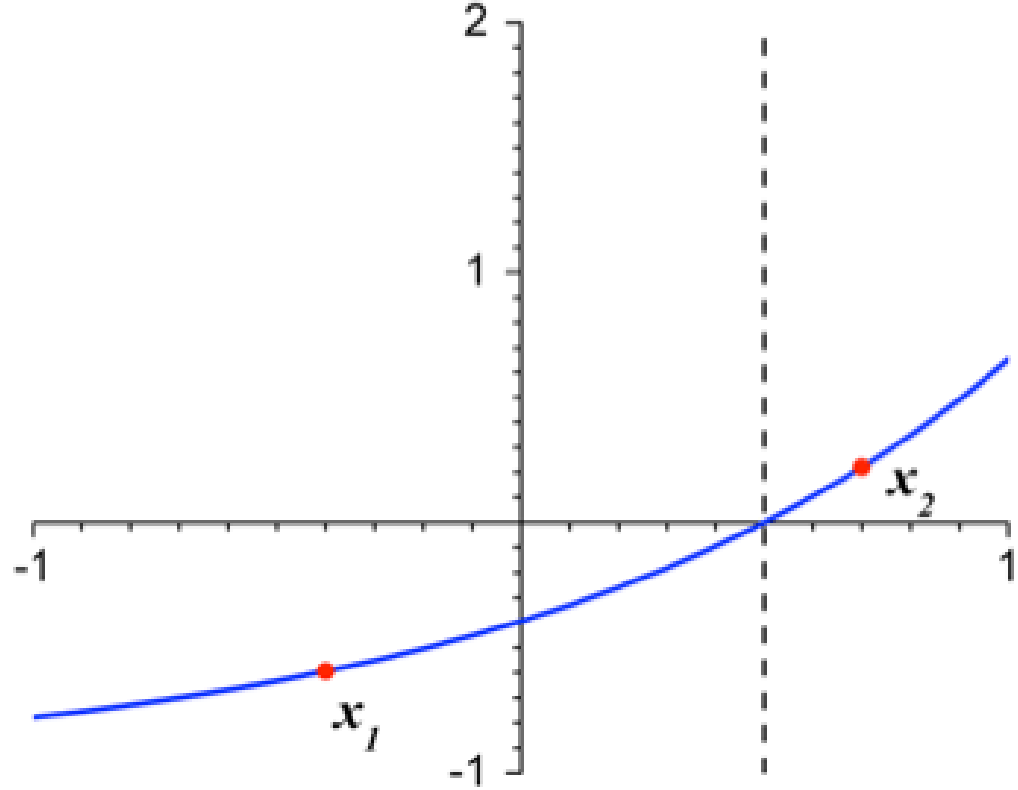
$$e^x = x^2 \Rightarrow 0 = e^x - x^2 = f(x)$$

$$c_P = A + BT + CT^2 \Rightarrow 0 = A + BT + CT^2 - c_P = f(T)$$

TROUVER NUMÉRIQUEMENT UNE RACINE

Puisque la racine est à f(x) = 0, le moyen le plus facile de trouver une racine est d'un changement de signe dans f(x). La racine est entre les valeurs x1 et x2.

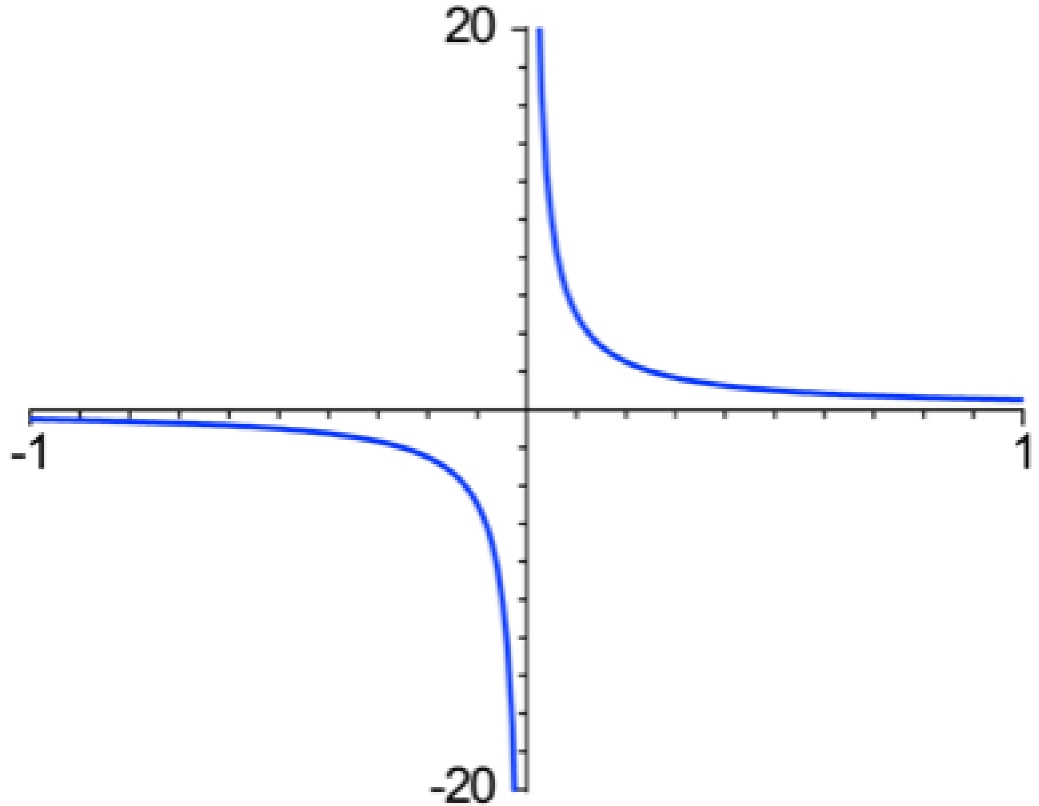
$$f(x_1)\cdot f(x_2) < 0$$



TROUVER NUMÉRIQUEMENT UNE RACINE

Cependant, les **asymptotes** satisferont également la même condition.

$$f(x) = \frac{1}{x}$$



TROUVER NUMÉRIQUEMENT UNE RACINE

Comment savez-nous quand on est assez proche d'une racine?

Trois approches différentes peuvent être utilisées.

- Différence absolue entre les estimations

$$E_a = \left| x_r^{new} - x_r^{old} \right|$$

- Différence relative entre les estimations

$$e_a = \left| \frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}} \right|$$

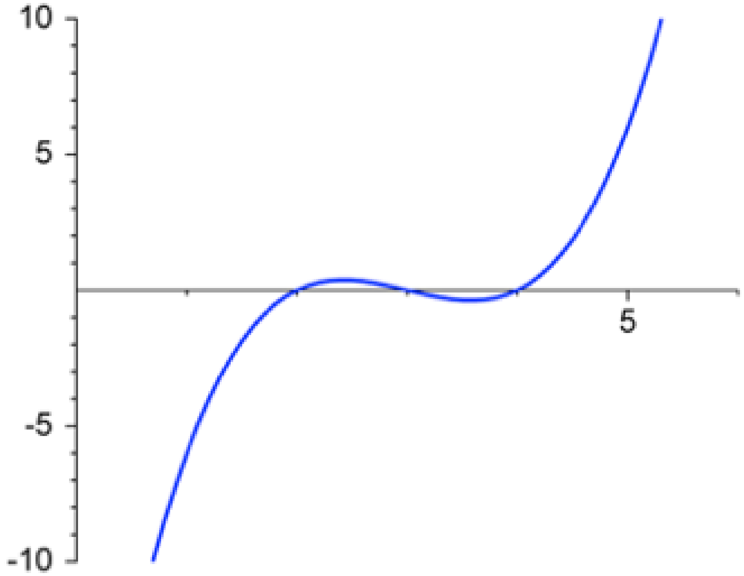
- La valeur de $f(x_{\text{guess}})$ est proche de 0

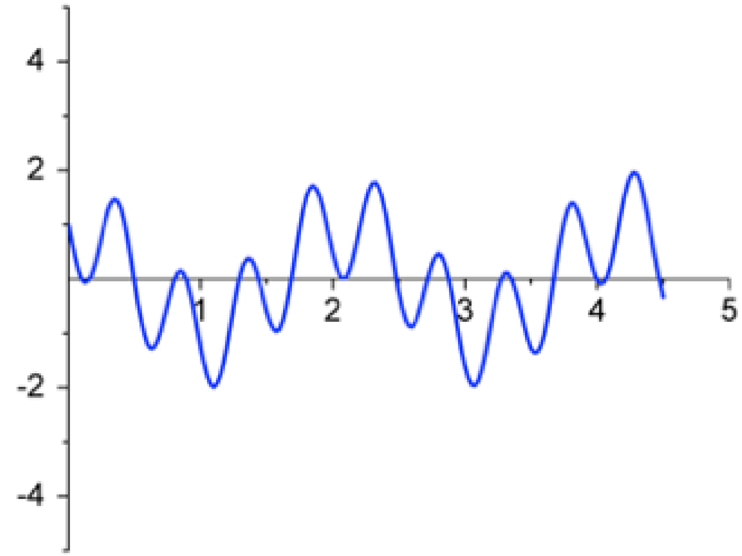
$$\left| f\left(x_r^{new}\right) \right| £ 0.01$$

Racines Multiples

Certaines fonctions peuvent avoir plusieurs racines.

- Pour la plupart des problèmes d'ingénierie, une seule des racines peut être physiquement possible.
- Les méthodes décrites dans les prochains diapos ne sont valables que pour trouver une racine à la fois, mais peuvent être appliqués à de nombreuses reprises pour trouver toutes les racines.





§ 5.4

Chapter 2.2

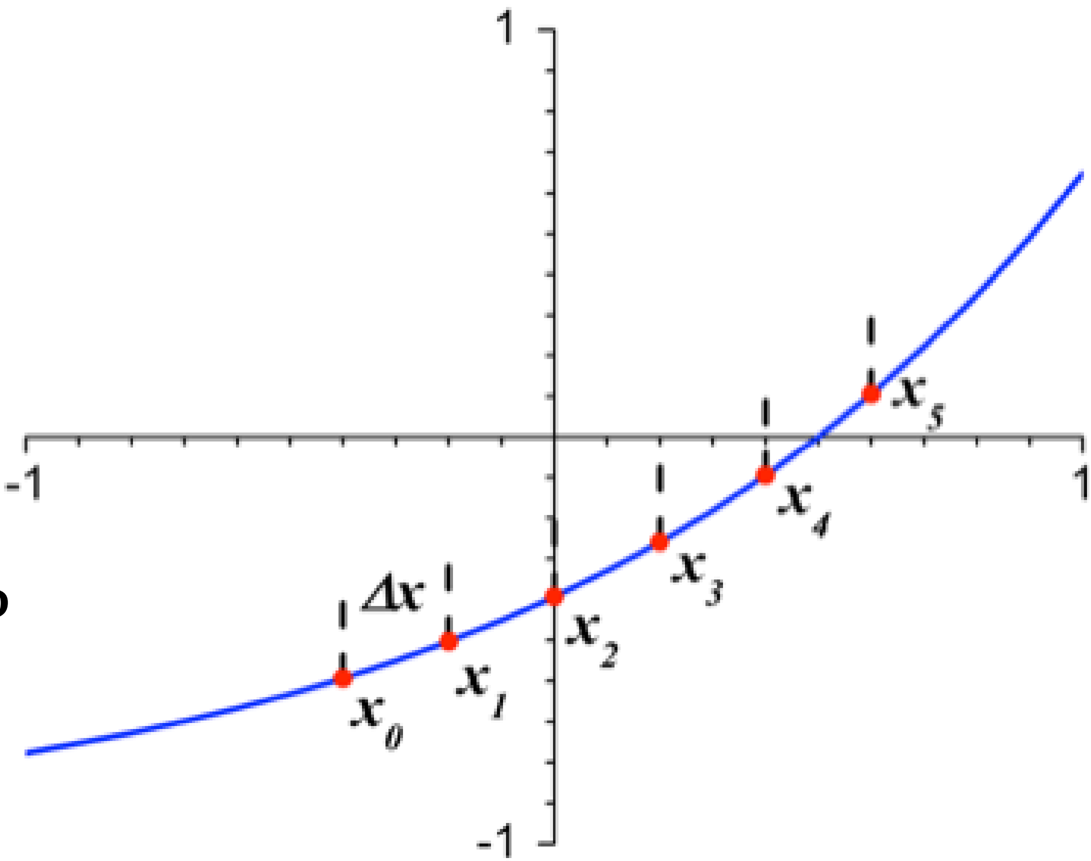
RECHERCHE INCRÉMENTALE (INCREMENTAL SEARCH)

Recherche incrémentale (Incremental Search)

Une approche simple «pas à pas» pour trouver la racine.

On commence avec une valeur, x_0, et on avance par un increment, Δx, jusqu'à ce qu'il y ait un changement dans le signe de $f(x)$.

$$f(x)\cdot f(x+\Delta x)<0\,?$$



RECHERCHE INCRÉMENTALE – ALGORITHME

1. Évaluez la fonction, $f(x)$, à deux valeurs différentes : x and $x+\Delta x$.
2. Continuez à prendre des pas jusqu'à:

$$f(x)\cdot f(x+\Delta x)<0$$

3. Diminuez la valeur de Δx par un facteur (ex. 2)
4. Répétez les étapes 1 à 3 jusqu'à ce que $\varepsilon_a < \varepsilon_s$, où

$$\varepsilon_a=\left|\frac{\frac{\Delta x}{2}}{x+\frac{\Delta x}{2}}\right|\times 100\%$$

5. Définir la racine au point médian de la taille de l'étape actuelle

Recherche incrémentale – Exemple

Résoudre $e^x = x^2$ avec ε_s = 0.1%

i	x	Δx	$x+\Delta x$	$f(x)$	$f(x+\Delta x)$	$f(x)\cdot f(x+\Delta x)$	ε_a
1	-1	0.1	-0.9	-0.6321	-0.4034	+	-
2	-0.9	0.1	-0.8	-0.4034	-0.1907	+	-
3	-0.8	0.1	-0.7	-0.1907	0.0066	-	6.667%
4	-0.8	0.05	-0.75	-0.1907	-0.0901	+	-
5	-0.75	0.05	-0.7	-0.0901	0.0066	-	3.448%
15	-0.7046875	0.00078125	-0.70390625	-0.0023	-0.0008	+	-
16	-0.70390625	0.00078125	-0.703125	-0.0008	0.0007	-	0.056%
17	-0.70390625	0.000390625	-0.703515625	-0.0008	-9.167×10^{-5}	+	-

Note: Certains nombres sont arrondis pour s'adapter à la table. Par contre, les calculs ont été effectués sans d'arrondissement.

RECHERCHE INCRÉMENTALE – DÉSAVANTAGES

1. **Dépend sur la grandeur de l'étape (Δx)**
   - **Une taille trop petite** peut être inefficace
   - **Une taille d'étape trop grande** peut manquer une racine si plusieurs racines sont présentes.

Solution possible: Tracez la fonction pour déterminer une bonne estimation initiale.

2. **Discontinuités**
   - Une **asymptote** (discontinuité) sera détectée comme une racine

Possible Solution: Chaque fois que la taille de l'étape est diminuée, comparez la différence entre *f(x)* et *f(x+Δx)* à la différence précédente. Si la différence a augmentée, il y a un asymptote.

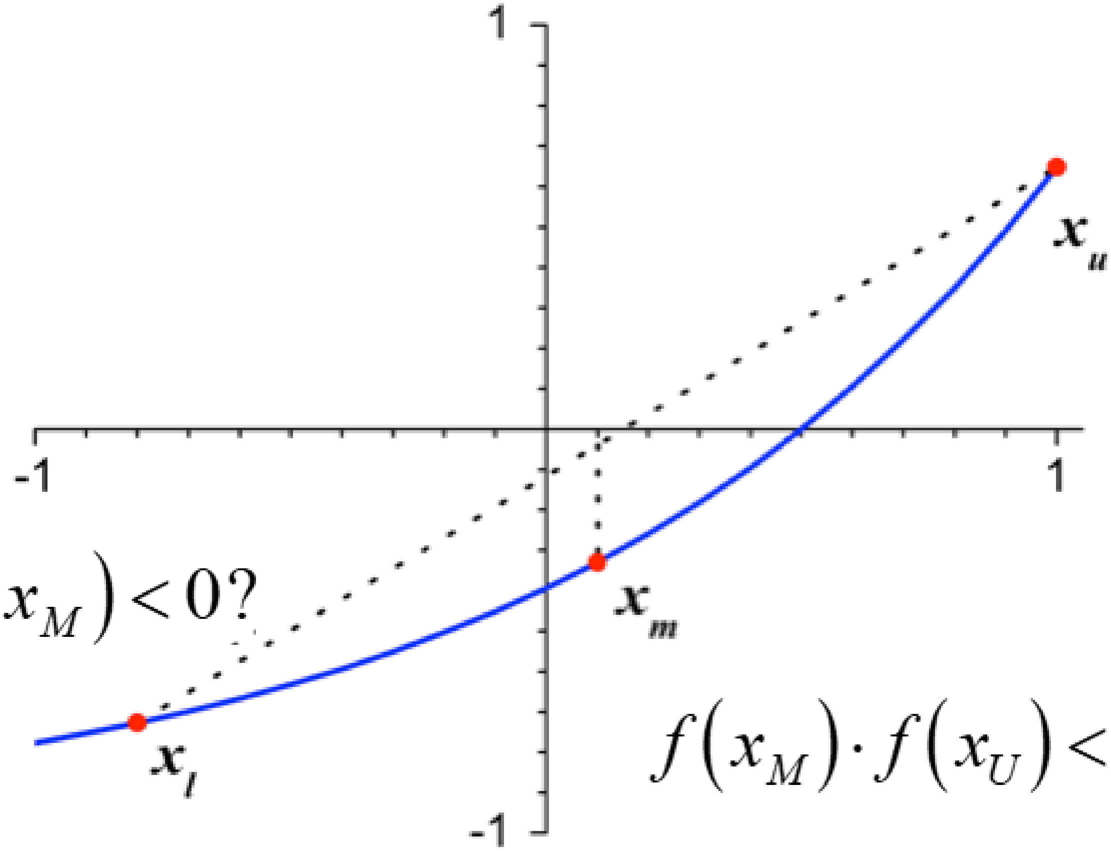
Section 2.3

MÉTHODE DE BISSECTION (BISECTION METHOD)

MÉTHODE DE BISSECTION

Améliore la convergence en divisant **systématiquement** l'intervalle en deux.

$$x_M = \frac{x_L + x_U}{2}$$



$$f(x_L)\cdot f(x_M) < 0?$$

$$f(x_M)\cdot f(x_U) < 0?$$

Méthode de Bissection - Algorithme

1. Commence avec deux points, x_L et x_U, qui ont la racine délimitée ($f(x_L) \cdot f(x_U) < 0$)
2. Trouvez le point médian: $x_M = (x_L + x_U)/2$
3. Si $f(x_L) \cdot f(x_M) < 0$ définissez $x_U = x_M$, sinon $x_L = x_M$
4. Répétez les étapes 2 à 3 jusqu'à ce que $\varepsilon_a < \varepsilon_s$, où

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_M^{new} - x_M^{old}}{x_M^{new}} \right| \times 100\%$$

5. La racine est fixée au point médian de x_L et x_U avec une erreur de $(x_u - x_l)/2$

Méthode de Bissection - Exemple

Résoudre $e^x = x^2$ avec ε_s = 0.1%

i	x_L	x_U	x_M	$f(x_L)$	$f(x_M)$	$f(x_L)\cdot f(x_M)$	ε_a
1	-1	0	-0.5	-0.6321	0.3565	-	-
2	-1	-0.5	-0.75	-0.6321	-0.0901	+	33.333%
3	-0.75	-0.5	-0.625	-0.0901	0.1446	-	20.000%
4	-0.75	-0.625	-0.6875	-0.0901	0.0302	-	9.091%
5	-0.75	-0.6875	-0.71875	-0.0901	-0.0292	+	4.348%
9	-0.70703125	-0.703125	-0.705078125	-0.0068	-0.0031	+	0.277%
10	-0.705078125	-0.703125	-0.704101563	-0.0031	-0.0012	+	0.139%
11	-0.704101563	-0.703125	-0.703613281	-0.0012	-0.0003	+	0.069%

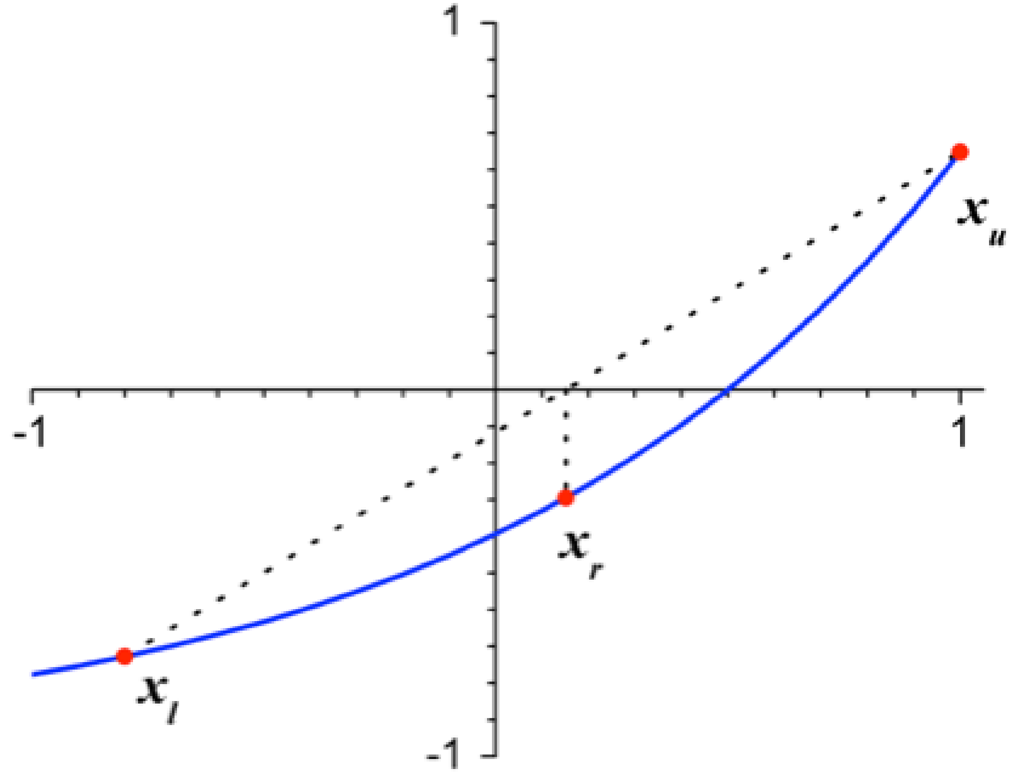
Note: Certains nombres sont arrondis pour s'adapter à la table. Par contre, les calculs ont été effectués sans d'arrondissement.

Section 2.4

INTERPOLATION LINÉAIRE

INTERPOLATION LINÉAIRE

Aussi connu sous le nom de **méthode de fausse position**, se rapproche de la racine par l'ajustement de deux points avec une ligne et en trouvant le abscisse à l'origine.



INTERPOLATION LINÉAIRE – ALGORITHME

1. La procédure générale pour l'interpolation linéaire est:

2. Détermine x_R

$$x_R = x_L - \frac{f(x_L)(x_U - x_L)}{f(x_U) - f(x_L)}$$

3. Si $f(x_L) \cdot f(x_R) < 0$, définissez $x_U = x_R$, sinon $x_L = x_R$

4. Répétez les étapes 1 à 2 jusqu'à ce que $\varepsilon_a < \varepsilon_s$, où

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_R^{new} - x_R^{old}}{x_R^{new}} \right| \times 100\%$$

5. La racine est égal à la dernère valeur de x_R, avec une estimation d'erreur prudente basée sur la méthode de bisection.

INTERPOLATION LINÉAIRE - EXEMPLE

Résoudre $e^x = x^2$ avec ε_s = 0.1%

i	x_L	x_U	x_R	$f(x_L)$	$f(x_U)$	$f(x_R)$	$f(x_L)\cdot f(x_R)$	ε_a
1	-1	0	-0.612699837	-0.6321	1	0.1665	-	-
2	-1	-0.612699837	-0.693440079	-0.6321	0.1665	0.0190	-	11.643%
3	-1	-0.693440079	-0.702383093	-0.6321	0.0190	0.0021	-	1.273%
4	-1	-0.702383093	-0.703350443	-0.6321	0.0021	0.0002	-	0.138%
5	-1	-0.703350443	-0.703454806	-0.6321	0.0002	$2.399\text{x}10^{-5}$	-	0.015%

Note: Certains nombres sont arrondis pour s'adapter à la table. Par contre, les calculs ont été effectués sans d'arrondissement.

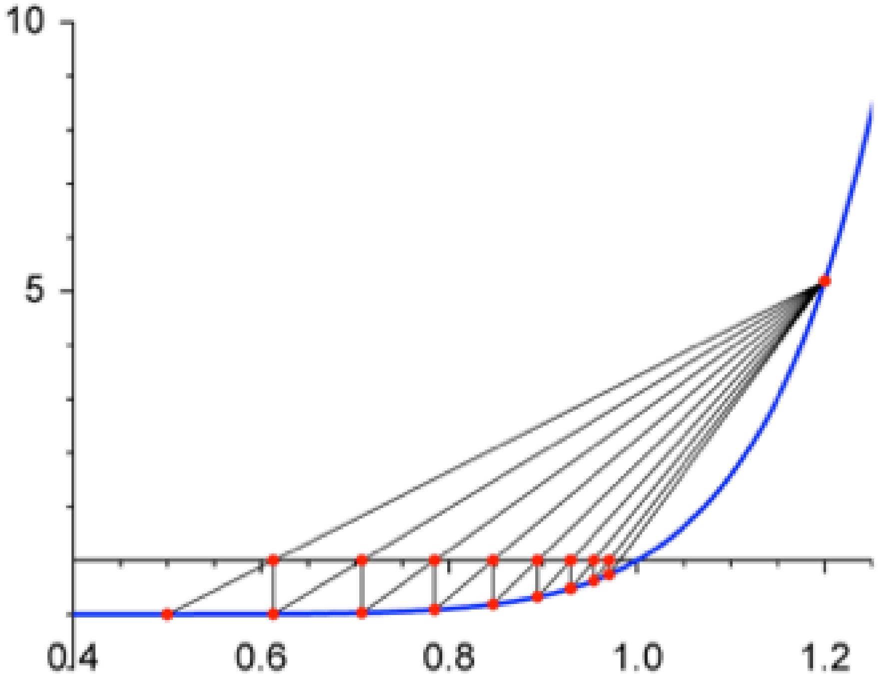
INTERPOLATION LINÉAIRE MODIFIÉE

L'interpolation linéaire peut parfois être très lente à converger.

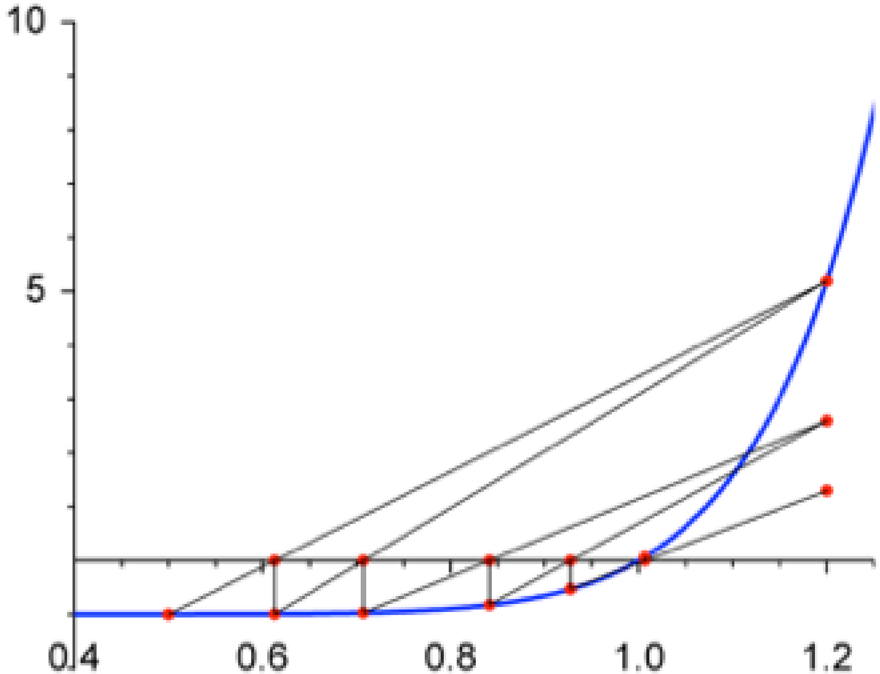
- Modifier le processus d'itération pour manipuler les délimitations fixes
- Si une des deux délimitations, soit x_L ou x_U, est fixé égal à x_R pour deux itérations consécutives ou plus, la valeur de $f(x)$ est réduite de moitié.
- Ceci force x_R plus près de la limite fixe, accélérant la convergence.

COMPARISON ENTRE INTERPOLATION LINÉAIRE

Trouzez la racine pour $f(x) = x^{10} - 1$



Interpolation linéaire



Interpolation linéaire modifiée

Section 2.5

MÉTHODE DE RIDDER

MÉTHODE DE RIDDER

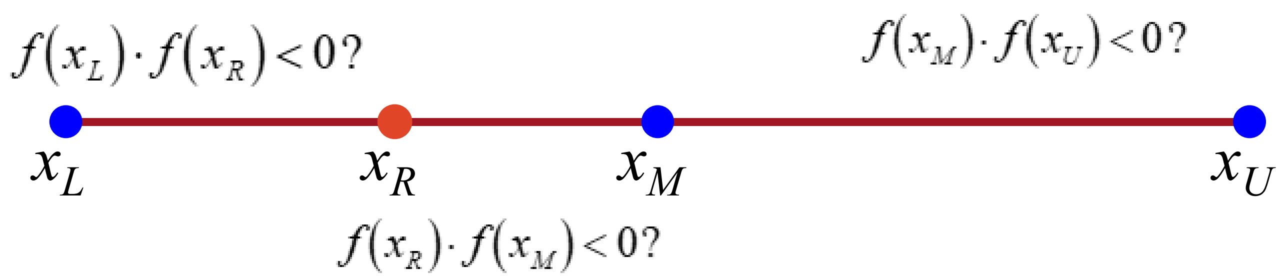
Ajuste une fonction exponentielle à travers trois points, la limite inférieure, x_L, la limite supérieure, x_U, et le point médian, x_M, donnant une **estimation de la racine**, x_R.

$$x_R = x_M + (x_M - x_L)\frac{\mathrm{sgn}\left[f(x_L) - f(x_U)\right]f(x_M)}{\sqrt{f^2(x_M) - f(x_L)\cdot f(x_U)}}$$

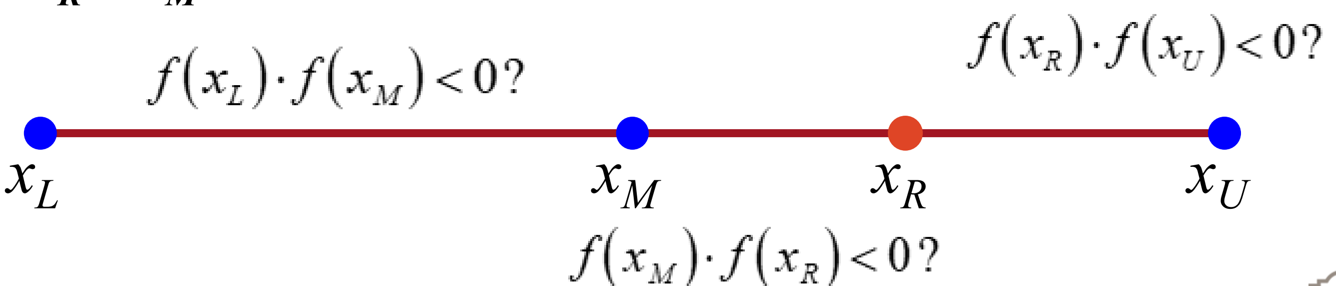
Pour plus d'informations, consultez le document original: Ridder, C.F. IEEE Transactions on Circuits and Systems, vol CAS-26, pp 979-980, 1979.

MÉTHODE DE RIDDER – ALGORITHME

1. Trouvez x_M à partir des delimitations: $x_M = (x_L + x_U)/2$.
2. Calculez x_R.
3. Déterminez quelle intervalle délimite (ou entoure) la racine.
   a. **Si $x_R < x_M$ alors:**



   b. **Si $x_R > x_M$ alors:**



MÉTHODE DE RIDDER - ALGORITHME

4. Définissez les nouvelles délimitations, x_L et x_U , basées sur l'intervalle qui délimite la racine (étape 3)

5. Répétez les étapes 1 à 4 jusqu'à ce que $\varepsilon_a < \varepsilon_s$, où

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_R^{new} - x_R^{old}}{x_R^{new}} \right| \times 100\%$$

6. Définir la racine comme la dernière valeur de x_R.

MÉTHODE DE RIDDER - EXEMPLE

Résoudre $e^x = x^2$ avec ε_s = 0.1%

i	x_L	x_U	x_M	x_R	$f(x_L)$	$f(x_U)$	$f(x_M)$	$f(x_R)$	ε_a
1	-1	0	-0.5	-0.704587394	-0.6321	1	0.3565	-0.0021	-
2	-0.70459	-0.5	-0.60229	-0.703468165	-0.0021	0.3565	0.1848	-1.4×10^{-6}	0.159%
3	-0.70347	-0.60229	-0.65288	-0.703467423	-1.4×10^{-6}	0.1848	0.0943	-2.4×10^{-10}	0.0001%

Note: Certains nombres sont arrondis pour s'adapter à la table. Par contre, les calculs ont été effectués sans d'arrondissement.

Section 2.6

MÉTHODE NEWTON-RAPHSON

MÉTHODE NEWTON-RAPHSON

Tronquer le développement de la série Taylor d'une certaine fonction après la première dérivée donne:

$$f\left(x_{i+1}\right)=f\left(x_i\right)+f'\left(x_i\right)\left(x_{i+1}-x_i\right)$$

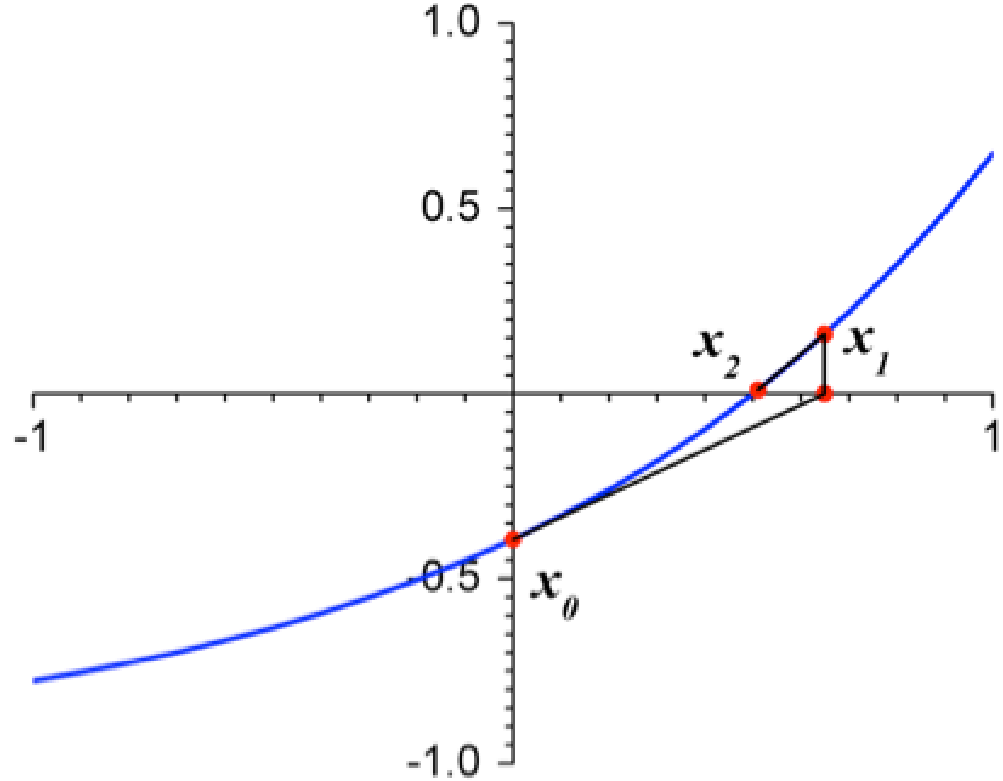
Réorganiser la formule pour x_{i+1} donne **l'equation Newton-Raphson**

$$x_{i+1}=x_i-\frac{f\left(x_i\right)}{f'\left(x_i\right)}$$

MÉTHODE NEWTON-RAPHSON

Peut converger très rapidement pour des systèmes bien conditionnés.

Par contre, peut facilement diverger si une estimation atterrit sur ou près d'un minimum ou maximum local.



MÉTHODE NEWTON-RAPHSON - ALGORITHME

1. Avec une première estimation, x_i, calculez $f(x_i)$ et $f'(x_i)$
2. Calculez x_{i+1}
3. Répétez les étapes 1 et 2 jusqu'à ce que la racine exacte soit trouvée, ou l'erreur désirée soit atteinte

$$\varepsilon_a = \left|\frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}}\right| \times 100\%$$

4. Vérifiez que $f(x_{i+1}) \approx 0$ et définissez la racine comme la dernière valeur de x_{i+1}.

MÉTHODE NEWTON-RAPHSON - EXEMPLE

Résoudre $e^x = x^2$ avec ε_s = 0.1%

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	ε_a
0	-1	-0.632120559	2.367879441	
1	-0.733043605	-0.056908448	1.94653169	36.418%
2	-0.703807786	-0.000647392	1.902313581	4.154%
3	-0.703467468	$-8.7166\text{x}10^{-8}$	1.901801328	0.048%
4	-0.703467422	$-1.4988\text{x}10^{-15}$	1.90180126	0.00001%

≈ 0

MÉTHODE NEWTON-RAPHSON - CALCULATRICE

Si la fonction et le dérivé sont relativement simples, la méthode Newton-Raphson peut être faite sur une calculatrice standard facilement. Remarque: La calculatrice a besoin d'un bouton **ANS**.

Exemple: $e^x = x^2$

1. Effectuer un calcul au hasard où alors la réponse est votre estimation du x initiale. ex., **1 - 2 = -1**.

2. Utilizez le bouton ANS (habituellement 2e fonction) comme la variable dans la méthode Newton-Raphson

   ANS – (EXP(ANS)-ANS^2)/(EXP(ANS)-2*ANS)

3. Appuyez sur « = » jusqu'à ce que la réponse converge.

PROBLÈMES SUGGÉRÉS DU MANUEL

7e Édition

- Case Studies: 8.1, 8.2, 8.4,
- Problèmes: 8.4, 8.7, 8.13

6e Édition

- Case Studies: 8.1, 8.2, 8.4
- Problèmes: 8.3, 8.7, 8.12