Méthodes numériques et langage C

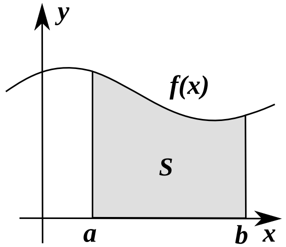
Intégration numérique

R. Flamary

3 septembre 2018

Intégration numérique

$$I = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$



Objectif

- Calcul numérique de la surface s à partir d'un nombre fini d'appels à la fonction.
- Cas particulier lorsque l'on a accès à un échantillonnage régulier.
- On appelle une formule de quadrature une expression linéaire fournissant une intégration approchée sur un intervalle.

Raisons

- f n'est connue qu'en certains points.
- Primitive F connue mais pas une fonction élémentaire. (intégrale de $\exp(-x^2)$).
- Primitive trop difficile à calculer numériquement.

Définitions

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

Hypothèses

- a et b deux réels avec $a < b$.
- On suppose f intégrable sur $[a, b]$.
- f ne dispose pas de singularités sur $[a, b]$.

Mise en oeuvre

Approche classique :

- Décomposition du domaine en morceaux (un intervalle en sous-intervalles contigus).
- Intégration approchée de la fonction sur chaque morceau.
- Sommation des résultats numériques ainsi obtenus.

Utilisation de polynômes pour approcher la fonction sur chaque morceau.

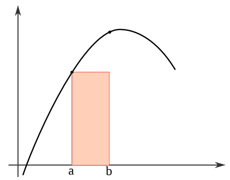
Intégration par quadrature simple

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad \text{avec} \quad h = (b - a)$$

Formule du rectangle

$$I = hf(a) \text{ (ou } hf(b)) + O\left(\frac{h^2}{2}f'(\mu)\right) \quad \mu \in [a, b]$$

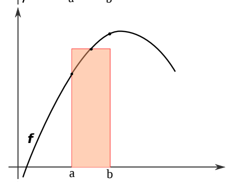
Méthode d'ordre 0, exacte pour les fonctions constantes.



Formule du point milieu

$$I = hf\left(\frac{a+b}{2}\right) + O\left(\frac{h^3}{24}f''(\mu)\right) \quad \mu \in [a, b]$$

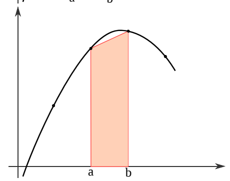
Méthode d'ordre 1, exacte pour des fonctions linéaires.



Formule du trapèze

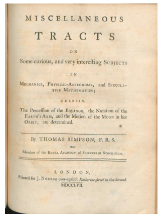
$$I = h\frac{f(a) + f(b)}{2} + O\left(\frac{h^3}{12}f''(\mu)\right) \quad \mu \in [a, b]$$

Méthode d'ordre 1, exacte pour des fonctions linéaires.



Intégration par quadrature simple (2)

Formule de Simpson



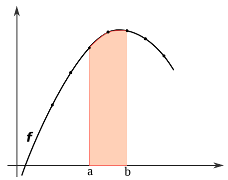
- Popularisée pas Simpson mais utilisée par Kepler 100 ans plus tôt.
- Interpolation de f par un polynôme d'ordre 2.
- On calcule la valeur de la fonction en a, b et $m = \frac{a+b}{2}$.
- Interpolation polynomiale de Lagrange :

$$P(x) = f(a)\frac{(x-m)(x-b)}{(a-m)(a-b)} + f(m)\frac{(x-a)(x-b)}{(m-a)(m-b)} + f(b)\frac{(x-a)(x-m)}{(b-a)(b-m)}.$$

- Intégrale approchée obtenue en intégrant le polynome :

$$I = h\frac{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)}{6} + O\left(\frac{h^5}{90 * 2^5} f^{(4)}(\mu)\right)$$

- Méthode d'ordre 2, exacte pour des fonctions quadratiques et cubiques.



Formules de Newton-Cotes

- Intégration numérique sur $[a, b]$ sur $n+1$ points régulièrement échantillonnés.
- Soit $x_i = a + i\Delta$ avec $\Delta = \frac{(b-a)}{n} = \frac{h}{n}$ et $f_i = f(x_i), \quad \forall i$.
- La formule de degré n est définie par

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_i)$$

où les w_i sont appelés coefficients de quadrature.

- On déduit les poids w_i d'une interpolation de Lagrange de la fonction :

$$f(x) \approx L(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x), \qquad \text{avec} \qquad l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

- L'intégrale devient donc

$$I \approx \int_a^b L(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b l_i(x)\,\mathrm{d}x}_{w_i}. \qquad (1)$$

Formule de Newton-Cotes (2)

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=0}^{n} w_i\, f(x_i)$$

- Permet de retrouver les formules de quadrature simple :

Degré	Nom	Formule	Erreur
1	Trapèze	$\frac{h}{2}(f_0 + f_1)$	$-\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\mu)$
2	Simpson	$\frac{h}{6}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	$-\frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\mu)$
4	Boole	$\frac{h}{90}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$	$-\frac{h^7}{1935360} f^{(6)}(\mu)$

pour $\mu \in [a, b]$ et $h = (b - a)$.

- Formule définie pour n'importe quel degré n.
- Problème d'instabilité numérique pour de grand n (Phénomène de Runge).
- En pratique, on préfère découper la fonction en petits intervalles et utiliser des quadratures de degré faible sur ces intervalles.

Quadrature de Gauss

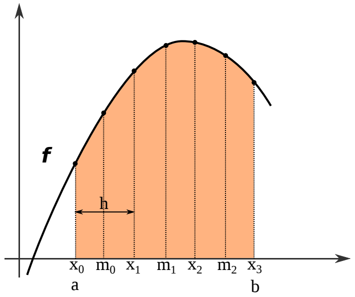
- On approche encore une fois l'intégrale par

$$I = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

- Les w_i sont les coefficients de quadrature et les x_i sont choisis comme les racine de polynômes orthogonaux.
- On n'utilise pas d'échantillonnage régulier, possibilité d'avoir une meilleure approximation de f.
- Intégration exacte pour des polynômes de degré $2n - 1$.
- Exemple pour $[a, b] = [-1, 1]$ avec les polynômes de Legendre :

Nb de points	Poids w_i	Points x_i	Poly. de Legendre
1	2	0	x
2	$1, 1$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}$	$(3x^2 - 1)/2$
3	$\frac{5}{9}, \frac{8}{9}, \frac{5}{9}$	$-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}, 0, \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}}$	$(5x^3 - 3x)/2$

Méthodes composites



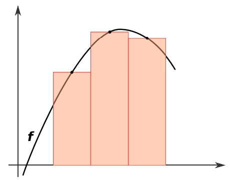
- Les formules de Newton Cotes ont toutes une erreur sous la forme d'une puissance de $(b-a)$.
- En pratique on découpe $[a,b]$ en n sous intervalles et on utilise les formules de Newton-Cotes sur les petits intervalles.
- La longueur de l'intervalle d'intégration devient donc $h = \frac{b-a}{n}$.
- Nous définissons les points d'échantillonnage régulier suivants :

$$x_k = a + kh, \qquad m_k = a + (k+1/2)h, \quad \forall k \in 0, \ldots, n$$

Méthodes composites (2)

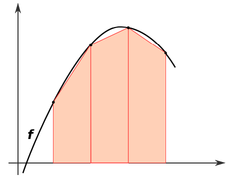
Méthode du point milieu

$$I = h \sum_{k=0}^{n-1} f(m_k)$$



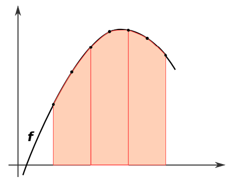
Méthode du trapèze

$$I = h \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) \right)$$



Méthode de Simpson

$$I = \frac{h}{6} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4 \sum_{k=0}^{n-1} f(m_k) \right)$$



avec $h = \frac{b-a}{n}$.

Pointeur de fonction en C

- Comment passer une fonction en paramètre pour l'intégrer ?
- On utilise des pointeurs de fonction.
- Un pointeur de fonction est déclaré par :

`type_ret (*nomfunc)(params);`

Code source

```
double sum_f_a_b(double (*f)(double)
     ,double a,double b)
{
  return f(a)+f(b);
}

int main()
{
printf("sqrt(1)+sqrt(2)=%f\n",
     sum_f_a_b(sqrt,1,2));
printf("cos(0)+cos(1)=%f\n",
     sum_f_a_b(cos,0,1));
printf("exp(0)+exp(1)=%f\n",
     sum_f_a_b(exp,0,1));
}
```

Sortie

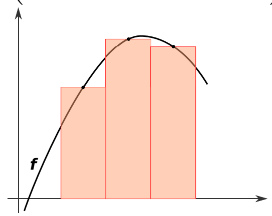
```
$./ex_pfunc
sqrt(1)+sqrt(2)=2.414214
cos(0)+cos(1)=1.540302
exp(0)+exp(1)=3.718282
```


Implémentation des méthodes composites en C

Méthode du point milieu

$$h \left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) \right)$$

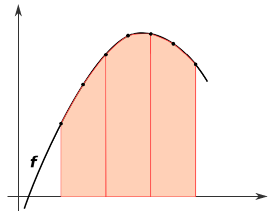
```
double int_middle(double (*f)(double
     ),double a,double b,int n)
{
  double res=0;
  double h=(b-a)/n;
  for (int i=0;i<n;i++)
    res+=f(a+(i+.5)*h);
  return res*h;
}
```



Méthode de Simpson

$$\frac{h}{6} \left(f(a) + f(b) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4 \sum_{k=0}^{n-1} f(m_k) \right)$$

```
double int_simpson(double (*f)(
     double),double a,double b,int n)
{
  double h=(b-a)/n;
  double res=f(a)+f(b)+4*f(a+h/2);
  for (int i=1;i<n;i++)
    res+=2*f(a+i*h)+4*f(a+(i+.5)*h);
  return res*h/6;
}
```



Méthodes adaptatives

Principe

- Échantillonnage fin pas nécessaire sur tout l'intervalle $[a, b]$.
- On adapte l'échantillonnage le long de l'intervalle de manière récursive.
- `integrate(f,a,b,tau)` :
  1. Calcul de $I \approx \int_a, bf(x)dx$
  2. Estimation de l'erreur $\epsilon \approx |I - \int_a, bf(x)dx|$
  3. Si $\epsilon > \tau$,
     $I =$`integrate(f,a,(a+b)/2,tau)+integrate(f,(a+b)/2,b,tau)`
  4. Retourner I
- Approches classiques :
  - Méthode de Romberg (Trapèze+ extrapolation de Richardson).
  - Méthode de Simpson adaptative (Simpson+ extrapolation de Richardson).

Méthode de Simpson adaptative

Sur l'intervalle $[a, b]$ avec $m = \frac{a+b}{2}$, la méthode de Simpson s'appelle avec $S(a, b)$.

1. Calculer $S(a, b), S(a, m)$ et $S(m, b)$.
2. Si l'erreur $|S(a, b) - S(a, m) - S(m, b)|/15 > \tau$ on divise l'intervalle $[a, b]$.
3. Sinon, on retourne $S(a, m) + S(m, b) + (S(a, m) + S(m, b) - S(a, b))/15$.

Méthode de Simpson adaptative en C

Implémentation simplifiée

```c
double simpson(double (*f)(double),
      double a,double b)
{
  return (b-a)/6*(f(a)+4*f((a+b)/2)+f
       (b));
}

double int_adaptsimpson(double (*f)(
      double),double a,double b,double
       tau)
{
  double m=(a+b)/2;
  double Sab=simpson(f,a,b),Sam=
       simpson(f,a,m),Smb=simpson(f,m
       ,b);
  if (fabs(Sab-Sam-Smb)/15<tau)
    return Sam+Smb+(Sam+Smb-Sab)/15;
  else
    return int_adaptsimpson(f,a,m,tau
         )+int_adaptsimpson(f,m,b,tau
         );
}
```

Discussion

- Fonction récursive (complexité dépend de f et τ).
- Paramètre de précision τ directement lié à l'erreur acceptable.
- Implémentation non efficace, comment faire mieux ?

Méthodes de Monte Carlo

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i), \qquad x_i \sim U(a, b) \quad \forall i$$

- Intégration numérique utilisant des réalisations de variables aléatoires.
- La méthode converge vers la bonne valeur lorsque $n \to \infty$
- L'erreur en espérance $\epsilon = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$ décroît très lentement.
- Très utilisée pour les intégrales multiples car erreur indépendante de la dimension.
- Version plus efficaces basées sur l'échantillonnage préférentiel (VEGAS, MISER).

Implémentation

```c
double int_montecarlo(double (*f
      )(double),double a,double b,
      int n)
{
  double res=0;
  for (int i=0;i<n;i++)
    res+=f(a+rand()*1.0/RAND_MAX*
         (b-a));
  return res/n;
}
```

Discussion

- n nombre de réalisations.
- `rand()/RAND_MAX` réalisation d'une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$.
- `a+rand()*1.0/RAND_MAX*(b-a)` réalisation d'une variable aléatoire uniforme sur $[a, b]$.

Comparaison numérique

$$I = \int_0^1 4\sqrt{1 - x^2}dx = \pi$$