## 5 Quelques outils numériques en vrac

### I Calcul numérique de la dérivée de f(x)

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} = \frac{f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\dots-f(x)}{h} = f'(x)+O(h)$$

alors que

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} = \frac{1}{2h}\left(f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f'''(x)+O(h^3)-\left(f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+O(h^3)\right)\right)$$

$$= f'(x) + O(h^2)$$

! toujours utiliser cette formule !

### II Dérivées secondes

Même idée : si possible symétriser :

$$\frac{f'(x+\frac{h}{2})-f'(h-\frac{h}{2})}{h} = \frac{\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-\frac{f(x)-f(x-h)}{h}}{h}$$

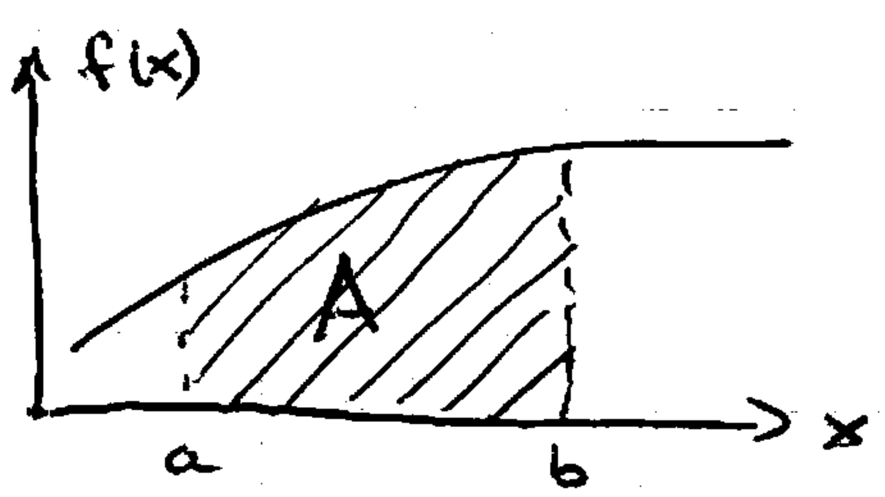
$$= \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$$

$$= \frac{f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+\frac{h^3}{3!}f'''(x)+O(h^4)-2f(x)+f(x)-hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)-\frac{h^3}{3}f'''(x)}{h^2}$$

$$= f''(x) + O(h^2)$$

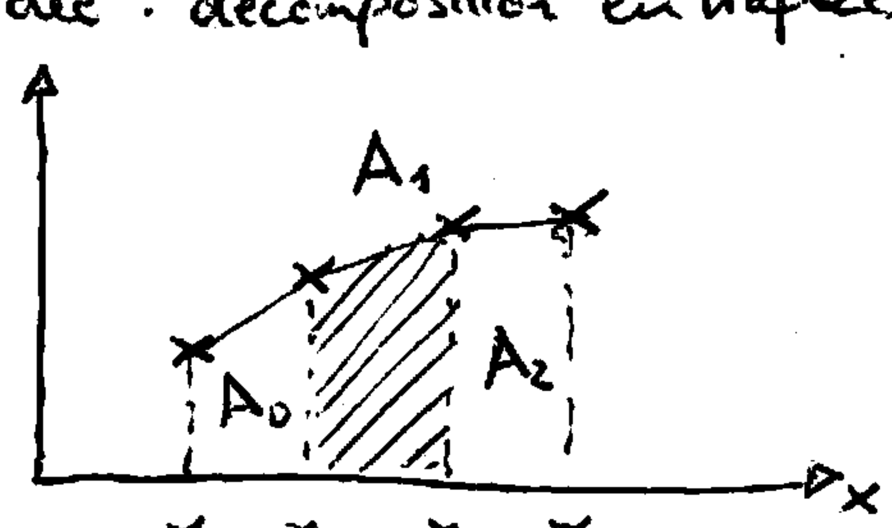
$$\Rightarrow \quad f''(x) = \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

### III Quadrature (calcul d'intégrales)




aire $A = \int_a^b f(x)\,dx := ?$

① idée : décomposition en trapèzes




$$A_0 = (x_1-x_0)\cdot\left(\frac{f(x_1)+f(x_0)}{2}\right), \quad A_1 = (x_2-x_1)\left(\frac{f(x_2)+f(x_1)}{2}\right)$$

...

$$\leadsto A \simeq A_0 + A_1 + A_2$$

fonction f(x) approximée par morceaux de droites si on peut choisir les $x_i$ librement, on peut les prendre équidistants :

$$x_{i+1} - x_i = h$$

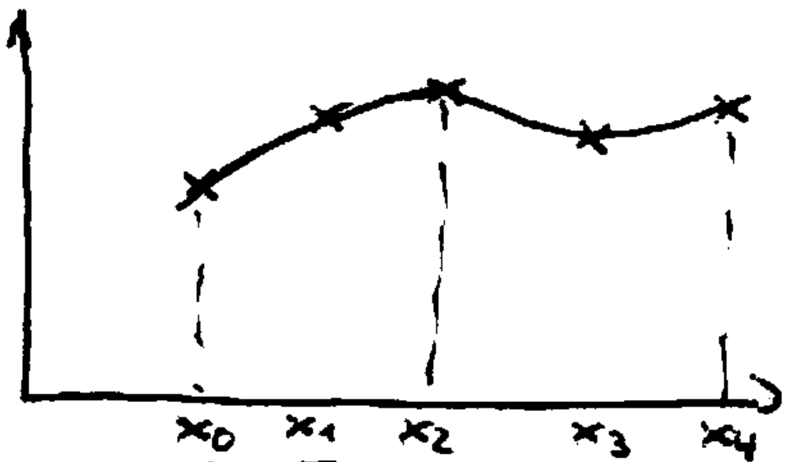
$$\Rightarrow \quad A = \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + \frac{h}{2}(f(x_1) + f(x_2)) + \cdots$$

$$= \frac{h}{2} f(x_0) + h(f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1})) + \frac{h}{2} f(x_n)$$

erreur ?

$$E = \left| \int_a^b f(x)\,dx - h\left[\frac{f(x_0)}{2} + \sum_1^{n-1} f(x_i) + \frac{f(x_n)}{2}\right] \right| \leq \frac{h^2}{12} \max_{x \in (a,b)} |f''(x)|\,(b-a)$$

② approximation par paraboles : règle de Simpson




$$\tilde{f}(x) = \frac{1}{2h^2}\Big[(x - x_{2i+1})(x - x_{2i+2}) f_{2i} - 2(x - x_{2i})(x - x_{2i+2}) f_{2i+1}$$
$$+ (x - x_{2i})(x - x_{2i+1}) f_{2i+2}\Big]$$

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} (x - x_{2i+1})(x - x_{2i+2})\,dx = \int_{-h}^{h} x(x-h)\,dx = \left[\frac{x^3}{3} - h\frac{x^2}{2}\right]_{-h}^{h} = \frac{2h^3}{3}$$

...

$$\rightsquigarrow \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x) \simeq \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} \tilde{f}(x) = \frac{h}{3}(f_{2i} + 4 f_{2i+1} + f_{2i+2})$$

$$\Rightarrow \int_a^b f(x) = \sum_0^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x) = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + f(b)\right]$$

erreur $\sim f'''' \cdot h^4$

③ stratégie adaptative

a) calculer approximat° $R_1$ en utilisant $n+1$ points

b) " " $R_2$ " " $2n+1$ points

c) calculer estimation de l'erreur sur $R_1$ à partir de $R_1$ et $R_2$.

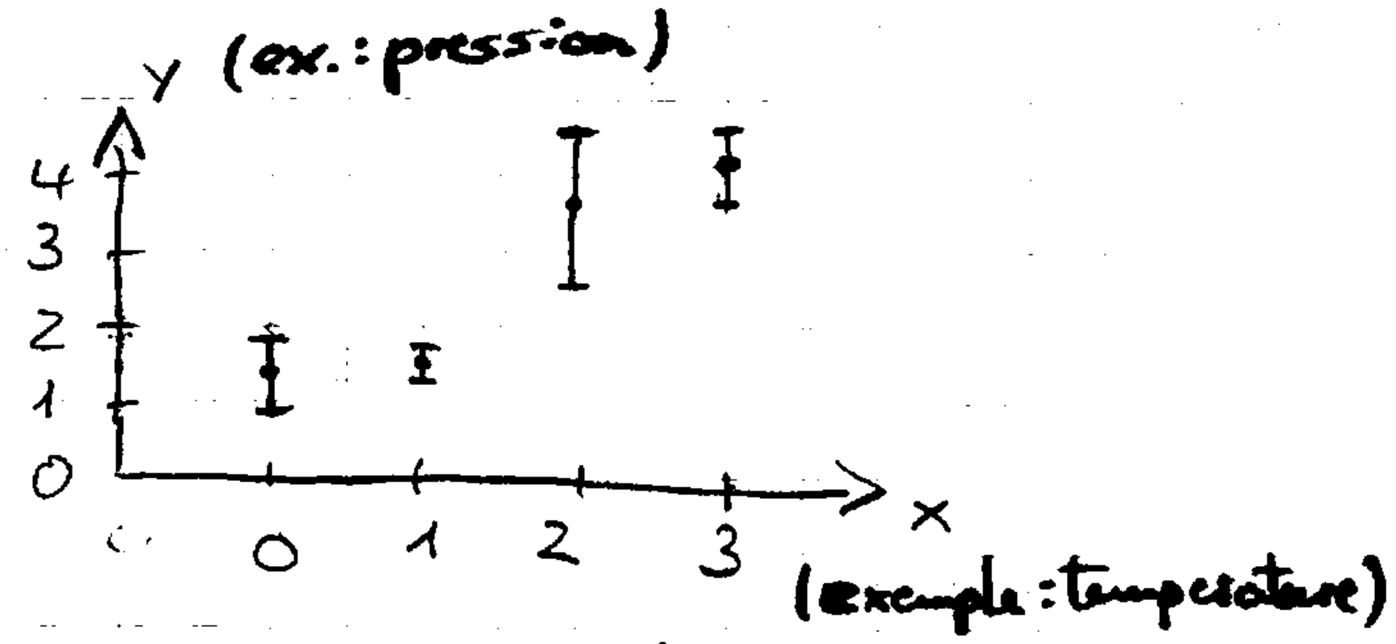
d) si l'erreur est suff.t petite, accepter $R_1$ (ou $R_2$)

e) sinon diviser $[a,b]$ en deux sous-intervalles et répeter a)-d) sur chacun.

# IV Ajustement d'une fonction à des mesures bruitées

## ① regression linéaire

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| mesures : n°: | $j$ | 1 | 2 | 3 | 4 |
| var. indép. : | $x_j$ | 0.0 | 1.0 | 2.0 | 3.0 |
| mesure : | $y_j$ | 1.4 | 1.5 | 3.7 | 4.1 |
| erreur : | $\sigma_j$ | 0.5 | 0.2 | 1.0 | 0.5 |




modèle physique ⇝ relation lineaire $y = b_1 + b_2 x$ attendue $= f_{b_1,b_2}(x)$

dans l'expérience : $y_i = f(x_i) + \varepsilon_i$
erreur de mesure, résidu
(supposée Gaussienne de variance $\sigma_i$)

question : quel est le meilleur choix pour les paramètres $b_1, b_2$ ?

idée : minimiser la somme des résidus (au carré) :

$$M(b_1,b_2) = \sum_i \frac{(y_i - f_{b_1,b_2}(x_i))^2}{\sigma_i^2} \qquad \left(\begin{matrix}\text{Gauss}\\ \text{Legendre}\end{matrix}\right)$$

($M = 0 \Rightarrow$ la droite passe par tous les points)
($M > 0 \Rightarrow$ plus $M$ est grand, plus on passe loin des points)

condit° nécessaire pour minimum :

$$* \quad 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial M}{\partial b_1} = \sum_i 2\frac{y_i - f_{b_1,b_2}(x_i)}{\sigma_i^2}\left(-\frac{\partial f}{\partial b_1}(x_i)\right) = -2\sum_i \frac{y_i - b_1 - b_2 x_i}{\sigma_i^2}.$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} - \frac{1}{\sigma_i^2} b_1 - \frac{x_i}{\sigma_i^2} b_2$$

$$* \quad 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial M}{\partial b_2} = \sum_i 2\frac{y_i - f_{b_1,b_2}(x_i)}{\sigma_i^2}\left(-\frac{\partial f}{\partial b_2}(x_i)\right) = -2\sum \frac{y_i - b_1 - b_2 x_i}{\sigma_i^2} x_i$$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = \sum \frac{y_i x_i}{\sigma_i^2} - \frac{x_i}{\sigma_i^2} b_1 - \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} b_2$$

en introduisant $a_{11} = \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$ , $a_{12} = a_{21} = \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2}$ , $a_{22} = \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$

$$c_1 = \sum \frac{y_i}{\sigma_i^2} , \quad c_2 = \sum \frac{y_i x_i}{\sigma_i^2}$$

et $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ , $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$ , $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$, on peut réécrire ces conditions :

$$A b = c$$

solution : $b = A^{-1} \cdot c = \frac{1}{\sum_{ij} \frac{x_i^2 - x_i x_j}{\sigma_i^2 \sigma_j^2}} \begin{pmatrix} \sum_{ij} \frac{(x_i^2 - x_i x_j) y_j}{\sigma_i^2 \sigma_j^2} \\ \sum_{ij} \frac{x_i (y_i - y_j)}{\sigma_i^2 \sigma_j^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.636 \\ 1.066 \end{pmatrix}$

pour notre exemple

$\leadsto$ meilleur ajustement : $f(x) = 0.636 + 1.066 \cdot x$

qualité ?

- le $M(b_1, b_2)$ correspondant ne doit pas être trop grand
  (pas de détails ici, c.f. mot clé « test $\chi^2$ » dans des ouvrages ~~de~~ num.)
- la matrice

$$A^{-1} = \left( \sum \frac{x_i^2 - x_i x_j}{\sigma_i^2 \sigma_j^2} \right)^{-1} \begin{pmatrix} \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} & -\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} \\ -\sum \frac{x_i}{\sigma_i^2} & \sum \frac{1}{\sigma_i^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.0943 & -0.0566 \\ -0.0566 & 0.0493 \end{pmatrix}$$

s'appelle matrice de covariance, la racine des éléments diagonaux donne l'erreur sur $b_1$ et $b_2$ : $\Delta b_1 = \sqrt{0.0943} \simeq 0.307$
$\Delta b_2 = \sqrt{0.0493} \simeq 0.222$

② ajustement d'un polynôme

on peut facilement généraliser à des polynômes

$$f(x) = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \dots \; b_n x^n$$

Pour simplifier, on suppose que l'incertitude est la même sur toutes les mesures ($\sigma_i = \sigma$ ; souvent le cas)

* $\leadsto \quad 0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial M}{\partial b_0} = \frac{2}{\sigma^2} \sum \; (y_i - f(x_i)) \frac{\partial f}{\partial b_0}(x_i)$

$$\Leftrightarrow \quad 0 = \sum (y_i - b_0 - b_1 x_i - b_2 x_i^2 - \dots \; b_n x_i^n) \qquad (0)$$

* $0 \stackrel{!}{=} \frac{\partial M}{\partial b_1} \leadsto \quad 0 = \sum (y_i - b_0 - b_1 x_i - b_2 x_i^2 - \dots \; b_n x_i^n) x_i \qquad (1)$

$\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots$

* $\quad 0 = \sum (y_i - b_0 - b_1 x_i - b_2 x_i^2 - \dots b_n x_i^n) x_i^n \qquad (n)$

$\Rightarrow$ système d'équ. linéaires pour les paramètres $b_0 \dots b_n$
$(n+1)$ équations $\qquad (n+1)$ paramètres

$\leadsto$ voir chapitre 3

③ ajustement d'une fonction quelconque

problème : nos conditions $0 = \sum (y_i - f(x_i, b_1 \ldots b_n)) \frac{\partial f}{\partial b_j}(x_i, b_1 \ldots b_n)$ ne sont plus des équ. linéaires en les $b_j$ ...

idée : I développement linéaire de $f$ autour d'une première estimation $b^* = (b_1^*, b_2^*, \ldots b_n^*)$ des paramètres :

$$f(x, b) \simeq f(x, b^*) + \underbrace{\sum_j \frac{\partial f}{\partial b_j}(x, b^*) \underbrace{(b_j - b_j^*)}_{\delta b_j}}_{g(x, \delta b)}$$

II on sait trouver le minimum de $\tilde{M}(\delta b) = \sum (\tilde{y}_i - g(x_i, \delta b))^2$ ($\tilde{y}_i = y_i - f(x_i, b^*)$) puisque $g$ est linéaire en $\delta b$ voir plus haut

III $b' = b^* + \delta b$ est probablement un meilleur jeux de paramètres pour le problème d'origine. Sinon (c-à-d si $M(b') > M(b^*)$) on réduit le pas jusqu'à ce que $M(b + \varepsilon \delta b) < M(b^*)$, $0 < \varepsilon < 1$ (on peut montrer qu'un tel pas $\varepsilon$ existe toujours dans un voisinage de 0)

IV retour en I avec $b'$ à la place de $b^*$

pas la seule technique : la minimisation d'une fonction est un vaste sujet !