"Techniques Scientifiques"

P. Castelan

philippe.castelan@laplace.univ-tlse.fr

Objectifs

- ★ Approfondissement de la connaissance de C
- ★ Sensibilisation aux problèmes du calcul numérique.
- ★ Connaissance des méthodes scalaires de base

Algorithme de Base

★ Calcul d'une somme

$$S = \sum_{i=0}^{i=n} X_i$$

```
A = 0 A est l'accumulateur
Pour tous les X
  A = A + Xk
fin
```

```
A = 0 ;
for ( i = 0 ; i<= n ; i++ )
    A = A + X[ i ] ;
```

Algorithmes de Base

★ Calcul d'un produit

$$N! = \prod_{k=1}^{N} k = 1 * 2 * 3 \cdots * N$$

```
A = 1 ;
for ( i = 1 ; i<= n ; i++ )
    A = A * i   ;
```

I Introduction au calcul scientifique

L'outil de base du calcul numérique est le développement limité…

$$f(x) = \frac{f(x_0)}{0\,!} + \frac{(x-x_0)}{1\,!}f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2\,!}f''(x_0) + \frac{(x-x_0)^3}{3\,!}f^{(3)}(x_0) + \ldots$$

En calcul numérique on tronque les D.L. :

$$f_1(x) = \frac{f(x_0)}{0\,!} + \frac{(x-x_0)}{1\,!}f'(x_0)$$

Approx. Linéaire

$$f_2(x) = \frac{f(x_0)}{0\,!} + \frac{(x-x_0)}{1\,!}f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2\,!}f''(x_0)$$

Approx. Quadratique

Notez que l'on écrit que ces DL sont exacts !

Bases du calcul numérique

Lorsque la fonction est polynôme de degré n, le DL est forcément borné.

$$f(x) = X^2 \rightarrow f'(x) = 2X \rightarrow f''(x) = 2 \rightarrow f^{(3)}(x) = 0\ldots$$

Toute fonction continue sur un intervalle peut être représentée par un polynôme.

Ainsi : $1,\ x,\ x^2,\ x^3, \ldots$ est une base pour toutes les fonctions… continues

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k x^k$$

Il est donc primordial de savoir calculer la valeur d'un polynôme… de façon efficace !

Polynôme

I Notions de Base / Notation

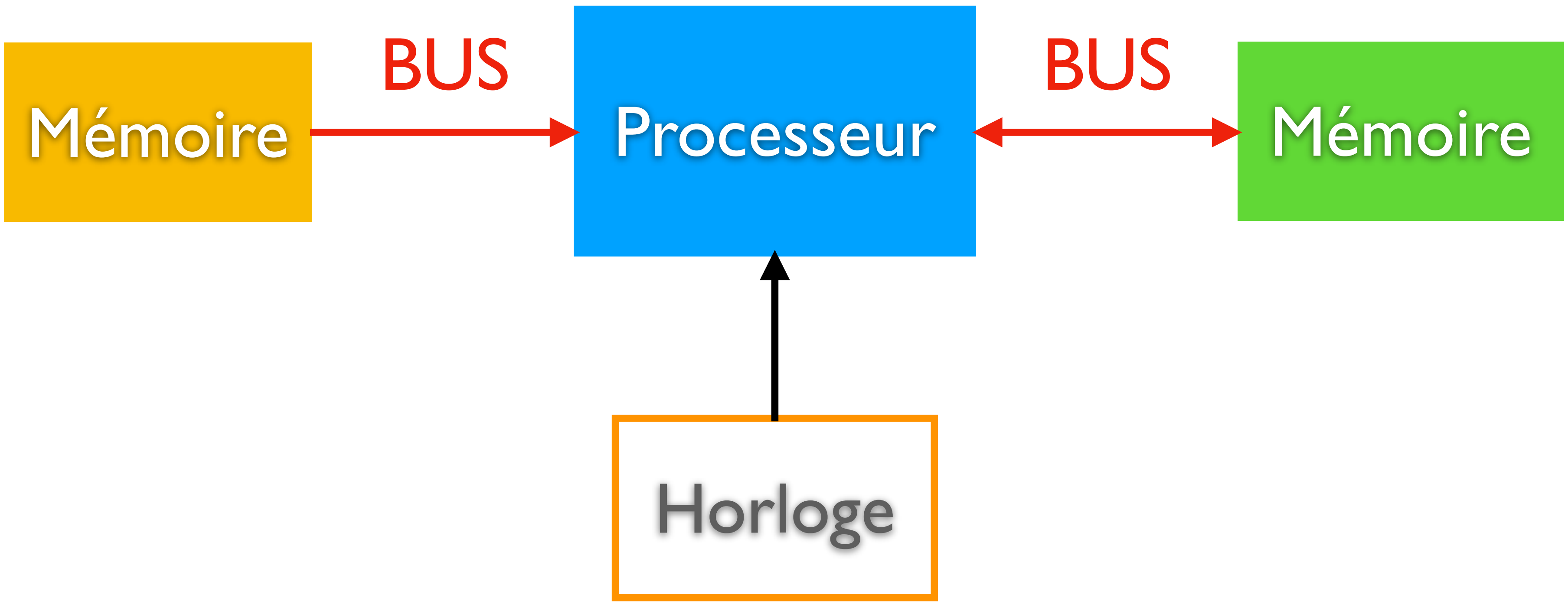
A - Formes polynomiales

- ★ Factorisée : $P(x) = K(x-\alpha_1)(x-\alpha_2)\dots(x-\alpha_n)$
- ★ Canonique croissante $P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_n x^n$
- ★ Canonique décroissante $P(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + a_2 x^{n-2} + \cdots + a_{n-1}x + a_n$

En calcul scientifique, on utilise toujours la forme canonique décroissante…

B - Notions de coût

Le calcul est réalisé par un processeur…
Qui calcule avec des données…
Qui sauvegarde les résultats….
Qui est piloté…



Coût d'un calcul

Type	Coût	Classification
Affectation	≈ 1 cycle processeur	Faible
Addition / soustraction	≈ 1 cycle processeur	Faible
Opérations booléennes / Comparaison	≈ 1 cycle processeur	Faible
Multiplication / division	qques dizaines de cycle	Modéré
Fonctions Complexes (sin, cos, exp, etc.)	Qques centaines de cycles	Elevé

C - Application au calcul polynomial

Faisons l'hypothèse d'utiliser un processeur tel que le coût des opérations soit le suivant :

Type d'opération	Coût (en cycles)
Faible	1
Modéré	10
Elevé	300

$$P(x) = 2x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 7x - 3$$

Avec fonction puissance

Terme	2*	x^4	+	3*	x^3	-	2*	x^2	+	7*x	-3	Total
Coût	10	300	1	10	300	1	10	300	1	10	1	944

$a^b = exp(b * log(a))$ le tout est calculé avec des DL…

On évite au maximum la fonction pow

Coût d'un calcul

Faisons l'hypothèse d'utiliser un processeur tel que le coût des opérations soit le suivant :

Type d'opération	Coût (en cycles)
Faible	1
Modéré	10
Elevé	300

$$P(x) = 2x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 7x - 3$$

Avec $x^3 = x*x*x$

Terme	2*	x^4	+	3*	x^3	-	2*	x^2	+	7*x	-3	Total
Coût	10	30	1	10	20	1	10	10	1	10	1	104

Même résultat mais 9 fois plus rapide

Moins de calculs => + précis…

II Méthode d'Horner

Faisons l'hypothèse d'utiliser un processeur tel que le coût des opérations soit le suivant :

Type d'opération	Coût (en cycles)
Faible	1
Modéré	10
Elevé	300

$$P(x) = 2x^4 + 3x^3 - 2x^2 + 7x - 3$$

Méthode d'Hörner

P(x) = (((2*x+3)*x - 2) *x + 7)*x -3

Le coût est de :

Terme	(((2*x	+3	)*x	-2	)*x	+7	)*x	-3	Total
Coût	10	1	10	1	10	1	10	1	44

On est passé de 944 à 44…

Méthode d'Hörner

$P(x) = ((((\ 2\ *\alpha\ + 3\ )\ *\alpha\ -2\ )\ *\alpha\ + 7\ )\ *\alpha\ -3\ )$

b_0	b_1	b_2	b_3	b_4
b_0	$b_1=b_0*\alpha+3$	$b_2 = b_1*\alpha-2$	$b_3 = b_2*\alpha+7$	$b_4 = b_3*\ \alpha-3$

```
b0 = a0
Pour les termes allant du rang 1 au rang n
 bk = bk-1 * α + ak
fin
```

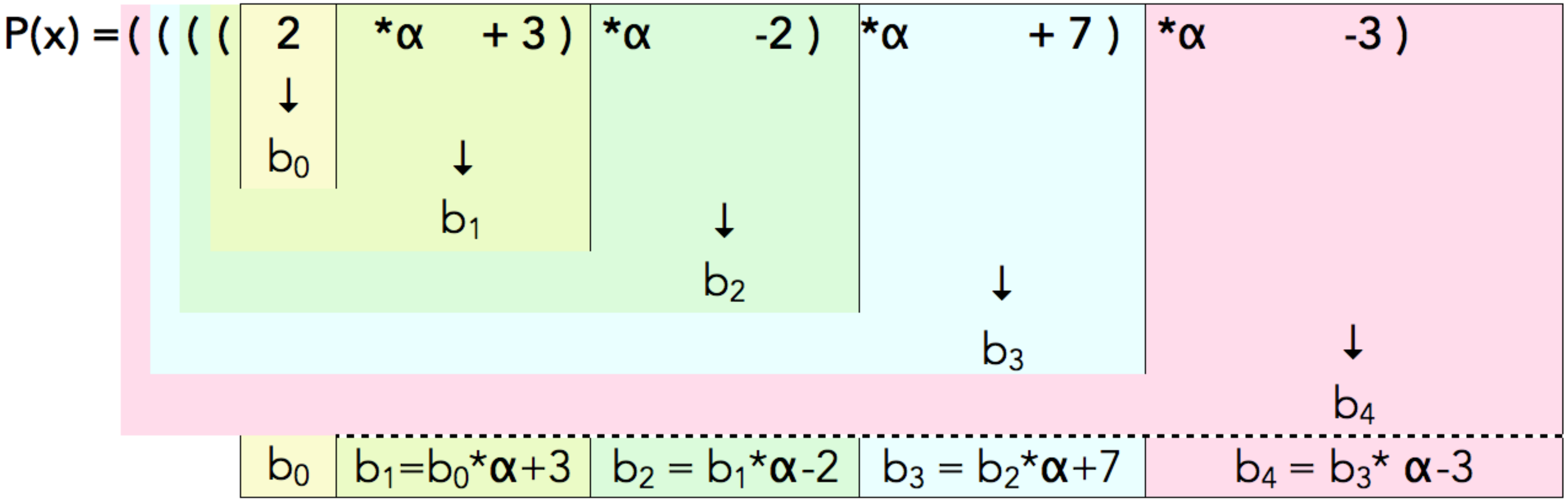
$b_0 = a_0$

Pour les termes allant du rang 1 au rang n

$b_k = b_{k-1} * \alpha + a_k$

fin

Méthode d'Hörner




```
b = a₀
Pour les termes allant du rang 1 au rang n
 b = b * α + aₖ
fin
```

Exemple :

Méthode d'Hörner

Division par un monôme (x -α) :

Considérons un polynôme de degré n :

$$P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + a_3x^{n-3} + \ldots + a_{n-1}x^1 + a_n$$

Il est possible de le diviser par (x-α) :

$$P_n(x) = (x - \alpha)P_{n-1}(x) + R$$

Avec : $R_n = P_n(\alpha)$

$$P_{n-1}(x) = b_0x^{n-1} + b_1x^{n-2} + b_2x^{n-3} + b_3x^{n-4} + \ldots + b_{n-2}x^1 + b_{n-1}$$

$$P_n(x) = (x - \alpha)P_{n-1}(x) + R$$

=

$$(x - \alpha)\left[b_0x^{n-1} + b_1x^{n-2} + b_2x^{n-3} + \ldots + b_{n-2}x^1 + b_{n-1}\right] + R$$

Méthode d'Hörner

Division par un monôme : $P_n(x) = (x - \alpha)P_{n-1} + R$

$$(x - \alpha)\left[b_0x^{n-1} + b_1x^{n-2} + b_2x^{n-3} + \ldots + b_{n-2}x^1 + b_{n-1}\right] + R$$

$P_n(x)$	$(x-\alpha)P_{n-1}(x) + R_n$
$x^n : a_0$	
$x^{n-1} : a_1$	
$x^{n-2} : a_2$	
…	
$x^2 : a_{n-2}$	
$x^1 : a_{n-1}$	
Cste : a_n	

Méthode d'Hörner

Division par un monôme : $P_n(x) = (x - \alpha)P_{n-1} + R$

$$(x - \alpha)\left[b_0 x^{n-1} + b_1 x^{n-2} + b_2 x^{n-3} + \ldots + b_{n-2} x^1 + b_{n-1}\right] + R$$

$$\begin{aligned}
a_0 &= b_0 \\
a_1 &= b_1 - \alpha b_0 \\
a_2 &= b_2 - \alpha b_1 \\
&\vdots \\
a_k &= b_k - \alpha b_{k-1} \\
&\vdots \\
a_{n-1} &= b_{n-1} - \alpha b_{n-2} \\
a_n &= R - \alpha b_{n-1}
\end{aligned}
\quad \longrightarrow \quad
\begin{aligned}
b_0 &= a_0 \\
b_1 &= b_0 \alpha + a_1 \\
b_2 &= b_1 \alpha + a_2 \\
&\vdots \\
b_k &= b_{k-1} \alpha + a_k \\
&\vdots \\
b_{n-1} &= b_{n-2} \alpha + a_{n-1} \\
R &= b_{n-1} \alpha + a_n = b_n
\end{aligned}$$

Méthode d'Hörner

Division par un monôme : $P_n(x) = (x-\alpha)P_{n-1} + R$

$$(x-\alpha)\left[b_0x^{n-1} + b_1x^{n-2} + b_2x^{n-3} + \ldots + b_{n-2}x^1 + b_{n-1}\right] + R$$

```
b0 = a0
Pour les termes allant du rang 1 au rang n
 bk = bk-1 * α + ak
fin
```

Exemple :

Dérivée :

Considérons un polynôme de degré n :

$$P_n(x) = a_0x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + a_3x^{n-3} + \ldots + a_{n-1}x^1 + a_n$$

Il est possible de calculer le diviser par (x-ɑ) :

(éq. I) $P_n(x) = (x - \alpha)P_{n-1}(x) + R_n$

Avec : $R_n = P_n(\alpha)$

De même pour $P_{n-1}(x)$

$$P_{n-1}(x) = (x - \alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1}$$

En remplaçant $P_{n-1}(x)$ par son expression dans l'équation I :

$$P_n(x) = (x - \alpha)\left[(x - \alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1}\right] + P_n(\alpha)$$

Soit :

$$\frac{P_n(x) - P_n(\alpha)}{x - \alpha} = (x - \alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1}$$

Méthode d'Hörner

Dérivée :

On a donc :

$$\frac{P_n(x) - P_n(\alpha)}{x - \alpha} = (x - \alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1}$$

En passant à la limite :

$$\lim_{x \to \alpha} \frac{P_n(x) - P_n(\alpha)}{x - \alpha} = P'(\alpha) = \lim_{x \to \alpha} (x - \alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1} = R_{n-1}$$

Le reste de la seconde division est la valeur de la dérivée du polynôme au point α

Exemple :

Méthode d'Hörner

Dérivées successives :

$$
\begin{aligned}
&P_n(x) = (x-\alpha)P_{n-1}(x) + R_n \\
&P_{n-1}(x) = (x-\alpha)P_{n-2}(x) + R_{n-1} \\
&\vdots \\
&P_{n-i}(x) = (x-\alpha)P_{n-i-1}(x) + R_{n-i} \\
&\vdots \\
&P_1(x) = (x-\alpha)P_0(x) + R_1 \\
&P_0 = R_0
\end{aligned}
$$

d'où

$$
\begin{aligned}
&P_1(x) = (x-\alpha)R_0 + R_1 \\
&P_2(x) = (x-\alpha)^2R_0 + (x-\alpha)R_1 + R_2 \\
&P_3(x) = (x-\alpha)^3R_0 + (x-\alpha)^2R_1 + (x-\alpha)R_2 + R_3 \\
&\vdots \\
&P_n(x) = (x-\alpha)^nR_0 + (x-\alpha)^{n-1}R_1 + \cdots + (x-\alpha)^kR_{n-k} + \cdots + (x-\alpha)R_{n-1} + R_n
\end{aligned}
$$

Méthode d'Hörner

Dérivées successives :

Toute fonction indéfiniment dérivable peut s'écrire au voisinage d'un point α en fonction de ses dérivées sous la forme :

$$f(x) = \frac{f(\alpha)}{0!} + \frac{f'(\alpha)}{1!}(x-\alpha) + \frac{f''(\alpha)}{2!}(x-\alpha)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(\alpha)}{n!}(x-\alpha)^n + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(\alpha)}{k!}(x-\alpha)^k$$

Si l'on développe $P_n(x)$ au voisinage d'α en série de Taylor :

$$P_n(x) = P_n(\alpha) + \frac{(x-\alpha)P_n'(\alpha)}{1!} + \frac{(x-\alpha)^2 P_n''(\alpha)}{2!} + \frac{(x-\alpha)^3 P_n'''(\alpha)}{3!} + \cdots + \frac{(x-\alpha)^n P_n^{(n)}(\alpha)}{n!}$$

$$P_n(x) = (x-\alpha)^n R_0 + (x-\alpha)^{n-1} R_1 + (x-\alpha)^{n-2} R_2 + (x-\alpha)^{n-3} R_3 + \ldots + (x-\alpha)^1 R_{n-1} + R_n$$

Par identification

$$P_n(\alpha) = R_n$$

$$P_n'(\alpha) = R_{n-1}$$

$$\frac{P_n''(\alpha)}{2!} = R_{n-2}$$

$$\ldots \frac{P_n^{(i)}(\alpha)}{i!} = R_{n-i}$$

$$\ldots \frac{P_n^{(n)}(\alpha)}{n!} = R_0 \rightarrow \boxed{P_n^{(n)}(\alpha) = n! * R_0}$$

Méthode d'Hörner

Dérivées successives :

Les R_k sont bien entendu obtenus par des schémas de Horner successifs que l'on peut écrire comme suit :

$Coefs\ de\ P_n(x)$	$Calcul\ de\ P_n(\alpha)$	$P_n'(\alpha)$	$P_n''(\alpha)$	$\ldots$	$P_n^{(n-1)}(\alpha)$	$P_n^{(n)}(\alpha)$
a_0	$b_0 = a_0$	$c_0 = b_0$	$d_0 = c_0$	$\ldots$	e_0	$f_0 = \dfrac{P_n^{(n)}(\alpha)}{(n)!}$
a_1	$b_1 = a_1 + \alpha b_0$	$c_1 = b_1 + \alpha c_0$	$d_1 = c_1 + \alpha d_0$	$\ldots$	$e_1 = \dfrac{P_n^{(n-1)}(\alpha)}{(n-1)!}$	
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$		
a_i	$b_i = a_i + \alpha b_{i-1}$	$c_i = b_i + \alpha c_{i-1}$	$d_i = c_i + \alpha d_{i-1}$	$\ldots$		
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$		
a_{n-2}	b_{n-2}	c_{n-2}	$d_{n-2} = \dfrac{P_n'(\alpha)}{2!}$			
a_{n-1}	b_{n-1}	$c_{n-1} = \dfrac{P_n'(\alpha)}{1!}$	$pas\ de\ d_n$			
a_n	$b_n = P_n(\alpha)$	$pas\ de\ c_n$				

Bien entendu, pour avoir la valeur de la dérivée, il ne faut pas oublier de multiplier par la factorielle.

Exemple :