Méthodes et simulation numériques - langage Python

IPSA -
Semestre 3

H. El-Otmany

ATER & docteur en mathématiques appliquées
Département Techniques de commercialisation
IUT de Tarbes
Email personnel : hamou.elotmany@gmail.com
Email professionnel : hammou.el-otmany@iut-tarbes.fr
Web site : www.hamoelotmany.github.io

Tarbes, 12 Janvier 2023

"Composition en caractère Cochin sur un ordinateur Apple MacBook Pro 15 à l'aide des logiciels libres suivants : LaTeX 2$_\varepsilon$ pdfTeX Xfig Grace

version : Cours_ IUT_ TC_ 20210923.tex du 13 janvier 2023 Copyright ©2021 by H. El-Otmany

Outline d'exposé

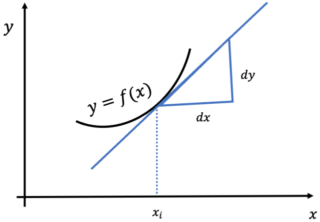
1. **Chapitre 1 : Intégration numérique**
   - Méthode rectangle
   - Méthode du point milieu
   - Méthode de trapèze
   - Méthode de Simpson
   - Mise en application en TP par Python
2. **Chapitre 2 : Introduction à la résolution d'EDO**
   - Méthode d'Euler
   - Méthode de Range-Kutta
   - Mise en application en TP par Python
3. **Chapitre 3 : Simulation de variables aléatoires**
   - Génération des variables suivant la fonction densité
   - Simulation des variables aléatoires par la fonction inverse
   - Simulation de la loi normale
   - Simulation du mouvement Brownien
4. **Chapitre 4 : Algèbre linéaire et résolution des systèmes linéaires**
   - Multiplication de matrice par vecteur
   - Méthode du Pivot de Gauss
   - Mise en application en TP par Python

Chapitre 1 : Intégration numérique

1. Introduction et motivations
2. Intégration par quadratique simple (Rectangle, Point milieu, Trapèze, Simpson)
3. Méthodes composites

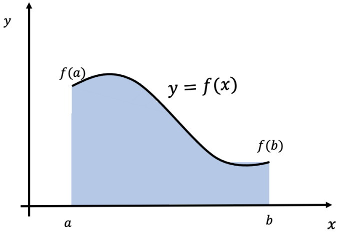
Dérivation et intégration numériques

Différentier : préciser la vitesse à laquelle une courbe change en un certain point de l'équation



Ceci revient à calculer la dérivée de f.

Intégrer : calculer l'aire de (la surface sous la courbe)



Ceci revient à calculer $I_{(a,b)}(f) = \int_a^b f(x)dx$.

Introduction et position du problème

Introduction et position du problème

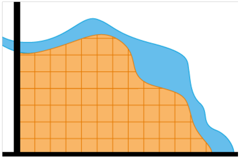
On s'intéresse à l'intégrale de la fonction continue f sur l'intervalle $[a,b]$:

$$I_{(a,b)}(f) = \int_a^b f(x)dx$$

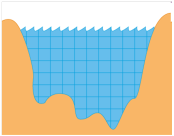
- Problématique :
  - En pratique, on ne connait pas forcément la formule explicite de f (force source en géophysique, tomographie sismique, ...).
  - Le calcul analytique est long et très compliqué (ex. $\int_0^{\pi/2} cos(x^2)dx$).
  - La plupart des fonctions n'admettent pas de primitives pouvant s'exprimer à l'aide de fonctions élémentaires (ex. $\int_0^{\pi/2} \sqrt{1+\cos x^2}dx$).
  - La primitive de f est connue mais elle n'est pas une fonction élémentaire (ex. $\int e^{-x^2}dx$)
  - f n'est pas donnée par une forme explicite mais seulement par un nombre fini de points $(x_i;y_i)$, $0 \leq i \leq n$.
- Objectifs et solution au problème :
  - approcher de façon numérique la valeur d'intégrale $I_{(a,b)}(f)$ (c'est-à-dire calculer numériquement la surface à partir d'un nombre fini d'appels à la fonction f).
  - cas particulier lorsque l'on a accès à un échantillonnage régulier ou uniforme.

Applications

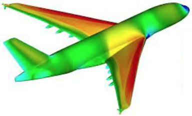
- Calculer l'aire d'un champ limité par une rivière et deux routes



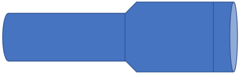
- Calculer l'aire de la coupe transversale d'une rivière pour calculer le débit



- Calculer l'aire d'une aile d'avion pour simuler son profil



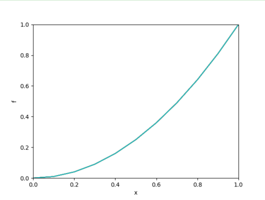
- Calculer le volume de la conduite pour avoir le débit volumique d'un fluide

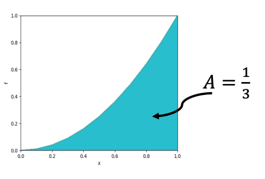


Exemple

Soit f une fonction continue sur $[0;1]$ telle que $f(x) = x^2$.
On a facilement

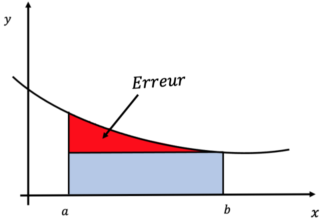
$$I_{(0,1)}(f) = \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3} \approx 0.3333...$$



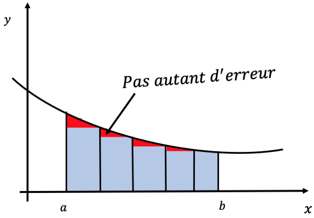


Mise en oeuvre de l'intégration numérique

- 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



Division de la courbe en parties plus petites



Raffinement des subdivisions pour minimiser l'erreur

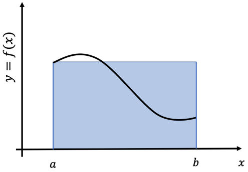
Chapitre 1 : Méthodes par quadratique simple

1. Méthode du rectangle
2. Méthode du point milieu
3. Méthode du trapèze
4. Méthode de Simpson

Méthode du rectangle

Pour approcher l'intégrale $I_{(a,b)}(f)$, on considère le rectangle (blue) dont

- la largeur est sur l'axe des abscisses d'extrémités $(a;0)$ et $(b;0)$
- la hauteur est sur l'axe des ordonnées $f(a)$ (méthode du rectangle gauche) ou $f(b)$ (méthode rectangle droite).



$$I_{(a,b)}(f) = (b-a)f(a) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^2}{2}f'(\xi)\right) \text{ ou}$$
$$I_{(a,b)}(f) = (b-a)f(b) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^2}{2}f'(\xi)\right), \ \xi \in [a;b])$$

Exemples

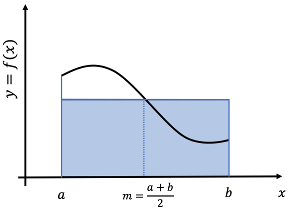
$* I_{(0,1)}(3) = 3; \quad * I_{(0,1)}(x^2) \approx 0 \neq \frac{1}{3}; \quad * I_{(0,1)}(4\sqrt{1-x^2}) \approx 4 \neq \pi$

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

$\Longrightarrow$ * erreur pour les fonctions non-constantes ? $\rightsquigarrow$ Raffiner pour minimiser l'erreur

Méthode du point milieu

Pour approcher l'intégrale $I_{(a,b)}(f)$, on subdivise le rectangle en deux subdivisions, c'est-à-dire on considère trois points sur l'axe des abscisses $(a;0)$, $(b;0)$ et $\left(\frac{a+b}{2},0\right)$



$$I_{(a,b)}(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^3}{24}f"(\xi)\right),\ \xi \in [a;b])$$

Exemples

$*\, I_{(0,1)}(x) \approx (1-0)\frac{1+0}{2} = \frac{1}{2}$; $\quad *\, I_{(0,1)}(x^2) \approx (1-0)\frac{1}{4} = \frac{1}{4} \neq \frac{1}{3}$; $\quad *\, I_{(0,1)}(4\sqrt{1-x^2}) \approx (1-0)4\sqrt{1-\left(\frac{1}{2}\right)^2} = 2\sqrt{3} \neq \pi.$

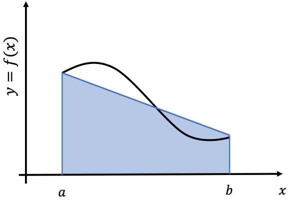
$\Longrightarrow$ Méthode d'ordre 1, exacte pour les fonctions linéaires.

$\Longrightarrow$ * erreur pour les fonctions non-linéaires ? $\quad \rightsquigarrow$ Raffiner pour minimiser l'erreur

Méthode du trapèze

Pour approcher l'intégrale $I_{(a,b)}(f)$, on considère le trapèze où

- les bases s'appuient sur les abscisses $x = a$ et $x = b$
- les deux côtés sont l'axe des abscisses et le segment reliant les points $(a; f(a))$ et $(b; f(b))$.



$$I_{(a,b)}(f) = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} + \mathcal{O}\left(-\frac{(b-a)^3}{12}f"(\xi)\right),\ \xi \in [a;b])$$

Exemples

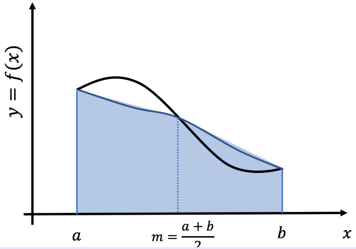
$* I_{(0,1)}(x) = (1-0)\left(\frac{0+1}{2}\right) = \frac{1}{2}; \quad * I_{(0,1)}(x^2) \approx (1-0)\frac{0+1}{2} = \frac{1}{2} \neq \frac{1}{3}; * I_{(0,1)}(4\sqrt{1-x^2}) \approx (1-0)\frac{4\sqrt{1-0^2}+4\sqrt{1-1^2}}{2} = 2 \neq \pi$

$\Longrightarrow$ Méthode d'ordre 1, exacte pour les fonctions linéaires.

$\Longrightarrow$ * erreur pour les fonctions non-linéaires ? $\rightsquigarrow$ Raffiner pour minimiser l'erreur

Méthode de Simpson

Pour approcher l'intégrale $I_{(a,b)}(f)$, on subdivise le rectangle en deux subdivisions, c'est-à-dire on considère trois points sur l'axe des abscisses $(a,0)$, $(b,0)$ et $\left(\frac{a+b}{2},0\right)$



$$I_{(a,b)}(f) = (b-a)\frac{f(a)+f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6} + \mathcal{O}\left(-\frac{(b-a)^5}{90\times 2^5}f^{(4)}(\xi)\right),\ \xi\in[a;b])$$

Exemples

$* I_{(0,1)}(x^2) \approx (1-0)\left[0^2+\frac{1}{4}+1^2\right]/6 = \frac{1}{3}$; $\quad * I_{(0,1)}(4\sqrt{1-x^2}) \approx (1-0)\left[4\sqrt{1-0^2}+4\sqrt{1-\frac{1}{4}}+4\sqrt{1-1^2}\right] = 4+2\sqrt{3} \neq \pi$

$\Longrightarrow$ Méthode d'ordre 2, exacte pour les fonctions quadratiques et cubiques.

Bilan à retenir

- Toutes les méthodes (formules) apparaissent le produit de la largeur d'intervalle $[a;b]$ par la moyenne pondérée des valeurs prises par f en différents points x_i.
- Toutes les méthodes ont une erreur sous la forme d'une puissance de $b-a$.
- Le tableau ci-dessous récapitule le nombre de points, les poids et l'ordre de la méthode ($\xi \in [a;b]$) :

Méthode	Nombre de points	poids des points	Ordre	Erreur
Rectangle gauche	1	$(1,0,0)$	0	$\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)$
Rectangle droite	1	$(0,0,1)$	0	$\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)$
Point Milieu	1	$(0,1,0)$	1	$\frac{(b-a)^3}{24} f''(\xi)$
Trapèze	2	$\left(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}\right)$	2	$-\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$
Simpson	3	$\left(\frac{1}{6},\frac{4}{6},\frac{1}{6}\right)$	3	$-\frac{(b-a)^5}{90\times 2^5} f^{(4)}(\xi)$

- En utilisant d'autres subdivisions de l'intervalle $[a;b]$, et d'autres coefficients, ce qui conduira à autant d'autres méthodes avec leurs forces et leurs faiblesses.

↪ À la fin, nous comparerons la précision obtenue avec les méthodes de quadrature simple.

Chapitre 2 : Méthodes composites d'intégration numérique

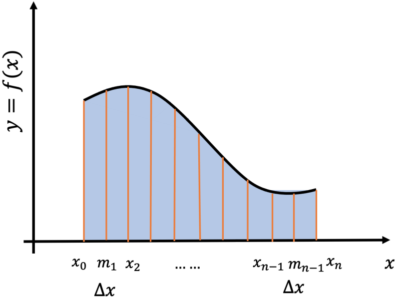
1. Méthode du rectangle composite
2. Méthode du point milieu composite
3. Méthode du trapèze composite
4. Méthode de Simpson composite

Principe des méthodes composites

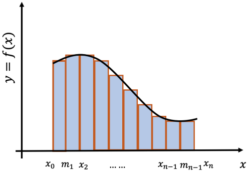
Pour approcher l'intégrale $I_{(a,b)}(f)$, on procède comme suit

- On approche f par des fonctions de plus en plus complexes (notamment des polynômes d'ordre de plus en plus élevés)
- On découpe l'intervalle $[a;b]$ en n sous intervalles
- On applique les méthodes d'intégration simple sur les petits intervalles.
- On multiplie les méthodes par $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ (la largeur d'intervalle)
- On utilise le découpage simple dont les points d'échantillonnage régulier sont :

  $x_i = x_0 + i\Delta x, \quad m_i = x_0 + \left(i + \frac{1}{2}\right) \Delta x$ pour $0 \leq i \leq n$.
- On retrouve bien $x_0 = a$ et $x_n = b$.



Méthode du rectangle composite



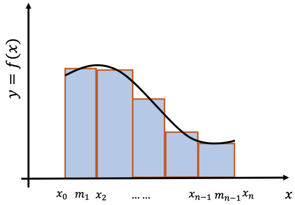
$$I^{RG}_{(a,b)}(f) \approx \frac{b-a}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^2}{2n} f'(\xi)\right),$$

$$I^{RD}_{(a,b)}(f) \approx \frac{b-a}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1}) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^2}{2n} f'(\xi)\right),$$

$\xi \in [a;b]$

$\Longrightarrow$ * erreur numérique ? $\leadsto$ Raffiner pour minimiser l'erreur

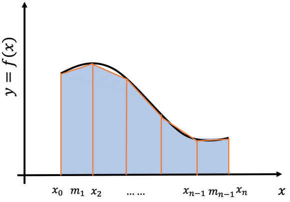
Méthode du point milieu composite



$$I_{(a,b)}(f) = \frac{b-a}{n}\sum_{i=0}^{n} f(m_i) + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\xi)\right), \ \xi \in [a;b]$$

$\Longrightarrow$ * erreur numérique ? $\rightsquigarrow$ Raffiner pour minimiser l'erreur

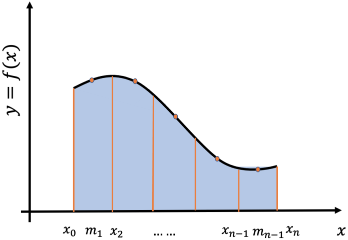
Méthode du trapèze composite



$$I_{(a,b)}(f) = \frac{b-a}{n}\left[\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right] + \mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi)\right),\ \xi \in [a;b])$$

$\Longrightarrow$ * erreur numérique ? $\leadsto$ Raffiner pour minimiser l'erreur

Méthode de Simpson composite



$$I_{(a,b)}(f) =$$
$$\frac{b-a}{6n}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{i=1}^{n-1} f\left(x_i\right)+4\sum_{i=0}^{n-1} f\left(m_i\right)\right]+\mathcal{O}\left(\frac{(b-a)^5}{180\times(4n)^4}f^{(4)}(\xi)\right),\ \xi\in[a;b])$$

Bilan et exemples d'applications

Bilan à retenir

- Toutes les méthodes (formules) apparaissent le produit de la largeur $\frac{b-a}{n}$ par la moyenne pondérée des valeurs prises par f en différents points x_i.
- Toutes les méthodes ont une erreur sous la forme d'une puissance de $\frac{b-a}{n}$.
- Les méthodes traitées dans ce cours sont prédéfinies dans le package "scipy.integrate" de Python. Pour plus d'informations, consulter le lien `https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/integrate.html`

Exemples

1. Le tableau ci-dessous donne les valeurs du profil de température lors d'une expérience d'émulsion. Estimer $\int_0^6 f(x)dx$ en appliquant les différentes méthodes d'intégrations avec trois sous-intervalles égaux.

x	0	1	2	3	4	5	6
$f(x)$	9.3	9.0	8.3	6.5	2.3	7.6	10.5

2. Estimer l'aire de la région bornée par la courbe de $y = \sin(x)$ et l'axe des abscisses avec x allant de 0 jusqu'à π en utilisant trois sous-intervalles égaux.
3. Supposons que $\int_4^9 \sqrt{x}dx = \frac{38}{3}$. En utilisant les transformations, calculer

$$\int_9^4 \sqrt{t}dt; \quad \int_4^9 (\sqrt{x}+3)dx; \quad \int_9^{14} \sqrt{x-5}dx; \quad \int_4^4 (\sqrt{x}dx$$

Bilan et exemples d'applications

4. Le tableau ci-dessous donne les valeurs du profil de température lors d'une expérience d'émulsion. Estimer $\int_1^{9.6} f(x)dx$ en appliquant les différentes méthodes d'intégrations avec trois sous-intervalles égaux.

x	1	2.5	4	6	8	8.8	9.6	10.4
$f(x)$	4	3	1	3	5	6	4	7

5. Estimer l'aire de la région bornée par la courbe de $y = \sin(x)$ et l'axe des abscisses avec x allant de 0 jusqu'à π en utilisant trois sous-intervalles égaux.

6. On considère le piston d'une voiture (voir le schéma) contenant $n = 10^3 mol$ de gaz sous une température constante $T = 300$K durant le processus. Sachant que $V_1 = 1m^3$ et $V_2 = 5m^3$, estimer le travail W produit dans ce piston. On rappelle la loi des gaz parfaits : $PV = nRT$ où R est la constante universelles des gaz, $R = 8.314kJ/kmol.K$.