Méthodes numériques et langage C

Calcul numérique de fonctions et résolution d'équations

R. Flamary

7 décembre 2015

Plan du cours

Calcul numérique de fonctions et résolution d'équations

Problèmes

- Calculer y tel que
$$y = f(x)$$
- Trouver x tel que
$$f(x) = 0$$
- En utilisant uniquement des opérations standards fournies par un processeur.
- Les deux problèmes sont liés mais différent dans leur objectif.

Objectifs du cours

- Programmation (efficace) des séries entières.
- Méthodes classiques de résolution d'équation (Dichotomie, Newton).
- Exemples de calcul de fonctions usuelles.
- Représentation des fonctions en séries entières.

Précision numérique

Algorithme itératif

- Principe :
  - Initialisation approximative de la solution.
  - Dans une boucle : mise à jour de la solution (amélioration de la précision)
- De nombreux calculs numériques du cours sont sous cette forme.
- La question de la précision numérique détermine le nombre d'itérations.
- Il existe plusieurs approches pour la condition d'arrêt des itérations.

Nombre n d'itérations max.

- On arrête après n itérations.
- Typiquement boucle `for`
- Complexité du calcul facile à estimer $T() = nT(\texttt{iteration})$.
- Précision finale du calcul plus difficile à évaluer (en général).

Précision minimale ϵ

- On arrête lorsque la variation de la solution entre deux itérations est inférieure ou égale à ϵ.
- Difficulté d'évaluer le nombre d'itérations nécessaires.
- Meilleur contrôle de la précision du résultat.

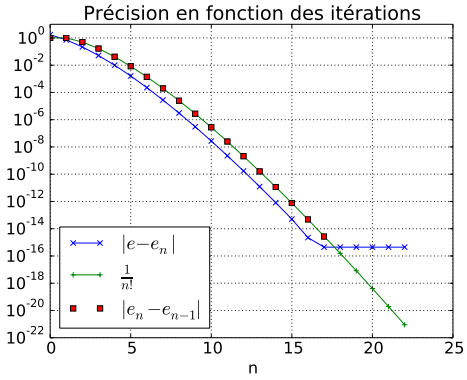
Exemple de précision numérique

Soit la série suivante permettant de calculer la constante de Néper :

$$e = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \qquad \text{et l'approximation} \qquad e_n = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{k!}$$

Calcul de la série

- Flottant 64 bits.
- $e - e_n$ erreur de la solution.
- $\frac{1}{n!}$ mise à jour de la solution.
- $|e_n - e_{n-1}|$ variation de la solution.



Vitesse de convergence

- Soit la suite (x_k) qui converge vers la valeur x^*.
- On dit que la suite est convergente d'ordre q vers x^* si il existe $\mu \in]0, 1[$ tel que

$$\lim_{k \to \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^q} = \mu$$

- μ est la vitesse de convergence qui majore la déviation à la limite entre 2 itérations.
- Les ordres q les plus communs sont :
  - $q = 1$, convergence linéaire.
  - $q > 1$, super-linéaire.
  - $q = 2$, convergence quadratique.
- La convergence quadratique implique un doublement du nombre de chiffres précis à chaque itération.
- La vitesse de convergence des méthodes itératives permet de prédire un ordre de grandeur des nombres d'itérations nécessaires pour obtenir une précision donnée.

Fonction analytique et série entière

Toute fonction analytique peut être exprimée sous la forme d'une série entière :

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x - x_0)^k$$

où les a_k sont des réels et la série converge vers $f(x)$ dans un voisinage de x_0

- Les fonctions analytiques sont continues et infiniment différentiables.
- La série entière est une série de Taylor avec $a_k = \frac{f^{(k)}(x_0)}{n!}$

Applications

- Calcul numérique de fonctions complexes (exponentielle,trigos,...).
- Approximations physiques.

Programmation de série numérique

$$S_n = \sum_{k=0}^{n} u_k$$

Principe général

- Boucle `for`.
- Initialisation de l'accumulateur à 0 ou à u_0.
- Ajout de u_i pour chaque valeur de i.
- Programmation d'une fonction $u(i)$?

Implémentation type

```
1 float sum_u_i(int n)
2 {
3   float res=0;
4   for (int k=0;k<=n;k++)
5     res=res+u(k);
6   return res;
7 }
```

Discussion

- On suppose que la fonction `float u(int i)` est définie.
- Efficacité dépend de u_k
- $T($`sum_u_i`$)=$
- $S($`sum_u_i`$)=$

Calcul de tous les éléments de la série

$$S_n = \sum_{k=0}^{n} u_k$$

Principe

- Pour des raisons de complexité numérique, il est parfois nécessaire de calculer tous les éléments de la série S_k jusqu'à S_n.
- Utilise toujours une boucle `for`.
- La fonction retourne un pointeur vers les valeurs de la série.
- Nécessite une allocation mémoire (`malloc`), libérer la mémoire avec `free`.

Implémentation type

```
1 float* sum_u_i(int n)
2 {
3   float *res=malloc((n+1)*
        sizeof(float));
4   res[0]=u(0);
5   for (int k=1;k<=n;k++)
6     res[k]=res[k-1]+u(k);
7   return res;
8 }
```

Discussion

- On suppose que la fonction `float u(int i)` est définie.
- Efficacité dépend de u_k
- T(`sum_u_i`)=
- S(`sum_u_i`)=

Fonction récursive (rappel)

- Une fonction récursive est une fonction qui s'appelle elle même.
- Pour le calcul de séries, les fonctions récursives ont souvent une complexité spatiale $S(n)$ ou $S(log(n))$ (à cause de la pile).
- Il est nécessaire de s'assurer que la fonction se termine quelle que soit la valeur donnée en entrée (théorème de terminaison).

Code source

```
1  int factorielle(int i)
2  {
3    if (i<=0)
4      return 1;
5    else
6      return i*factorielle(i-1);
7  }
8
9  int main()
10 {
11   for (int i=0;i<=8;i++)
12     printf("i=%d, i!=%d\n",i,
           factorielle(i));
13   return 0;
14 }
```

Sortie

```
1  $./ex_factoriel
2  i=0, i!=1
3  i=1, i!=1
4  i=2, i!=2
5  i=3, i!=6
6  i=4, i!=24
7  i=5, i!=120
8  i=6, i!=720
9  i=7, i!=5040
10 i=8, i!=40320
```


Récurrence pour le calcul de séries (1)

- Une récurrence dans la suite est une fonction simple permettant de calculer u_{k+1} à partir de u_k :

$$u_{k+1} = r(u_k, k)$$

- Trouver une récurrence dans une série numérique permet souvent de la calculer avec une complexité moindre.
- Si $T(u) > T(r)$ il faut utiliser la relation de récurrence.
- Exemple d'un codage non efficace de la fonction suivante (Ex. 5 Cours 1) :

$$func(x, n) = \sum_{i=1}^{n} x^i$$

Code

```
1 float func(float x,int n)
2 {
3   float f=0;
4   for (int i=1;i<=n;i++)
5     f=f+puissance(x,i);
6   return f;
7 }
```

Complexité

- Nb opérations :
- Complexité $T()$:
- Complexité $S()$:

Récurrence pour le calcul de séries (2)

Fonction à calculer :

$$func(x, n) = \sum_{i=1}^{n} x^i$$

- La récurrence est évidente :

$$x^i = x^{i-1} * x$$

- On calculera donc dans la boucle le terme x^i qui sera mis à jour à chaque itération.

Code

```
1  float func(float x,int n)
2  {
3    float f=0,xi=x;
4    for (int i=1;i<=n;i++)
5    {
6      f=f+xi;
7      xi=xi*x;
8    }
9    return f;
10 }
```

Complexité

- Nb opérations :
- Complexité $T()$:
- Complexité $S()$:

Exercice 1

Soit la série de Taylor de la fonction exponentielle :

$$\exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

Coder une implémentation efficace utilisant la récurrence permettant de calculer la série jusqu'à l'ordre n.
Quelle est sa complexité ? Quelle serait la complexité si on utilisait les fonctions `puissance` et `factorielle` toutes deux de complexité $T() = O(n)$.

Solution

Complexité

- Nb opérations :
- Complexité $T()$:
- Complexité $S()$:

Si 2 fonctions $O(n)$ dans la boucle :

- Complexité $T()$:
- Complexité $S()$:

Résolution d'équations unidimensionnelles

Objectif

Trouver un réel $x^* \in [a, b]$ satisfaisant la condition :

$$f(x) = 0$$

- $f(x)$ est une fonction continue sur l'intervalle $[a, b]$.
- On suppose également que $f(a)f(b) < 0$.
- Le passage de la fonction en 0 est assuré par le théorème des valeurs intermédiaires.

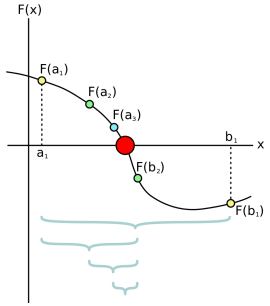
Méthodes de résolution

- Dichotomie.
- Méthode de la fausse position.
- Méthode de Newton.
- Méthode du point fixe.

Dichotomie

Diviser pour mieux régner

- Mise à jour de l'intervalle $[a, b]$ assurant une contraction.
- Calculer $f(c)$ avec $c = \frac{a+b}{2}$.
- Si $f(a)f(c) > 0$ alors $a \leftarrow c$, sinon $b \leftarrow c$
- c est la solution de l'équation.



Propriétés

- Précision numérique $\epsilon_n = b_n - a_n$ simple à calculer : $\epsilon_n = \frac{\epsilon_0}{2^n}$ (conv. linéaire).
- Nombre d'itérations jusqu'à convergence : $n = \log_2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon}$.
- On prend souvent $\epsilon = \frac{a+b}{2}\delta$ où δ est la précision machine ($\delta = 10^{-16}$ en 64 bits).
- Dans tous les cas n est majoré par le nombre de bits de la mantisse.

Exercice 2 : Dichotomie en C

Code

```
1  double dichotom(double a,double b,
       double eps)
2  {
3    double c=(a+b)/2;
4    double fa=f(a),fc=f(c);
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14   return c;
15 }
```

Exercice

- Compléter la fonction à gauche.
- On suppose que la fonction `double f(double x)` est définie.
- Possibilité d'utiliser les fonctions de `<math.h>`
- Convergence atteinte lorsque $|b - a| < \epsilon$.
- Minimiser le nombre d'opérations sachant que l'appel à $f(x)$ est potentiellement coûteux.

Méthode de la fausse position

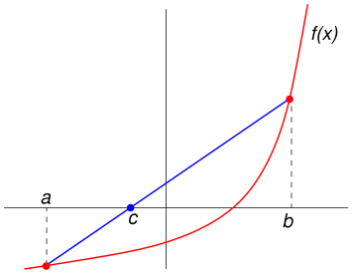
Variante de la dichotomie

- On trace une droite entre les points $(a, f(a))$ et $(b, f(b))$.
- c est l'abscisse du point d'ordonnée nulle de cette droite :

$$\frac{f(a) - f(b)}{a - b}(c - b) + f(b) = 0$$

Ce qui nous donne :

$$c = a - \frac{a - b}{f(a) - f(b)} f(a)$$



- Si $f(a)f(c) > 0$ alors $a \leftarrow c$, sinon $b \leftarrow c$

Propriétés

- Convergence superlinéaire (plus rapide que la dichotomie).
- Une variation s'appelant la méthode de la sécante ne nécessite pas que $f(a)f(b) < 0$.

Méthode de Newton

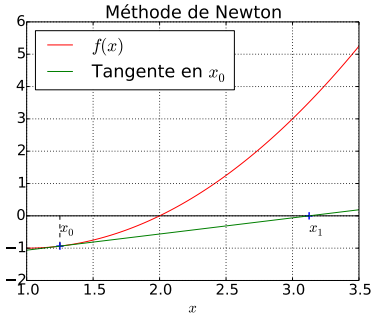
Principe

- Méthode itérative (pas d'intervalle).
- Initialisation x_0.
- La dérivée de la fonction en $f(x_k)$ donne une approximation linéaire :

$$\tilde{f}(x) = f(x_k) + (x - x_k)f'(x_k)$$

- La nouvelle valeur est obtenue en annulant l'approximation :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$



Propriétés

- Convergence quadratique à proximité d'une solution.
- Itérations peu précises loin d'une solution.
- Peut diverger si f a une dérivée nulle.
- Méthode de la fausse position est une Newton approchée (gradient approché).

Convergence de la méthode de Newton

La convergence de la méthode de Newton vers une solution de l'équation est assurée si la fonction $f(x)$ vérifie les conditions suivantes :

1. f est de classe C^2 sur $[a, c]$ (continue et dérivable deux fois).
2. $f(a)f(b) < 0$. ($\Rightarrow \exists x, f(x) = 0$ avec la continuité).
3. $\forall x \in [a, b] \quad f'(x) \neq 0$.
4. $f''(x)$ est de signe constant sur $[a, b]$ (une seule solution dans l'intervalle).
5. $|f(a)|/|f'(a)| < b - a$ et $|f(b)|/|f'(b)| < b - a$ (on reste dans l'intervalle $[a, b]$).

Exercice 3 :
Vérifier la convergence sur $[1, A]$ pour $f(x) = x^2 - A = 0$ avec $A > 1$

Source: [3, Chap 4]

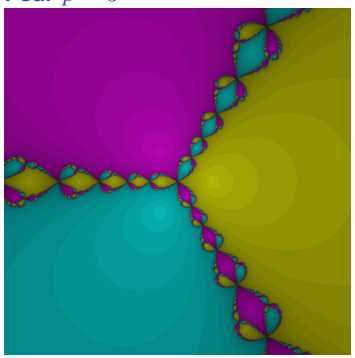
Fractale de Newton

Soit l'équation complexe suivante :

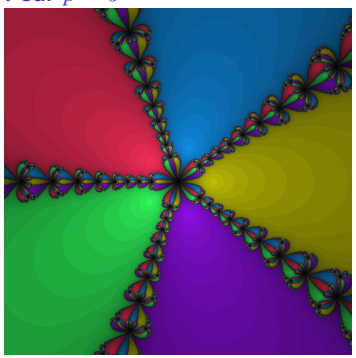
$$f(z) = z^p - 1 = 0$$

La méthode de Newton converge vers les solutions du problème de la forme $z = e^{k2i\pi/p}$. Si on détermine le point de convergence pour chaque pixel d'initialisation on obtient une fractale de Newton :

Pour $p = 3$



Pour $p = 5$



Exercice 4 : Méthode de Newton

Code

```
1  double newton(double x0,double eps)
2  {
3    double x;
4
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16   return x;
17 }
```

Exercice

- Compléter la fonction à gauche.
- On suppose que la fonction `double f(double x)` ainsi que sa dérivée `double df(double x)` sont définies.
- Possibilité d'utiliser les fonctions de `<math.h>`
- Convergence atteinte lorsque $|x_k - x_{k-1}| < \epsilon$.
- Minimiser le nombre d'opérations sachant que l'appel à $f(x)$ et $f'(x)$ est potentiellement coûteux.

Méthode du point fixe

Principe

- Si on peut réécrire $f(x) = 0$ sous la forme

$$g(x) = x$$

  L'équation ci dessus est une équation du point fixe associée à $f(x) = 0$.
- Algorithme
  1. On initialise $x_0 \in \mathbb{R}$
  2. Pour chaque itération k :

$$x_{k+1} \leftarrow g(x_k)$$

Propriétés

- Cet algorithme converge vers la solution de l'équation $f(x) = 0$ sous certaines conditions.
- Il peut exister plusieurs fonctions g pour une équation donnée.

Exercice 5

Soit l'équation de Ferrari $f(x) = x^4 + 6x^2 - 60x + 36$. Donner 2 fonctions $g(x)$ point fixe de cette équation.

Convergence de la méthode du point fixe

Théorème du point fixe de Banach

Soit E un espace métrique complet et $g : E \to E$ une application contractante (k-lipschitzienne pour $k < 1$).

- g possède un unique point fixe x^* et ce point fixe est attractif.
- Toute suite de E vérifiant la récurrence $x_{k+1} = g(x_k)$ converge vers x^*

Résultat majeur pour prouver la convergence de suites

Application lipschitzienne

Soient E une partie de $\mathbb{R}$,$f : E \to \mathbb{R}$ une application et k un réel positif, on dit que f est k-lipschitzienne si

$$\forall (x, y) \in E^2,\ |f(x) - f(y)| \leq k\ |x - y|.$$

Si $k \in [0, 1[$ on dit que f est contractante.

Calcul de fonctions usuelles

Problème

- Calculer les valeurs de fonctions mathématiques usuelles.
- Utiliser uniquement des opérations disponibles sur le processeur (somme, multiplication).
- Questions :
  - Implémentation en virgule flottante.
  - Série de Taylor, méthode de Newton ?
  - Précision d'une implémentation physique ?

Fonctions étudiées

- Racine carrée et racine carrée inverse.
- Fonctions trigonométriques.
- Exponentielle.

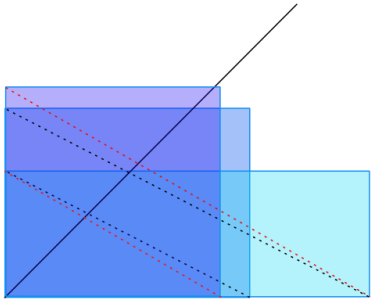
Discussion

- Calculs approchés implémentés en matériel.
- Extensions INTEL récentes (SSE,MMX,AVX,SMVL).
- Calcul sur des séquences en mémoire (très efficaces).

Racine carrée

Soit la fonction racine carrée

$$sqrt(x) = \sqrt{x}$$



- Problème équivalent à résoudre l'équation :

$$f(x) = x^2 - S$$

- Si on applique la méthode de Newton on trouve l'itération :

$$x_{k+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} =$$

- Méthode exposée par Héron d'Alexandrie dans son ouvrage *Metrica*.
- Certains calculs égyptiens suggèrent que le méthode est encore plus ancienne.
- Interprétation géométrique simple (moyenne des cotés d'un rectangle).
- Vitesse de convergence quadratique (Newton).

Racine carrée (2)

Initialisation

- Vitesse de convergences des méthodes itérative dépendent de l'initialisation.
- Pour un flottant en base binaire de la forme $m.2^{2n}$ on initialise par :

$$x_0 = 2^n$$

Autres variantes et généralisation

- Méthodes de calculs décimale par décimale (Bâtons de Neper, Algorithme de la potence). Plus lente que la méthode de Héron mais ne nécessite pas d'inversion.
- Approximation de Bakhshali. Équivalente à 2 itération de la méthode de Newton.
- Méthode de Newton pour la racine $n$ième :

$$x_{k+1} = \frac{1}{n}\left((n-1)x_k + \frac{A}{x_k^{n-1}}\right)$$

Racine carrée inverse

$$isqrt(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$$

Méthode de Newton

- Équation :

$$f(x) =$$

- Itérations :

$$x_{k+1} =$$

Cas d'utilisation

- Illumination dans les scènes 3D en infographie.
- Calcul rapide de vecteur normal :

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{\sqrt{\|\mathbf{v}\|}}$$

Racine carrée inverse rapide

Principe

Soit x un flottant IEEE 754.

- Calcul sur les flottants peut être plus coûteux que sur des entiers.
- Approximation de $log_2(S)$ en traitant le flottant comme un entier :

$$I_S \approx Llog_2(S)+C, \quad log2(S) \approx \frac{1}{L}(I_S+C)$$

- $log2(x) = -1/2log_2(S)$ on trouve donc :

$$I_x \approx$$

Dans le code $-\frac{3}{2}C =$ `0x5f3759df`

- La dernière étape est une itération de Newton (et une seconde commentée).
- Tiré du code source de Quake 3.

Code

```
float Q_rsqrt( float number )
{
  long i;
  float x2, y;
  const float threehalfs = 1.5F;

  x2 = number * 0.5F;
  y = number;
  i = * ( long * ) &y; // evil
       floating point bit level
       hacking
  i = 0x5f3759df - ( i >> 1 ); //
       what the fuck?
  y = * ( float * ) &i;
  y = y * ( threehalfs - ( x2 * y * y
       ) ); // 1st iteration
// y = y * ( threehalfs - ( x2 * y *
      y ) ); // 2nd iteration, this
      can be removed

  return y;
}
```

Fonction sinus

$$\sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$$

Implémentation dans la Glibc (Bibliothèque C standard)

- Méthodes de réduction de l'intervalle : $\sin(x + k2\pi) = \sin(x)$.
- Utilisation de la fonction `fsin` des processeurs intel en 32 et 64 bits.
- Sinon implémentation détaillée dans `sysdeps/ieee754/dbl-64/s_sin.c`

Algorithme simplifié dans fdlibm

- Méthodes de réduction de l'intervalle sur $[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$.
- Fonction sinus impaire donc calcul uniquement pour $x > 0$.
- Si $|x| < 2^{-27}$ alors on retourne x.
- Sinon on utilise une approximation polynomiale de degré 13.

Exercice 6 : Fonction Sinus

$$\sin(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} x^{2n+1}$$

Code

```
1  double sinslow(double x)
2  {
3    double res=x,temp=x;
4
5
6
7
8
9
10
11
12   return res;
13 }
```

Exercice

- Compléter la fonction à gauche.
- Utiliser la série de Taylor pour calculer la valeur du sinus.
- Convergence atteinte lorsque $\frac{|x_k - x_{k-1}|}{|x_k|} < 1e-16$.

Discussion

- Problèmes ?

Exercice 7 : Fonction Sinus

Code

```
1  double sinfast(double x)
2  {
3
4
5
6
7
8
9
10
11 }
```

Exercice

- Compléter la fonction à gauche.
- Coder la méthode de réduction de l'intervalle sur $[-\pi, \pi]$.
- Appeler la fonction `sinslow` lorsque vous avez réduit l'intervalle.

Fonction exponentielle

$$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Implémentation dans fdlibm

- Réduction de l'intervalle, on cherche l'entier k tel que

$$x = k * \ln(2) + r, \quad |r| <= \frac{ln(2)}{2}$$

- Calcul précis de $\exp(r)$ avec approximation polyomiale.
- $\exp(x) = 2^k \exp(r)$
- Approximation polynomiale de Renez très précise autour de 0 (bornée par 2^{-59}).
- Cas particuliers :
  - ∞ pour $x > 7.097827128933839730 96e+02$
  - 0 pour $x < -7.451332191019411084 20e+02$

Ressources bibliographiques I

[1] "Freely distributable libm (fdlibm)," http://www.netlib.org/fdlibm/, version du 2015-09-28.

[2] "The gnu c library," http://www.gnu.org/software/libc/, version du 2015-09-28.

[3] J. Bastien and J.-N. Martin, *Introduction à l'analyse numérique : applications sous Matlab : cours et exercices corrigés*. Dunod, 2003.

[4] R. P. Brent and P. Zimmermann, *Modern computer arithmetic*. Cambridge University Press, 2010, vol. 18.

[5] D. Goldberg, "What every computer scientist should know about floating-point arithmetic," *ACM Computing Surveys (CSUR)*, vol. 23, no. 1, pp. 5–48, 1991.

[6] D. Henderson, "Elementary functions : Algorithms and implementation," *Mathematics and Computer Education*, vol. 34, no. 1, p. 94, 2000.

[7] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical recipies in C*. Cambridge university press Cambridge, UK, 1992.