Université Pierre et Marie Curie **Année universitaire 2008/2009**
Licence de Mécanique

LA306 : Méthodes numériques pour la mécanique

Travaux Pratiques 2

——————-

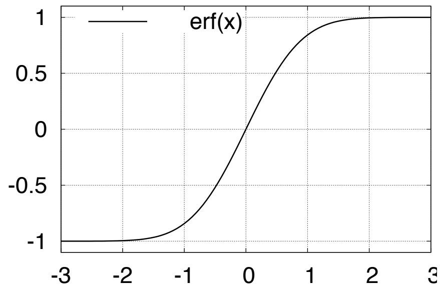
Intégration numérique par les méthodes de Newton-Cotes

On souhaite intégrer numériquement sur un intervalle $[a, b]$ une fonction donnée analytiquement par $f(x) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-x^2/A}$. On utilise ici la méthode des trapèzes puis de Simpson (puis la formule générale de Newton-Cotes pour les degrés 1, 2 et 4). On étudie l'erreur d'intégration commise par chacune de ces méthodes.

On supposera dans un premier temps :
$A = 1$ *et* $[a, b] = [-3, +3]$.
Dans ce cas, on a

$$J_3 = \int_{-3}^{+3} f(x)\mathrm{d}x = \int_{-3}^{+3} e^{-x^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\,\mathrm{erf}(3)$$

La fonction erf *(dite "fonction erreur") est représentée sur la figure ci-après.*



1. **Visualisation de la fonction à intégrer**
   On utilise le logiciel de visualisation graphique gnuplot : Dans le menu démarrer, chercher et ouvrir le programme *Wgnuplot*.
   Entrer ensuite `plot exp(-x**2.)`
   On peut recadrer la visualisation sur l'intervalle $[-3, +3]$ en tapant `set xrange [-3:3]` puis `replot`
   utiliser la commande `print sqrt(pi)*erf(3)` pour afficher la valeur exacte de l'intégrale (J_3). Noter cette valeur.
2. **Programmation de l'intégration en Fortran**
   (a) Quel ordre de grandeur donner au pas h d'intégration ?
   (b) Écrire un programme dit "principal" qui, dans un premier temps, demande à l'utilisateur d'entrer au clavier le nombre d'intervalles *n* et affiche à l'écran le pas d'intégration *h* correspondant. Compiler et exécuter.
   (c) Écrire une procédure `function` qui prend en entrée un réel x et qui renvoie la valeur de f au point x. Valider cette fonction, par exemple en faisant afficher à l'écran les valeurs de $f(0)$, $f(0.5)$, $f(1.5)$ et $f(2)$.
   (d) Compléter le programme principal avec le calcul de l'intégrale de f sur $[a, b]$ par la méthode des trapèzes composite. On fera afficher le résultat J_3^h de l'intégration à l'écran. Compiler et essayer différentes valeurs de h. *On utilisera ici l'option de compilation (*`-r8`*) qui permet aux réels d'être représentés en* **double précision**, *c'est-à-dire sur 8 octets.*
   (e) Compléter le programme principal avec le calcul de l'intégrale par la méthode de Simpson composite. Tracer également l'erreur. Conclure.

3. **Étude de l'erreur d'intégration**
   (a) Connaissant la valeur exacte J_3 de l'intégrale, compléter le programme pour qu'il affiche également l'erreur $|J_3^h - J_3|$ commise par l'intégration numérique.
   (b) Noter les trois valeurs de l'erreur obtenues pour $h = 0.1, 0.01$ et 0.001.
   On pourra à la main noter h et l'erreur correspondante dans un fichier.
   Tracer $\ln(|J_3^h - J_3|)$ en fonction de $\ln(h)$ sous gnuplot. En pratique, on trace $|J_3^h - J_3|$ en fonction de h en utilisant la représentation log-log grâce à l'instruction `set logscale xy`.
   Déterminer l'ordre de la méthode.
4. **Intégration sur un intervalle plus grand**
   Modifier le programme pour pouvoir imposer le pas d'intégration h plutôt que le nombre d'intervalle n. Avec la méthode des trapèzes, prendre $h = 0.001$. Remplacer le domaine d'intégration par $[-4, 4]$ puis $[-10, 10]$. Comment varie le résultat ? Le temps de calcul ? À la limite des intervalles arbitrairement grands, on montre en mathématiques que
   $$J_\infty = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}$$
   Quelle est l'erreur relative que l'on commet en remplaçant le domaine d'intégration par $[-3, 3]$? Commenter d'après le graphe de $x \mapsto \mathrm{erf}(x)$.
5. **Étude de l'influence du paramètre** A
   Représenter avec Gnuplot la function $f(x)$ pour $A = 1, 2$ et 5 sur l'intervalle $[-5, +5]$. Pourquoi faut-il choisir le pas h plus petit lorsque A augmente ? Choisir un pas convenable pour calculer $\int_{-5}^{+5} f(x)\mathrm{d}x$ pour $A = 5$ et effectuer le même calcul pour $A = 1, 2$. Que remarquez-vous ?
6. ***Pour aller plus loin :*** **Formules de Newton-Cotes**
   On rappelle le formule générale de Newton-Cotes exacte pour les polynômes de degré q pour des subdivisions régulières $h = \frac{(b-a)}{n}$ de l'intervalle d'intégration :
   $$\int_{x_i}^{x_i+qh} f(x)dx \simeq qh \sum_{j=0}^{q} B_j^q f(x_i + jh) \qquad (1)$$
   On rappelle les valeurs des coefficients B_j^q pour $j = 1, 2$ et 4, avec $B_j^q = B_{q-j}^q$:
   – pour $q = 1$, $B_0^1 = B_1^1 = 0.5$ (méthode des trapèzes) ;
   – pour $q = 2$, $B_0^2 = B_2^2 = 1/6$ et $B_1^2 = 4/6$ (méthode de Simpson) ;
   – pour $q = 4$, B_0^4=B_4^4=$7/90$, B_1^4=B_3^4=32/90 et B_2^4=12/90 (méthode de Boole-Villarceau).
   Ecrire un programme utilisant une méthode composite d'intégration numérique
   – demandant à l'utilisateur le degré q de la méthode,
   – affectant les valeurs correspondantes aux coefficients B_j^q,
   – demandant à l'utilisateur le nombre d'intervalles n, et vérifiant sa compatibilité avec q,
   – appelant un sous-programme `NewtonCotes` calculant la valeur de l'intégrale J_3^h pour différentes valeurs de n.
   Effectuer la compilation en **quadruple précision** (`ifort -r16 integ.f90 -o integ.exe`) et comparer l'ordre des différentes méthodes. Pour cela, on calculera les valeurs de l'erreur $|J_3^h - J_3|$ pour des pas $h = 1E-2, \quad 1E-3, \quad 1E-4$.