Informatique et données pour les sciences

SEANCE 5

Derivées et intégration d'une fonction

1 décembre 2023

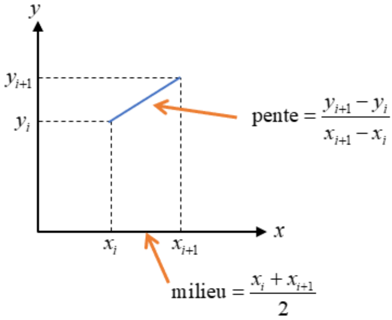
Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

- Considerons le calcul numérique de la dérivée d'une fonction dont on connait les valeurs $f(x)$ pour des abscisses x_i.
- Une dérivation numérique peut se faire simplement en calculant la pente de la courbe.
- Nous allons considérer que nous disposons au préalable des valeurs de la fonction en N_x points de coordonnées (x_i, y_i) où $y_i = f(x_i)$.
- Une approximation numérique de la dérivée est obtenue en calculant la pente entre deux points de coordonnées (x_i, y_i) et (x_{i+1}, y_{i+1}).
- La pente correspond au coefficient directeur de la droite qui passe par ces deux points.

Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

- Comme la pente est calculée entre deux abscisses x_i et x_{i+1}, on associera cette dérivée à l'abscisse située au milieu.
- On stocke les valeurs des nouvelles abscisses dans un tableau x_{new}. Ainsi, $x_{new,i}$=$(x_i + x_{i+1})/2$.
- Il est important de noter qu'il y aura seulement N_x-1 valeurs pour x_{new}.
- Nous donnons ici un premier programme qui utilise une boucle pour calculer les valeurs de la dérivée qui seront stockées dans un tableau y_p avec :

$$y_{p,i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}$$



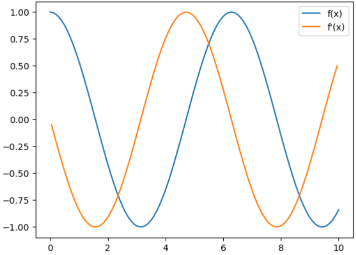
Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

- Calcul de la dérivée de la fonction cosinus.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

Nx = 101
x = np.linspace(0, 10, Nx)
y = np.cos(x)

xnew = np.zeros(Nx-1)
yp = np.zeros(Nx-1)

for i in range(Nx-1):
    xnew[i] = (x[i] + x[i+1]) / 2
    yp[i] = (y[i+1] - y[i]) / (x[i+1] - x[i])

plt.plot(x, y, label="f(x)")
plt.plot(xnew, yp, label="f'(x)")

plt.legend()
plt.show()
```

Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

- La technique utilisée correspond à une méthode de différence finie centrée car elle associe la valeur de la dérivée à une abscisse située au centre entre x_i et x_{i+1}.
- L'avantage de cette méthode est qu'elle respecte une certaine symétrie entre les abscisses.
- L'inconvénient est qu'elle nécessite de créer un tableau supplémentaire pour stocker les nouvelles abscisses.
- Pour éviter cela, il est possible d'associer la valeur de la dérivée à une des deux abscisses déjà connues x_i ou x_{i+1}.



Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

- Si on utilise x_i, on obtient le programme suivant. On peut rémarquer des différences ?

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

Nx = 101
x = np.linspace(0, 10, Nx)
y = np.cos(x)

yp = np.zeros(Nx-1)

for i in range(Nx-1):
    yp[i] = (y[i+1] - y[i]) / (x[i+1] - x[i])

plt.plot(x, y, label="f(x)")
plt.plot(x[0:Nx-1], yp, label="f'(x)")

plt.legend()
plt.show()
```

Comment calculer numériquement la dérivée d'une fonction ?

Voici un example de la méthode centrée avec vectorisation du calcul :

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

Nx = 101
x = np.linspace(0, 10, Nx)
y = np.cos(x)

xnew = (x[:-1] + x[1:]) / 2
yp = (y[1:] - y[:-1]) / (x[1:] - x[:-1])

plt.plot(x, y, label="f(x)")
plt.plot(xnew, yp, label="f'(x)")

plt.legend()
plt.show()
```

Intégration d'une fonction

- Il existe de nombreuses méthodes pour réaliser une intégration numérique.
- Nous allons considérer ici quelques méthodes simples.
- Ceux qui souhaiteraient peuvent consulter par exemple "Pratique de la simulation numérique" de Bijan Mohammadi et Jacques Hervé Saïac, Dunod (2003).
- Voici les deux méthodes discutées :
  - Méthode des rectangles.
  - Méthode des trapèzes.

Méthode des rectangles

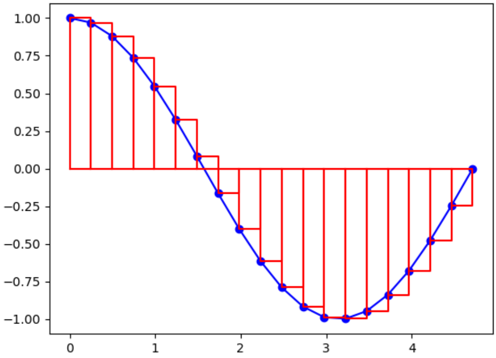
- Dans cette méthode, on calcule l'intégrale numérique en réalisant une somme de surfaces de rectangles. Le domaine d'intégration est découpé en intervalles et on fait comme si la fonction restait constante sur chaque intervalle.
- Sur chaque intervalle, on réalise ainsi l'approximation suivante :

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\cdot f(\alpha)$$

  où α est une abscisse appartenant à l'intervalle limité par a et b.
- Nous nous limiterons ici aux cas où $\alpha = a$ ou b, ce qui signifie que pour chaque intervalle nous considérons comme constante la valeur prise par la fonction à l'extrémité gauche ou droite de l'intervalle.

Méthode des rectangles

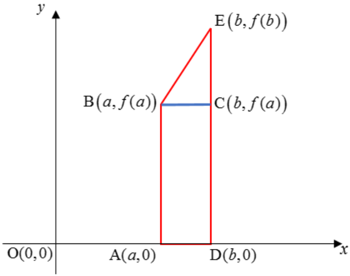
Réaliser un programme d'intégration pour $\alpha = a$ et avec visualisation des rectangles. :



Méthode des trapèzes

- Comme son nom l'indique, cette méthode d'intégration utilise une somme de surfaces de trapèzes.
- Sur chaque intervalle, on réalise alors l'approximation suivante :

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{(b-a)}{2} \cdot [f(a) + f(b)]$$



Méthode des trapèzes

Faire un programme similaire au précédent avec cette fois la méthode des trapèzes en utilisant les mêmes valeurs numériques pour la fonction.
Réaliser de même la visualisation des trapèzes.