

# Intégration numérique par la méthode double exponentielle

Pascal Molin

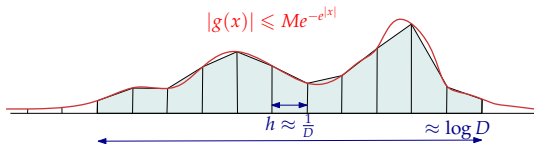
Université Bordeaux 1 / Inria Nancy

27 juin 2011

# Méthode double-exponentielle

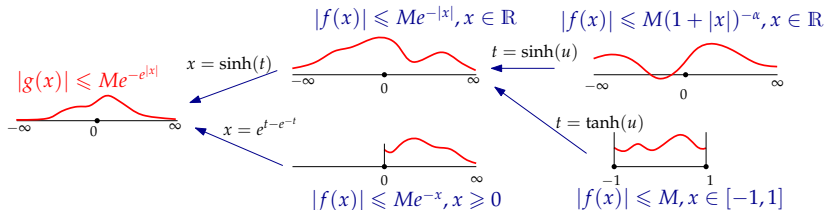
[Takahasi&Mori,1974]

- Formule des trapèzes pour  $g$  à décroissance DE



$D$  chiffres avec  $\approx D \log D$  évaluations.

- Cas général : changements de variables choisis selon l'intégrande



## Insuffisances

### Méthode très efficace

```
gp > \p100
      realprecision = 105 significant digits (100
        digits displayed)
gp > oo=[1];
gp > intnum(t=-oo,oo,1/(1+t^2))-Pi
time = 116 ms.
%3 = 0.E-105
```

...mais pas prouvée.

```
gp > intnum(t=-oo,oo,1/(1+(t+10)^2))-Pi
time = 104 ms.
%4 = 6.79601547... E-11
```

## Résultat type

### Théorème 0.1

Si  $f$  est une fonction définie sur  $[-1, 1]$ , holomorphe sur  $D(0, 2)$ , alors pour tout  $n \geq 1$

$$\left| \int_{-1}^1 f(x) dx - \sum_{k=-n}^n a_k f(x_k) \right| \leq \left( e^4 \sup_{D(0,2)} |f| \right) \exp\left(-\frac{5n}{\log(5n)}\right)$$

avec  $h = \frac{\log(5n)}{n}$ ,  $a_k = \frac{h \cosh(kh)}{\cosh(\sinh(kh))^2}$  et  $x_k = \tanh(\sinh(kh))$ .

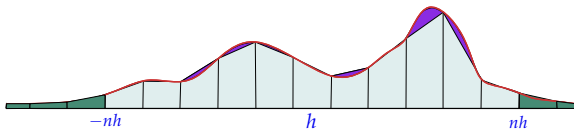
Théorie

## Formule de Poisson

$$g(x) = O(x^{-2}), g \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}), \hat{g}(X) = \int_{\mathbb{R}} e^{-2i\pi X t} g(t) dt$$

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} g(k) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{g}(k)$$

$$\underbrace{h \sum_{|k| > n} g(kh)}_{\textcircled{1}} + h \sum_{k=-n}^n g(kh) = \int_{\mathbb{R}} g + \underbrace{\sum_{k \in \mathbb{Z}^*} \hat{g}\left(\frac{k}{h}\right)}_{\textcircled{2}}$$



## Formule de Poisson

$$g(x) = O(x^{-2}), g \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}), \hat{g}(X) = \int_{\mathbb{R}} e^{-2i\pi X t} g(t) dt$$

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} g(k) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{g}(k)$$

$$\underbrace{h \sum_{|k| > n} g(kh)}_{\textcircled{1}} + h \sum_{k=-n}^n g(kh) = \int_{\mathbb{R}} g + \underbrace{\sum_{k \in \mathbb{Z}^*} \hat{g}\left(\frac{k}{h}\right)}_{\textcircled{2}}$$

Erreurs  $\textcircled{1}(nh)$  et  $\textcircled{2}\left(\frac{1}{h}\right)$ .

La formule est intéressante si  $g$  et  $\hat{g}$  sont simultanément rapidement décroissantes.

## Principe d'incertitude

### Theorem

Soit  $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  telle que

- $g(x) = O(e^{-\alpha_1|x|^{\beta_1}})$
- $\hat{g}(x) = O(e^{-\alpha_2|x|^{\beta_2}})$

alors

$$\frac{1}{\beta_1} + \frac{1}{\beta_2} \geq 1.$$

En particulier l'intégration de  $g$  par la méthode des trapèzes demande un nombre d'évaluations de  $g$  au moins linéaire. Si  $g$  n'est pas entière l'inégalité est stricte.

## Théorème principal

Soit  $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction vérifiant

- 1  $g$  possède un prolongement holomorphe sur une bande  $\Delta_\tau = \mathbb{R} + i] - \tau, \tau[$ ;
- 2  $|g(x)| \leq M_1 e^{-\alpha e^{\beta|x|}}$  sur  $\mathbb{R}$  avec  $\alpha, \beta > 0$ ;
- 3  $|g(z)| \leq M_2 e^{\lambda|z| + A e^{\gamma|z|}}$  sur  $\Delta_\tau$  avec  $\gamma < \beta$ ;

alors, pour tout  $D > 0$ , avec des valeurs explicite de  $h$  et  $n$  vérifiant

$$h \simeq \frac{2\pi\tau}{D + \log(M_2)} \quad \text{et} \quad n \simeq \frac{\log(D + \log(M_1))}{h\beta}$$

on a

$$\left| \int_{\mathbb{R}} g - h \sum_{k=-n}^n g(kh) \right| \leq e^{-D}.$$

① : erreur de troncature

Si  $|g(x)| \leq M_1 e^{-\alpha e^{\beta|x|}}$  sur  $\mathbb{R}$ ,

$$\sum_{k>n} |g(kh)| \lesssim M_1 e^{-\alpha e^{\beta nh}}$$

on pose

$$nh \approx \frac{1}{\beta} \log \left( \frac{D + \log M_1}{\alpha} \right).$$

## ② : erreur de quadrature

Deux ingrédients :

- Paley-Wiener

«régularité de  $g \leftrightarrow$  décroissance de  $\hat{g}$ »

## ② : erreur de quadrature

Deux ingrédients :

- Paley-Wiener

«régularité de  $g \leftrightarrow$  décroissance de  $\hat{g}$ »

### Theorem

Si  $g$  possède un prolongement holomorphe à  $\Delta_\tau = \mathbb{R} + i[-\tau, \tau]$  et vérifie :

- $\|g(\cdot - i\tau)\|_1 + \|g(\cdot + i\tau)\|_1 = M_2(\tau) < \infty$  ;
- $g(x \pm it) \rightarrow_{x \rightarrow \pm\infty} 0$  uniformément en  $t < \tau$  ;

alors  $|\hat{g}(x)| \leq M_2(\tau)e^{-2\pi\tau|x|}$ .

$$\text{donc } \textcircled{2} = \left| \sum_{k \in \mathbb{Z}^*} \hat{g}\left(\frac{k}{h}\right) \right| \leq e^{-D} \text{ pour } h \leq \frac{2\pi\tau}{D + \log(4M_2(\tau) + 1)}.$$

## ② : erreur de quadrature

Deux ingrédients :

- Paley-Wiener

«régularité de  $g \leftrightarrow$  décroissance de  $\hat{g}$ »

- Phragmén-Lindelöf

«extension des variations exponentielles»

## ② : erreur de quadrature

Deux ingrédients :

- Paley-Wiener

«régularité de  $g \leftrightarrow$  décroissance de  $\hat{g}$ »

- Phragmén-Lindelöf

«extension des variations exponentielles»

### Theorem

Si  $g$  est holomorphe sur  $\Delta_\tau$  et vérifie

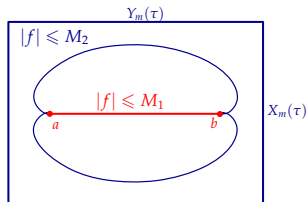
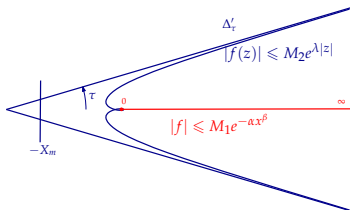
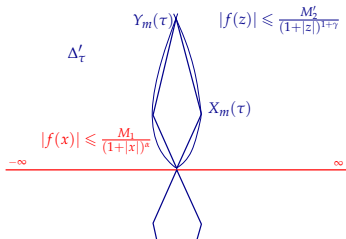
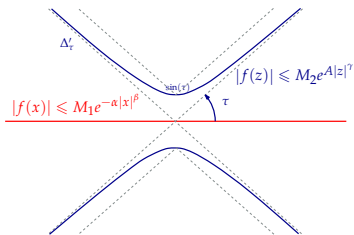
- $|g| = O(e^{-\alpha e^{\beta|x|}})$  sur  $\mathbb{R}$  ;
- $|g| \leq M$  sur  $\Delta_\tau$  ;

alors pour  $t < \tau$ ,  $|g(x \pm it)| \leq M e^{-\alpha_t e^{\beta|x|}}$ , avec

$$\alpha_t = \alpha \left( \cos(\beta t) - \frac{\sin(\beta t)}{\tan(\beta \tau)} \right).$$

→ valeur explicite de  $M_2(t) = \|g(\cdot \pm it)\|_1$ .

# Changements de variable



Dans chacune des situations ci-dessus, la méthode double-exponentielle permet de calculer  $\int f$  à précision absolue  $D$  prouvée avec  $O\left(\frac{D \log D}{2\pi\tau}\right)$  évaluations de  $f$ .

Pratique

## Exemples

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$$

$z$

$$sh(sh(t))$$

$\Delta'_\tau$

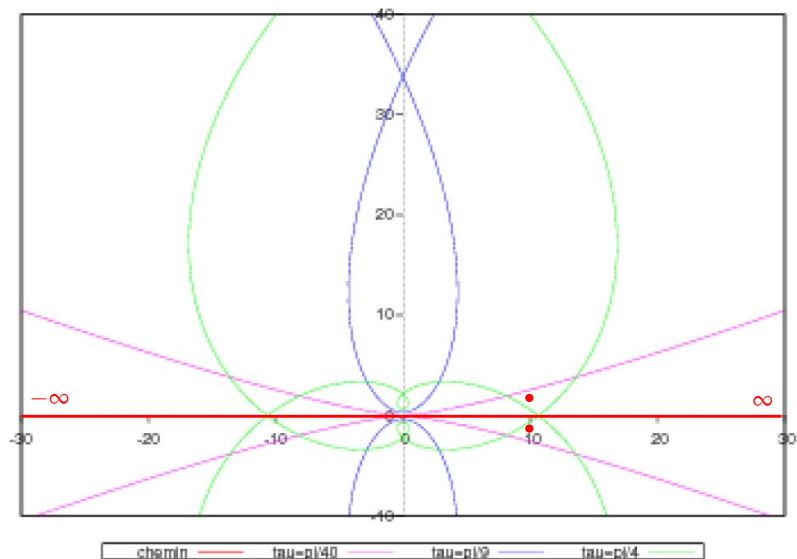
pôles  $\notin \Delta'_\tau$



## Exemples

	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✗

## Petite valeur de tau



## Petite valeur de tau

```
? \p1000
  realprecision = 1001 significant digits (1000
    digits displayed)
? f(z)=1/(1+z^2);
? D=1000*log(10);
? show(asinh(asinh(10+I)))
%6 = 1.8198999017302092895 + 0.03132601926270185771*I
? tau=0.03;h=pas_h_shsh(tau,1,1,D);show(h)
%7 = 8.183792956273686739 E-5
? n=ceil(asinh(asinh(2*10^1000+10))/h);show(n)
%8 = 103077
? Pi-integration_shsh(z->f(z-10),h,n,1)
%9 = 7.729969385579881748 E-1001
```

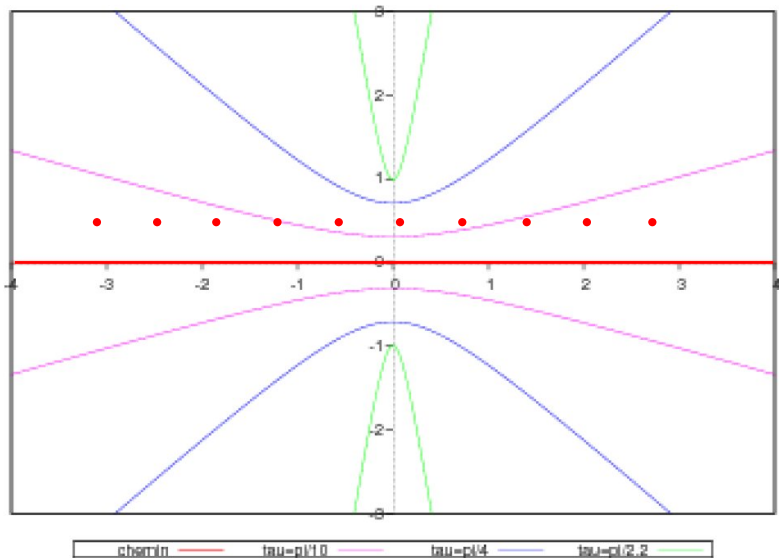
## Exemples

	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✗
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✗

## Exemples

	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✗
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2} dz}{1+e^{iz-1}}$	$sh(t)$	pôle $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✗

## Ligne de pôles



## Exemples

	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✗
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2} dz}{1+e^{iz-1}}$	$sh(t)$	pôle $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	$\Gamma$ croît pour $\tau < 0$	✗

## Exemples

	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✗
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2} dz}{1+e^{iz-1}}$	$sh(t)$	pôle $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	$\Gamma$ croît pour $\tau < 0$	✗
$\int_{\mathbb{R}} e^{-ch(z)+ich(2z)} dz$	$t$	$L^1(\mathbb{R} \pm i\tau)$ énorme	✗
$\int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(z) dz}{z}$	$sh(sh(t))$	$\sin(ie^t)$ explose	✗

# Extensions

## Fonctions méromorphes

Si  $\rho$  est un pôle de  $g$ , de résidu  $r_\rho$  :

$$\hat{g}(X) = \int_{\mathbb{R} \pm i\tau} e^{-2i\pi\tau X t} g(t) dt + 2i\pi e^{\mp 2i\pi X \rho} r_\rho$$

Donc pour des pôles de  $f$

$$\left| \sum_{k \in \mathbb{Z}^*} \hat{g}\left(\frac{k}{h}\right) - 2i\pi \sum_{\rho \in Z_\tau} \sum_{\varphi^{-1}(\rho)} \frac{\varepsilon_z r_\rho}{e^{-\varepsilon_z 2i\pi z/h} - 1} \right| \leq \frac{2M_1}{e^{2\pi\tau/h} - 1}$$

avec  $\varepsilon_z$  le signe de  $\text{Im}z$ .

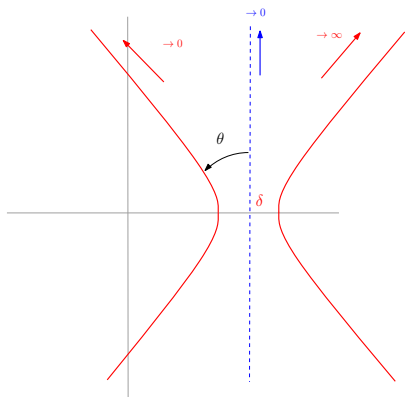
## Prise en compte des résidus

```
? \p1000
  realprecision = 1001 significant digits (1000
    digits displayed)
? f(z)=1/(1+z^2);
? tau=Pi/2.2;
? h=2*Pi*tau/(1000*log(10)+log(2/cos(tau)));show(h)
%6 = 0.003892182386142456451
? n=ceil(asinh(asinh(2*10^1000))/h)
%7 = 2168
? Pi-integration_shsh(f,h,n,1)
%8 = 0.E-1001
? diff=Pi-integration_shsh(z->f(z-15),h,n,1);show(diff
)
%9 = 2.988841749810731359 E-14
? Rho=[15+I,15-I];Res=[-I/2,I/2];
? diff+poles_shsh(Rho,Res,h)
%11 = -2.9500027961671405652 E-1002 + 0.E-1014*I
```

## Exemples

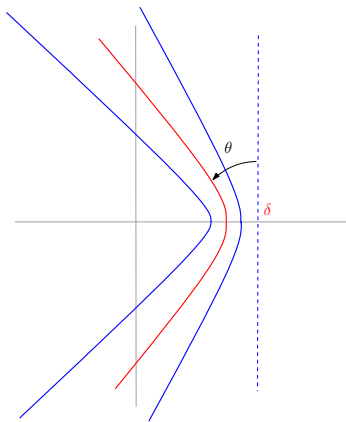
	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✓
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2} dz}{1+e^{iz-1}}$	$sh(t)$	pôle $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	$\Gamma$ croît pour $\tau < 0$	✗
$\int_{\mathbb{R}} e^{-ch(z)+ich(2z)} dz$	$t$	$L^1(\mathbb{R} \pm i\tau)$ énorme	✗
$\int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(z) dz}{z}$	$sh(sh(t))$	$\sin(ie^t)$ explose	✗

## Décalage de chemin



fonction gamma sur une droite  
verticale

## Décalage de chemin



fonction gamma sur une droite  
verticale

## Exemples

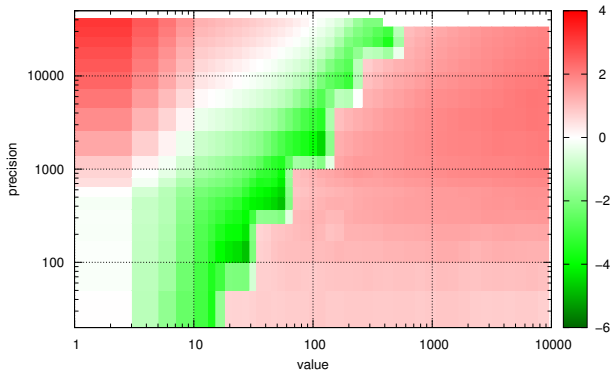
	$z$	$\Delta'_\tau$	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✓
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2} dz}{1+e^{iz-1}}$	$sh(t)$	pôle $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	$\Gamma$ croît pour $\tau < 0$	✓
$\int_{\mathbb{R}} e^{-ch(z)+ich(2z)} dz$	$t$	$L^1(\mathbb{R} \pm i\tau)$ énorme	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(z) dz}{z}$	$sh(sh(t))$	$\sin(ie^t)$ explose	✗

Exemple d'utilisation

# Fonction d'erreur

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{-i}{\pi} e^{-x^2} \int_{\mathbb{R}} \frac{e^{-z^2}}{z - ix} dz$$

comparaison avec MPFR

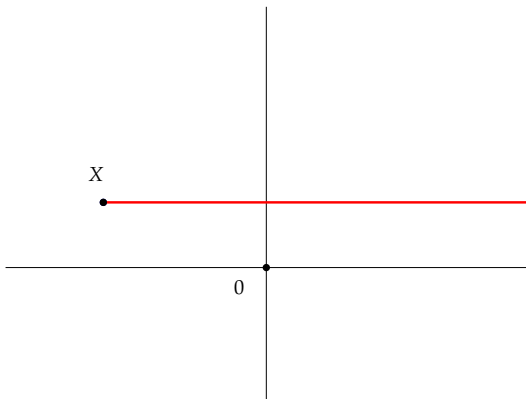


MPFR 50 fois plus rapide

formule 400 fois plus rapide

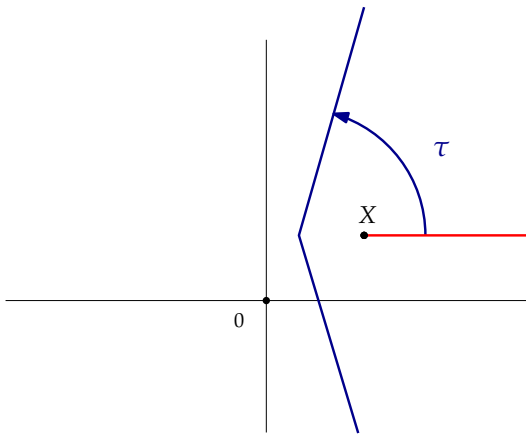
## Fonction gamma incomplète

On calcule  $\Gamma_{\text{inc}}(s, x) = \int_x^\infty t^s e^{-t} \frac{dt}{t}$  pour  $s \in \mathbb{C}$  et  $x \notin \mathbb{R}_-$ .



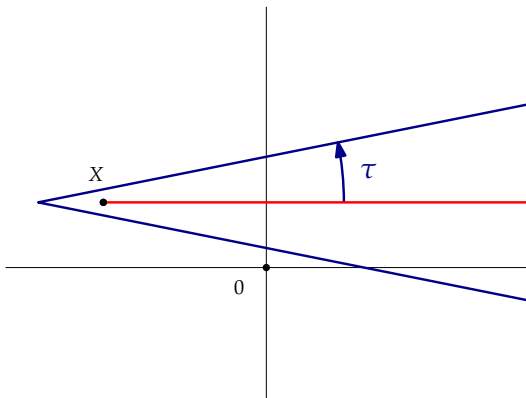
## Fonction gamma incomplète

On calcule  $\Gamma_{\text{inc}}(s, x) = \int_x^\infty t^s e^{-t} \frac{dt}{t}$  pour  $s \in \mathbb{C}$  et  $x \notin \mathbb{R}_-$ .



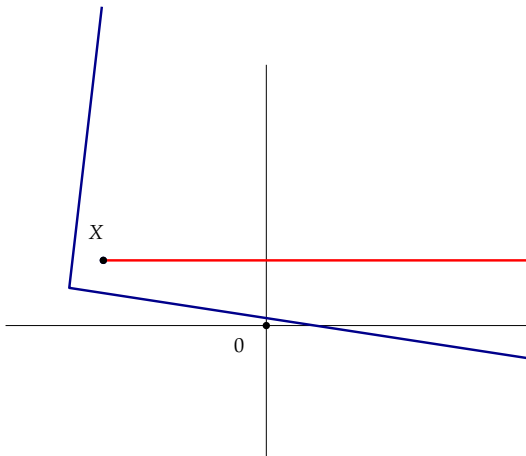
## Fonction gamma incomplète

On calcule  $\Gamma_{\text{inc}}(s, x) = \int_x^\infty t^s e^{-t} \frac{dt}{t}$  pour  $s \in \mathbb{C}$  et  $x \notin \mathbb{R}_-$ .



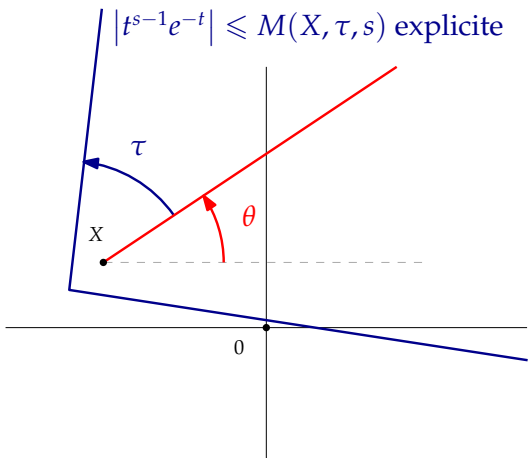
## Fonction gamma incomplète

On calcule  $\Gamma_{\text{inc}}(s, x) = \int_x^{\infty} t^s e^{-t} \frac{dt}{t}$  pour  $s \in \mathbb{C}$  et  $x \notin \mathbb{R}_-$ .



## Fonction gamma incomplète

On calcule  $\Gamma_{\text{inc}}(s, x) = \int_x^\infty t^s e^{-t} \frac{dt}{t}$  pour  $s \in \mathbb{C}$  et  $x \notin \mathbb{R}_-$ .



$\Gamma_{\text{inc}}(s, X)$  calculable à précision  $D$  en  $n \sim \frac{2D \log D}{\pi^2}$  évaluations.

## Références



Pascal Molin.

*Intégration numérique et calculs de fonctions L.*

PhD thesis, Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 10 2010.



Pascal Molin.

Multi-precision computation of the complex error function.



Masaaki Sugihara.

Optimality of the double exponential formula—functional analysis approach.

*Numer. Math.*, 75(3) :379–395, 1997.



Masatake Mori.

Discovery of the double exponential transformation and its developments.

*Publ. Res. Inst. Math. Sci.*, 41(4) :897–935, 2005.



Ken'ichiro Tanaka, Masaaki Sugihara, Kazuo Murota, and Masatake Mori.

Function classes for double exponential integration formulas.

*Numer. Math.*, 111(4) :631–655, 2009.