

Intégration numérique par la méthode double exponentielle

Pascal Molin

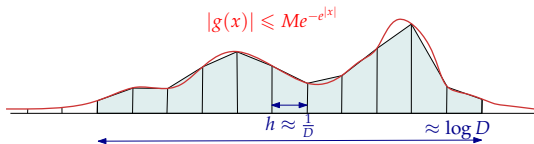
Université Bordeaux 1 / Inria Nancy

27 juin 2011

Méthode double-exponentielle

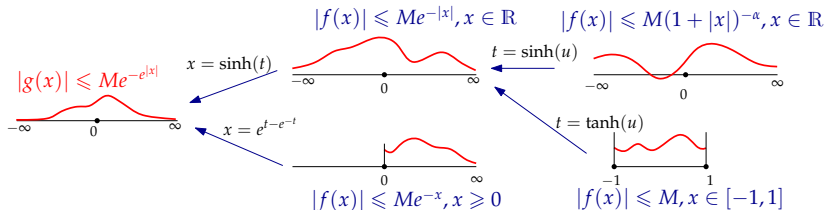
[Takahasi&Mori,1974]

- 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 $x_k = \tanh(\sinh(kh))$.

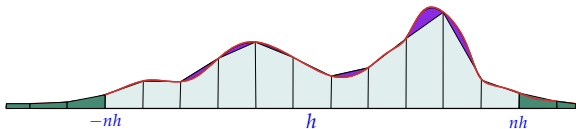
Théorie

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 Δ_τ 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 Δ_τ et vérifie

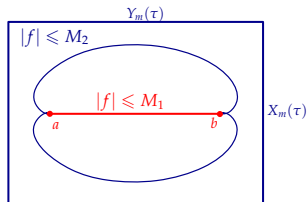
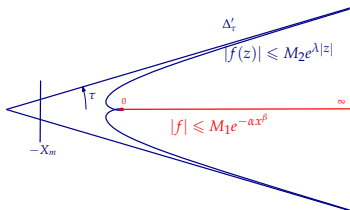
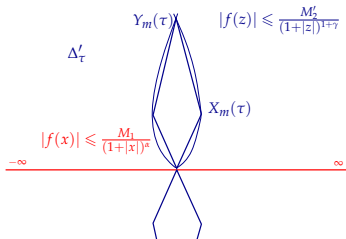
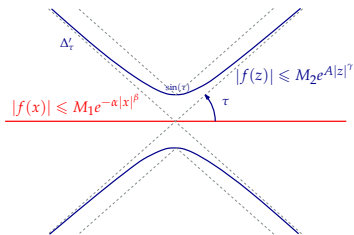
- $|g| = O(e^{-\alpha e^{\beta|x|}})$ sur \mathbb{R} ;
- $|g| \leq M$ sur Δ_τ ;

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

$$sh(sh(t))$$

Δ'_τ

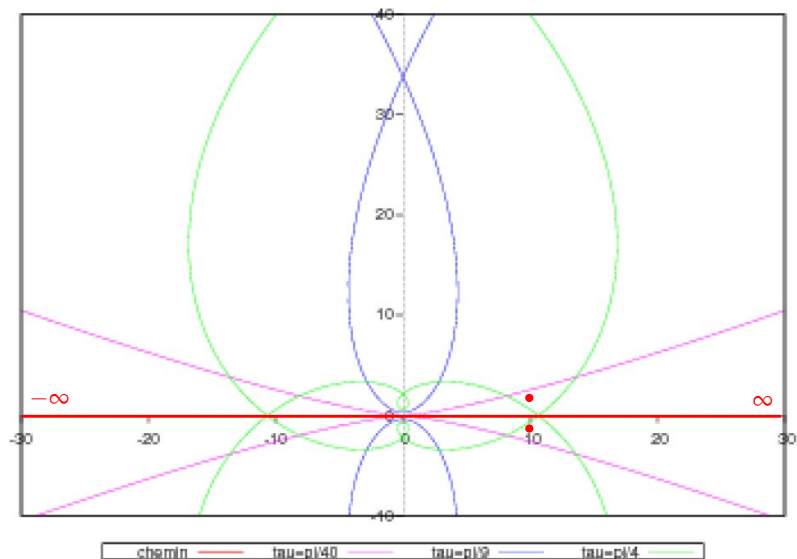
pôles $\notin \Delta'_\tau$



Exemples

	z	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	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
```

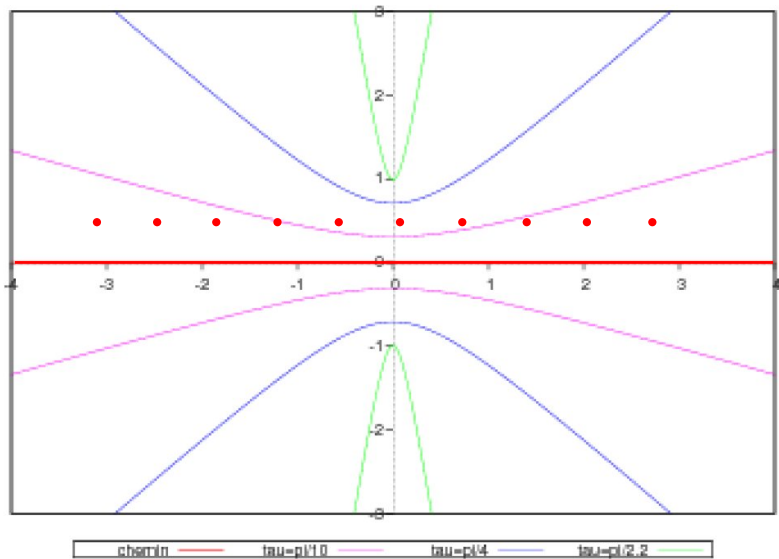
Exemples

	z	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	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	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	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	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	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 $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	Γ croît pour $\tau < 0$	✗

Exemples

	z	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	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 $\in \Delta'_\tau, \forall \tau$	✗
$\int_{\mathbb{R}} \Gamma(1+iz) dz$	$sh(t)$	Γ 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 ρ est un pôle de g , de résidu r_ρ :

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

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 ε_z le signe de $\text{Im}z$.

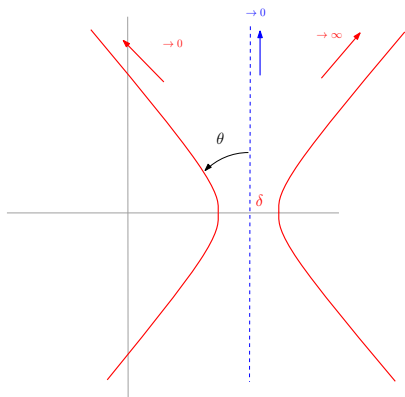
Prise en compte des résidus

```
? \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

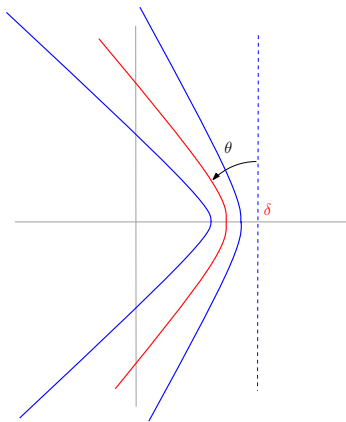
	z	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✓
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✓
$\int_{\mathbb{R}}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

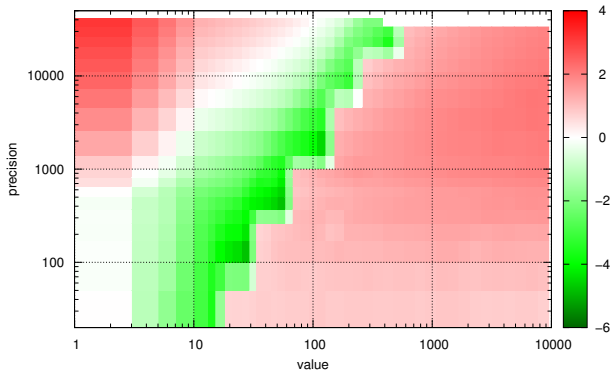
	z	Δ'_τ	
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+z^2}$	$sh(sh(t))$	pôles $\notin \Delta'_\tau$	✓
$\int_{\mathbb{R}} \frac{dz}{1+(z-10)^2}$	$sh(sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.04$	✓
$\int_{-100}^{100} \frac{dz}{1+z^2}$	$100 th(\frac{\pi}{2} sh(t))$	pôle $\in \Delta'_\tau, \tau > 0.06$	✓
$\int_{\mathbb{R}}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

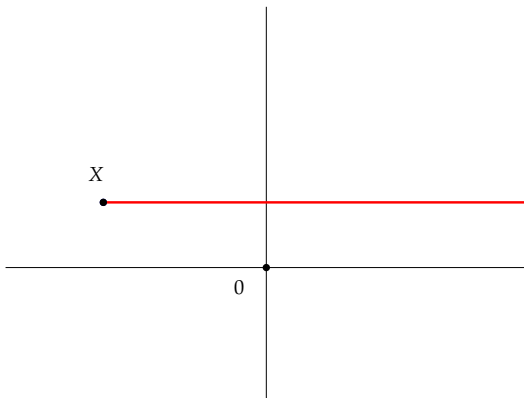


MPFR 50 fois plus rapide

formule 400 fois plus rapide

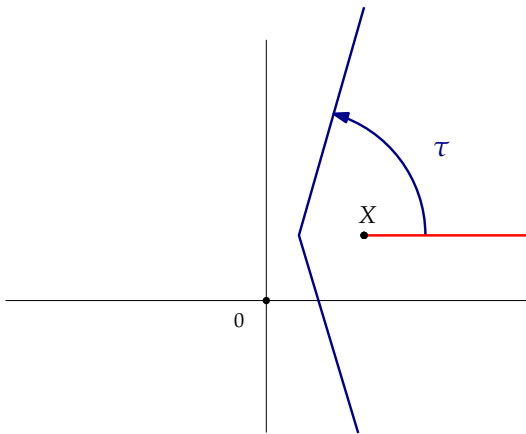
Fonction gamma incomplète

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



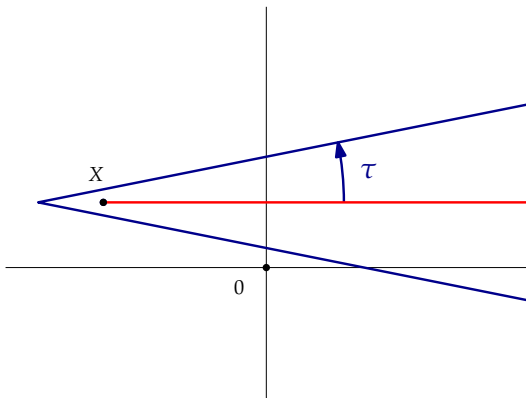
Fonction gamma incomplète

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



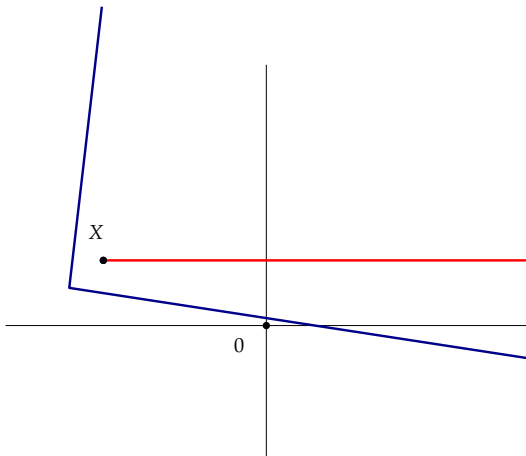
Fonction gamma incomplète

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



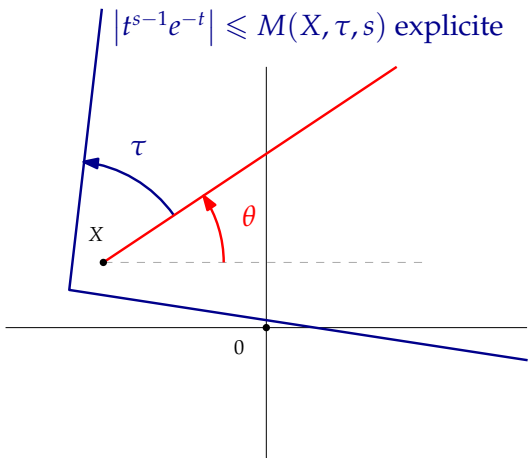
Fonction gamma incomplète

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.