Modélisation/Calculs scientifiques - GME5

$\smile\frown\smile$

Leçon 3

$\smile\frown\smile$

Intégration numérique

G. Vinsard

Gerard.Vinsard@univ-lorraine.fr

8 mai 2017

Objectifs

- Expliquer le principe des quadratures de Gauss à 1 dimension ;
- Donner l'idée des méthodes d'intégration adaptative avec l'exemple des trapèzes puis des méthodes de Gauss ;
- Fournir quelques éléments de compréhension de l'intégration dans $\mathbb{R}^2$ et $\mathbb{R}^3$.
- Les méthodes stochastiques de type Monte-Carlo ne sont pas évoquées.

L'aire sous la courbe

- Si une fonction $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ est donnée, son intégrale sur le segment $[a, b]$

$$\mathcal{I} = \int_a^b f(x)\, dx$$

est l'aire du domaine de $\mathbb{R}^2$ dont les coordonnées (x, y) sont telles que

$$a \leq x \leq b \text{ et pour chaque } x \ : \ 0 \leq y \leq f(x)$$

- Cette définition ne fournit pas de moyen de calcul de $\mathcal{I}$; et les moyens de calcul demandent à f d'être dotée de propriétés qui leur permettent de fonctionner.

- L'analyse des propriétés de fonctions qui permettent ce calcul constitue la majeure partie de la théorie de l'intégration.

Intégrale de Riemann

- Une fonction f est intégrable au sens de Riemann sur l'intervalle $[a, b]$ si la limite

$$\mathcal{J} = \lim_{N \longrightarrow \infty} \frac{b-a}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f\left(a + \frac{b-a}{N}\, n\right)$$

existe et dans ce cas

$$\mathcal{I} = \int_a^b f(x)\, dx = \mathcal{J}$$

- Les fonctions qui sont intégrables au sens de Riemann sont en gros les fonctions continues par morceaux : elles peuvent être discontinue en un nombre fini de position x dans $[a, b]$ mais elles sont continues dans les sous-intervalles formés par deux de ces positions successives.

- On se limite ici au cas des fonctions intégrables au sens de Riemann.

Calcul d'intégrale par primitivation

- Une fonction f admet une primitive F si

$$F'(x) = f(x)$$

Les fonctions continues par morceaux admettent des primitives.

- Et alors

$$\mathcal{I} = \int_a^b f(x)\, dx = F(b) - F(a)$$

Cela peut se voir en écrivant la définition de la dérivée de F comme

$$F'(x) = \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \frac{F(x+\epsilon) - F(x)}{\epsilon}$$

et en injectant cette expression dans la définition de l'intégration comme

$$\mathcal{J} = \lim_{N \longrightarrow \infty} \frac{b-a}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \lim_{\epsilon \longrightarrow 0} \frac{F\left(a + \frac{b-a}{N}\ n + \epsilon\right) - F\left(a + \frac{b-a}{N}\ n\right)}{\epsilon}$$

si les limites ont un sens, il est possible de choisir en particulier $\epsilon = (b-a)/N$ et donc

$$\mathcal{J} = \lim_{N \longrightarrow \infty} \frac{b-a}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{F\left(a + \frac{b-a}{N}\ n + \epsilon\right) - F\left(a + \frac{b-a}{N}\ n\right)}{\frac{b-a}{N}} = F(b) - F(a)$$

L'intégration numérique

- L'inconvénient du calcul d'intégrale par primitivation est qu'il faut disposer d'une primitive et il n'y a pas de moyen automatique d'en obtenir pour toutes les fonctions.

- Aussi est-il nécessaire de disposer d'algorithme de calcul numérique d'intégrales.

- Les algorithmes modernes sont composites, typiquement

```
Function: quad_qag (f, x, a, b, key, [epsrel, epsabs, limit])

Integration of a general function over a finite interval.
quad_qag implements a simple globally adaptive integrator
using the strategy of Aind (Piessens, 1973). The caller
may choose among 6 pairs of Gauss-Kronrod quadrature formulae
for the rule evaluation component. The high-degree rules are
suitable for strongly oscillating integrands.
```

Et sans entrer dans des détails trop techniques il est important de comprendre les ingrédients utilisés qui sont des variantes de : la méthode des trapèzes adaptative et la méthode de Gauss-Legendre.

Méthode des trapèzes

► C'est la méthode qui épouse le plus directement la définition de l'aire sous la courbe : une subdivision de l'intervalle $[a, b]$ est donnée

$$x_n = a + \frac{b-a}{N} \text{ pour } n = 0, \ldots, N$$

et

$$\mathcal{I} \approx \frac{b-a}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \frac{f(x_n) + f(x_{n+1})}{2}$$

c'est à dire la somme des trapèzes délimités par les points de coordonnées $(x_n, 0), (x_{n+1}, 0), (x_{n+1}, f(x_{n+1})), (x_n, f(x_n))$.

► Le défaut de cette méthode est que sa précision dépend du nombre N de sous-intervalles qu'il est difficile de donner *a priori* et que la précision n'est de toute façon pas contrôlée.

Méthode des trapèzes adaptative

- D'où l'idée d'adapter les sous-intervalles : l'algorithme est

---

Données : la fonction f à intégrer, les bornes d'intégration a b, une précision ϵ (dont l'effet est difficile à préciser), une limitation du nombre d'évaluation de la fonction f autorisé Nx

Résultat : Une estimation de $\int_a^b f(x)\,dx$ difficile à relier à ϵ

début

$fa \longleftarrow f(a)$; $fb \longleftarrow f(b)$;
nouveaux_intervalles $\longleftarrow$ [[[a, fa], [b, fb]]];
$Nx \longleftarrow Nx - 2$; $vas\_y \longleftarrow 1$;
tant que $vas\_y > 0$ *et* $Nx > 0$ **faire**
    $vas\_y \longleftarrow 0$; $n \longleftarrow 1$; $precision \longleftarrow \epsilon/$longueur(*nouveaux_intervalles*);
    intervalles $\longleftarrow$ *nouveaux_intervalles* ; *nouveaux_intervalles* $\longleftarrow$ [ ] ; $I \longleftarrow 0$;
    tant que $n <$ *longueur*(*intervalles*) **faire**
        intervalle $\longleftarrow$ *intervalles*[n];
        $a\_fa \longleftarrow intervalle[1]$; $a \longleftarrow a\_fa[1]$; $fa \longleftarrow a\_fa[2]$;
        $b\_fb \longleftarrow intervalle[2]$; $b \longleftarrow b\_fb[2]$; $fb \longleftarrow b\_fb[2]$;
        $I_{ab} \longleftarrow (fa + fb) \times (b - a)/2$;
        $c \longleftarrow (a + b)/2$; $fc \longleftarrow f(c)$;
        $Nx \longleftarrow Nx - 1$;
        $I \longleftarrow I + I_{ab}$ $I_{ac} \longleftarrow (fa + fc) \times (c - a)/2$; $I_{cb} \longleftarrow (fc + fb) \times (b - c)/2$;
        si $|I_{ab} - I_{ac} - I_{cb}| > I_{ab} \times precision|$ **alors**
            nouveaux_intervalles $\longleftarrow$
            reunion de nouveaux_intervalles et [[[a, fa], [c, fc]], [[c, fc], [b, fb]]];
            $vas\_y \longleftarrow vas\_y + 1$

si $Nx < 0$ **alors**
    $I \longleftarrow$ "échec de l'algorithme"

Description de l'algorithme

- Si une liste de sous-intervalles est donnée

$$[[x_0 = a, x_1], [x_1, x_2], \ldots, [x_{N-1}, x_N]]$$

il est possible de calculer la contribution à $\mathcal{I}$ des sous-intervalles $[x_n, x_{n+1}]$ comme

$$\mathcal{I}(x_n, x_{n+1}) = (x_{n+1} - x_n)\frac{f(x_{n+1}) + f(x_n)}{2}$$

- De plus on calcule (toujours avec la formule des trapèzes) ce que deviendrait cette contribution si le sous-intervalle $[x_n, x_{n+1}]$ avait été décomposé en deux : $\left[x_n, \frac{x_n+x_{n+1}}{2}\right]$ et $\left[\frac{x_n+x_{n+1}}{2}, x_{n+1}]\right]$, soit

$$\mathcal{J}(x_n, x_{n+1}) = \mathcal{I}\left(x_n, \frac{x_n + x_{n+1}}{2}\right) + \mathcal{I}\left(\frac{x_n + x_{n+1}}{2}, x_{n+1}\right)$$

- Si $|\mathcal{J}(x_n, x_{n+1}) - \mathcal{I}(x_n, x_{n+1})| < \epsilon$ (un seuil donné) alors c'est qu'il n'était pas nécessaire de fractionner le sous-intervalle ; sinon il faut le faire.

- La liste initiale de sous-intervalles est : $[[a, b]]$

- Et on ajoute des éléments de gestion des listes, notamment en en compliquant un peu la structure pour minimiser le nombre de calculs de la valeur de la fonction.

Algorithme adaptatifs

- Ce type d'algorithme est dit adaptatif.

- Pratiquement on crée deux listes : une qui contient les intervalles dont on ne sait pas encore s'il faut ou non les découper, l'autre qui contient ceux qui n'ont plus à être découpés

- Et on parcourt la première liste en lui retranchant l'intervalle analysé, et soit en lui ajoutant les deux sous-intervalles issus de la découpe soit en ajoutant à la seconde liste cet intervalle.

- L'algorithme se termine lorsque la liste des intervalles à analyser est vide.

- C'est en général assez robuste (quoi que ça puisse être pris en défaut, cf. exemples) ; mais c'est souvent assez coûteux en terme de nombre de fois où la fonction est calculée : aussi utilise-t-on généralement pour le calcul des $\mathcal{I}(x_n, x_{n+1})$ des formules d'intégration plus puissantes que celle du trapèze.

Méthode de Gauss-Legendre

- L'idée de la méthode est d'approximer

$$\mathcal{I} = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx \sum_{p=1}^{P} w_p\, f(x_p)$$

où les poids w_p et les points de support x_p sont pré-calculés de manière que l'intégration soit exacte pour des polynômes

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} \alpha_n\, x^n$$

du plus grand degré N possible.

- Cette méthode a été imaginée et mise en œuvre par Gauss et Legendre simultanément.

Calcul des poids et du support

- Pour un petit nombre P de poids et points de support, ceux-ci peuvent être calculés facilement.

- $P = 1$: la formule est $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx = w_1\ f(x_1)$; si

$f(x) = \sum_{n=0}^{N} \alpha_n\, x^n$ alors $\forall\ \alpha_n$ pour $n \leq N$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx = 2\ \alpha_0 + 0 \times \alpha_1 + \frac{2}{3}\ \alpha_2 + \ldots \approx w_1\ (\alpha_0 + \alpha_1\ x_1 + \ldots)$$

où on voit que

$$N = 1\ ;\ x_1 = 0\ ;\ w_1 = 2$$

et donc la formule d'intégation est

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx 2\ f(0)$$

elle est valable pour des polynômes de degré ≤ 1.

Calcul des poids et du support

- $P = 2$, cette fois $\forall\ \alpha_n$ pour $n \leq N$

$$2\ \alpha_0 + 0 \times \alpha_1 + \tfrac{2}{3}\ \alpha_2 + 0 \times \alpha_3 + \ldots \approx \begin{array}{r} w_1\ \ (\alpha_0 + \alpha_1\ x_1 + \ldots) \\ +w_2\ \ (\alpha_0 + \alpha_1\ x_2 + \ldots) \end{array}$$

On trouve $N = 3$ et le système

$$w_1 + w_2 = 2\ ;\ w_1\ x_1 + w_2\ x_2 = 0\ ;\ w_1\ x_1^2 + w_2\ x_2^2 = \frac{2}{3}\ ;\ w_1\ x_1^3 + w_2\ x_2^3 = 0$$

pour lequel

$$w_1 = w_2 = 1\ ;\ x_2 = -x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

La formule d'intégration est

$$\int_{-1}^{1} f(x)\ dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

elle est valable pour des polynômes de degré ≤ 3.

Le cas général

- Pour P quelconque, les x_p sont les P zéros du polynôme de Legendre de degrés P, les w_p étant calculés *a posteriori* ;
Le degré du polynôme intégré exactement par la méthode à P points est $N = 2\,P - 1$

- Ce résultat n'est pas si facile à retrouver (il a fallu Gauss ou Legendre pour cela !) mais il est facile à utiliser dans la mesure où
  - il existe des tableaux de poids et support (googler « quadrature Gauss-Legendre ») ;
  - il est possible d'utiliser des algorithmes de construction de ces tableaux ; en Maxima :

```
load(orthopoly);
support_et_poids_de_gauss_legendre(n):=
/* renvoie le tableau [[x1,w1],...,[xn,wn]] composés des tableaux [points de support,poids].
adaptation de gauleg--Rybicki du numerical recipes */
block([polynome,derivee,racines,poids,x,precision:10^(-15)],
polynome:legendre_p(n,x),derivee:diff(polynome,x),
racines:realroots(polynome,precision),
map(lambda([u],ev(float([x,2/((1-x^2)*derivee^2)]),u)),racines)
);
```

Changement de variables

- En général on n'a pas à calculer $\int_{-1}^{1} f(x)\, dx$ mais $\int_a^b f(y)\, dy$; aussi faut-il préalablement faire un changement de la variable d'intégration avant d'utiliser la méthode de Gauss-Legendre.

- On pose $y = \dfrac{a+b}{2} + \dfrac{b-a}{2}\, x$ et il vient

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(y)\, dy &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\, x\right) dx \\
&\approx \frac{b-a}{2} \sum_{p=1}^{P} w_p\, f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}\, x_p\right)
\end{aligned}$$

Autre méthodes de quadrature de Gauss

- La méthode de Gauss-Legendre est utilisée lorsque l'intégrale à calculer n'est pas dotée d'une structure particulière. Si par contre elle était (par exemple) de la forme

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx$$

c'est à dire que l'intégrant serait le produit du facteur $1/\sqrt{1-x^2}$ (on l'appelle un noyau) par une fonction $f(x)$ quelconque mais ne possédant par de singularité en -1 et 1 il y aurait mieux à faire que d'utiliser la méthode de Gauss-Legendre.

- On utiliserait la méthode de Gauss-Tchebytchev, qui s'écrit

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \sum_{p=1}^{P} w_p\, f(x_p)$$

où les poids w_p et support x_p sont pré-calculés à partir des polynômes de Tchebytchev plutôt que ceux de Legendre.

- Selon les noyaux qui apparaissent, il existe toute une zoologie de formules de Gauss...

Bornes d'intégration et singularité

- Le cas traité jusqu'ici est celui où les bornes d'intégration sont finies (a et b avec $|a|$ et $|b|$ ¡ ∞) et l'intégrale ne comporte aucune singularité ($\forall x \in [a, b] \ : \ |f(x)| < \infty$).

- Il peut être complété par le cas où il y a des singularités ; c'est par exemple celui qui comporte un noyau de Tchebytchev. Dans ce cas, si on veut préserver une bonne qualité d'intégration il n'y a guère d'autre chose à faire que d'utiliser la méthode adaptée au noyau singulier.

- Et il y a le cas où une ou les deux bornes d'intégration sont infinies. Là encore, selon le noyau, il existe des méthodes adaptées. Comme par exemple la méthode de Gauss-Laguerre qui s'écrit

$$\int_0^\infty \exp^{-x} \ f(x) \, dx = \sum_{p=1}^{P} w_p \ f(x_p)$$

où les poids w_p et support x_p sont pré-calculés à partir des polynômes de Laguerre plutôt que ceux de Legendre.

Retour sur les primitives

- La méthode de Gauss-Legendre permet de trouver une approximation de primitive. Si

$$F'(t) = f(t)$$

alors

$$F(t) = \int_0^t f(y)\, dy + F(0)$$

et donc si on fixe un P

$$F(t) = F(0) + \frac{t}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{t}{2} + \frac{t}{2}\, x\right)\, dx \approx F(0) + \frac{t}{2} \sum_{p=1}^{P} w_p\, f\left(\frac{t}{2} + \frac{t}{2}\, x_p\right)$$

- Ça ne donne pas le droit de manipuler cette approximation comme un vraie primitive (notamment sa dérivée ne redonne pas f exactement) mais ça permet de construire une telle fonction pour des besoins particuliers comme ceux des TD 3 et 4.

Retour sur les algorithmes adaptatifs

- La méthode du trapèze adaptative n'est pas la seule de son espèce.
- Pour en obtenir une autre il suffit de remplacer l'étape où la surface du trapèze d'un sous-intervalle est comparé avec celle des deux trapèzes qui correspondent au sous-intervalle découpé en deux par deux calculs sur le sous-intervalle avec l'approximation de Gauss-Legendre mais avec deux P différents.
- Et c'est la différence entre les valeurs obtenues qui détermine s'il est ou non nécessaire de découper le triangle.
- Il est possible de modifier la méthode de Gauss-Legendre stricte de manière à user de tactiques pour le choix de deux P différents pour lesquels les supports se recouvrent partiellement, ce que traduit ce genre de phrase sibylline

```
 The caller may choose among 6 pairs
of Gauss-Kronrod quadrature formulae
```

Intégrale multiple

- À l'intégration d'une fonction $f : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ sur un segment de $\mathbb{R}$ correspond l'intégration sur un domaine de $\mathbb{R}^N$ d'une fonction $f : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}$

- Si le domaine est un pavé pour $X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$; $a_n \leq x_n \leq b_n$

l'intégrale multiple est « simplement »

$$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \ldots \int_{a_N}^{b_N} dx_N \, f(X)$$

et la formules de Gauss-Legendre peut être appliquée sur toutes les intégrales simultanément.

- Dans le cas contraire (typiquement un triangle dans le cas $N = 2$) c'est plus compliqué et à traiter au cas à cas comme on va le voir sur un exemple.

Intégration sur un triangle

- La fonction $\begin{array}{rccc} f & : & \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & & (x, y) & \longrightarrow & f(x, y) \end{array}$ ainsi que le triangle Δ

de sommets (x_1, y_1), (x_2, y_2) et (x_3, y_3) étant donnés, il s'agit de déterminer le volume du domaine de $\mathbb{R}^3$ défini par le triplet (x, y, z) avec

$$(x, y) \in \Delta \; ; \; 0 \leq z \leq f(x, y)$$

ce volume se note

$$\mathcal{I} = \int_{\Delta} f(x, y) \, dx \, dy$$

et c'est l'intégrale sur le triangle Δ de la fonction f.

- Pour exprimer que (x, y) parcourt Δ, on pose

$$x = x_1 + \underbrace{(x_2 - x_1)}_{=x21} u + \underbrace{(x_3 - x_1)}_{=x31} v \; ; \; y = y_1 + \underbrace{(y_2 - y_1)}_{=y21} u + \underbrace{(y_3 - y_1)}_{=y31} v$$

et alors (u, v) parcourt le triangle (de référence) Δ_0 de sommets $(0, 0)$, $(1, 0)$ et $(0, 1)$

Intégration sur un triangle

- L'intégration sur le triangle de référence Δ_0 d'une fonction
$\begin{array}{cccc} g & : & \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & & (u,u) & \longrightarrow & g(u,u) \end{array}$ s'écrit

$$\int_{\Delta_0} g(u,v)\; du\; dv = \int_0^1 du\; \int_0^{1-u} dv\; g(u,v)$$

(lorsque u passe de 0 à 1, v ne peut passer que de 0 à $1-u$) c'est une séquence de deux intégrales sur des segments de $\mathbb{R}$.

- Mais il y a le problème de l'expression du changement de variables lors du passage du triangle Δ au triangle de référence Δ_0 : par un calcul direct sur la transformation $(u,v) \longrightarrow (x,y)$, c'est $dx\; dy = (x21\; y31 - x31\; y31)\; du\; dv = \frac{S}{2}\; du\; dv$

- D'où

$$\int_{\Delta} f(x,y)\; dx\; dy = \frac{S}{2} \int_0^1 du\; \int_0^{1-u} dv \quad \begin{array}{r} f(x_1 + x21\; u + x31\; v, \\ y_1 + y21\; u + y31\; v) \end{array}$$

Intégration sur un domaine

- Il reste alors à écrire les formules de Gauss-Legendre sur les deux intégrales et on obtient une formule d'intégration sur le triangle.

- Il existe également des formules toutes faites pour le triangle (googler « Gauss-Legendre quadrature triangle ») ;

Pour un domaine qui n'a pas une forme trangulaire, il suffit alors de la trianguler, c'est à dire de le paver avec un maillage triangulaire et d'effectuer l'intégration sur chacun des triangles du maillage.

- Cette méthode se transporte pour un domaine de $\mathbb{R}^3$ les triangles devenant des tétrahèdres ; au delà on parle de simplexes mais c'est un peu plus difficile à réaliser.