L2-S3 : UE Simulations numériques

SEANCE 4

Intégrales avancées

4 octobre 2021

Calculs d'intégrales

La fonction f à intégrer est échantillonnée en un nombre restreint de points $\rightarrow$ plusieurs outils sont à notre disposition, par exemple :

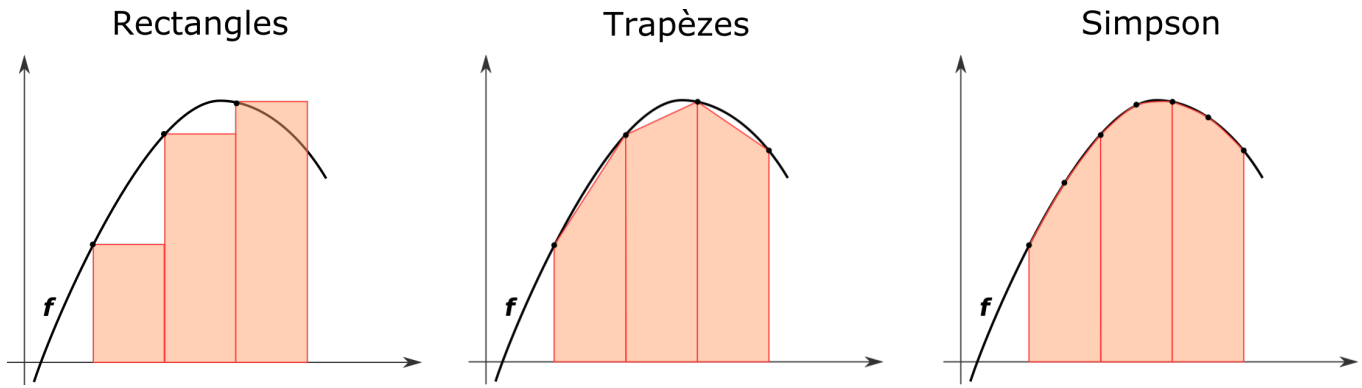
- interpolation polynomiale entre points également espacés, puis intégration $\rightarrow$ **formules de Newton - Cotes** (*simple et robuste - standard pour une fonction facile à évaluer*)
- "optimisation" des points où est évaluée la fonction $\rightarrow$ **quadrature Gaussienne** (*plus de liberté - plus difficile d'estimer l'erreur commise*)
- échantillonage aléatoire de la fonction $\rightarrow$ **calcul "Monte-Carlo"** (*particulièrement utile à N-dimensions*)

Cette séance : Formules de Gauss-legendre et méthode Monte-Carlo.

Calculs d'intégrales

Vu en L1 : $f(x)$ est échantillonnée entre a et b. On souhaite estimer $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$.

- ordre 0 : somme de Riemann
- ordre 1 : méthode des trapèzes
- ordre 2 : méthode de Simpson



Formules de Newton - Cotes

Vu en L1 : $f(x)$ est échantillonnée entre a et b. On souhaite estimer $\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$.

- ordre 0 : somme de Riemann avec n points (valeurs à gauche), $h = (b-a)/n$ et $x_i = a + (i+1) \times h$:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{i=0}^{n-1} hf(x_i) + O\left(\frac{(b-a)^2 f'}{n}\right)$$

- ordre 1 : méthode des trapèzes avec $n+1$ points, avec $f_i = f(x_i)$:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = h \times \left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \ldots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2}\right) + O\left(\frac{(b-a)^3 f''}{n^2}\right)$$

- ordre 2 : méthode de Simpson avec un nombre impair de points :

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = h \times \left(\frac{1}{3}f_0 + \frac{4}{3}f_1 + \frac{2}{3}f_2 + \ldots + \frac{4}{3}f_{n-1} + \frac{1}{3}f_n\right) + O\left(\frac{(b-a)^5 f^{(4)}}{n^4}\right)$$

Méthode des rectangles

La fonction ci-dessous renvoie l'intégrale de $\int_0^1 3x^2 \mathrm{d}x = 1$ par la méthode des rectangles (à gauche), ainsi que l'écart relatif à la valeur exacte :

In [1]:
```
import numpy as np

def rect(a,b,N):
    x=np.linspace(a,b,N)
    h=x[1]-x[0]
    y=3*x*x
    return np.sum(y[:-1])*h
a=0
b=1
I=1
print(rect(a,b,101),abs(rect(a,b,101)-I)/I)
print(rect(a,b,1001),abs(rect(a,b,1001)-I)/I)
```

Out[1]:
```
0.9850499999999999 0.014950000000000013
0.998500500000001 0.0014999499999999876
```

Lorsqu'on multiplie le nombre de rectangles par 10, h et l'écart sont divisés par 10 : la méthode des rectangles a une convergence en $1/N$.

Méthode des trapèzes

La fonction ci-dessous renvoie l'intégrale de $\int_0^1 3x^2 \mathrm{d}x = 1$ par la méthode des trapèzes ainsi que l'écart relatif à la valeur exacte :

In [2]:
```
def trapz(a,b,N):
    x=np.linspace(a,b,N)
    h=x[1]-x[0]
    y=3*x*x
    I=np.sum(y)-0.5*(y[0]+y[-1])
    return I*h
a, b, I = 0, 1, 1
print(trapz(a,b,101),abs(trapz(a,b,101)-I)/I)
print(trapz(a,b,1001),abs(trapz(a,b,1001)-I)/I)
```

Out [2]:
```
1.000049999999999 4.999999999988347e-05
1.0000005 5.000000006989e-07
```

Lorsqu'on multiplie le nombre de trapèzes par 10, l'écart est divisé par 100 : la méthode des trapèzes a une convergence en $1/N^2$.
Rappel : la méthode des trapèzes est implémentée dans python via `scipy.integrate.trapz`.

Méthode de Gauss-Legendre

L'idée est de généraliser les méthodes de Newton Cotes d'ordre 0, 1, 2 ... mais pour des points espacés de manière non régulière dans l'intervalle d'intégration. De manière générale l'intégrale est calculée comme :

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i')$$

Les **poids** w_i et les **points** x_i' sont choisis de manière à ce que la méthode donne la **valeur exacte** pour les **polynômes** d'ordre $0, 1, .., 2n-1$.

Méthode de Gauss-Legendre

Exemple quadrature de Gauss à deux points : $n = 2$
On cherche w_1, x_1', w_2 et x_2' tels que :

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx w_1 f(x_1') + w_2 f(x_2') = \tilde{I}$$

Pour l'ensemble des polynômes de degré $k = 0, 1, 2, 3 = 2n - 1$ avec :

$$\int_{-1}^{1} x^k \mathrm{d}x = w_1 f(x_1') + w_2 f(x_2')$$

- pour le degré 0, $f(x) = 1$ et $\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x = 2 = w_1 + w_2$
- pour le degré 1, $f(x) = x$ et $\int_{-1}^{1} x\mathrm{d}x = 0 = w_1 x_1' + w_2 x_2'$
- pour le degré 2, $f(x) = x^2$ et $\int_{-1}^{1} x^2\mathrm{d}x = \frac{2}{3} = w_1 {x_1'}^2 + w_2 {x_2'}^2$
- pour le degré 3, $f(x) = x^3$ et $\int_{-1}^{1} x^3\mathrm{d}x = 0 = w_1 {x_1'}^3 + w_2 {x_2'}^3$

On a 4 équations avec 4 inconnues. La solution est :

$$w_1 = w_2 = 1, \quad x_1' = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad x_2' = \frac{\sqrt{3}}{3}, \quad \tilde{I} = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = I$$

Méthode de Gauss-Legendre

Ces poids et ces racines ne semblent pas sortir de nulle part.

Regardons les quatre premiers polynômes de Legendre $P_n(x)$:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$

In [3]:

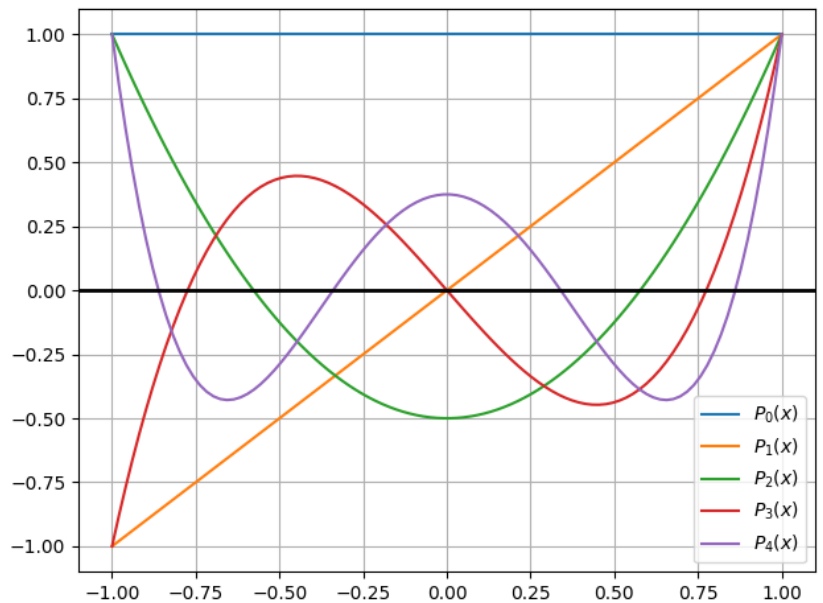
```
from scipy.special import legendre
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

x = np.linspace(-1, 1, 100)
for n in range(5):
  Pn = legendre(n)
  plt.plot(x, Pn(x), label="$P_"+str(n)+"(x)$")
plt.grid(); plt.legend()
plt.axhline(0, color="k", lw=2)
plt.show()
```

Méthode de Gauss-Legendre

Ces poids et ces racines ne semblent pas sortir de nulle part.

Regardons les quatre premiers polynômes de Legendre $P_n(x)$:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$$



Les valeurs de x_1' et x_2' trouvées dans le cas $n = 2$ correspondent aux zéros de $P_2(x)$.

Méthode de Gauss-Legendre

Généralisation $n > 2$:

L'intégrale que l'on souhaite calculer est exprimée sous forme :

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i')$$

On peut montrer que cette intégrale est exacte pour tous les polynômes de degré $2n-1$ si :

- x_i' est la i^{eme} racine du polynôme de Legendre P_n ;
- les poids sont donnés par $w_i = \dfrac{2}{(1-x_i'^2)P_n'^2(x_i')}$.

On peut aussi montrer que :

$$\forall n > 1,\ \sum_{i=1}^{n} w_i = (b-a) = 2 \text{ ici}$$

Méthode de Gauss-Legendre

Généralisation $n > 2$:

La fonction `leggauss` du module de `numpy.polynomial.legendre` permet d'obtenir les poids (array w) et les racines (array x) pour un n donné :

In [4]:
```
1 x, w = np.polynomial.legendre.leggauss(2)
2 print(x)
3 print(w)
```

Out[4]:
```
[-0.57735027  0.57735027]
[1. 1.]
```

Méthode de Gauss-Legendre

Généralisation $n > 2$:

Pour calculer une intégrale entre des bornes quelconques, la méthode est la même avec :

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{(b-a)}{2} \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i'')$$

où les poids sont les mêmes que précédemment mais par contre les racines sont :

$$x_i'' = \frac{(b-a)}{2} x_i' + \frac{(a+b)}{2}$$

Méthode de Gauss-Legendre

Généralisation $n > 2$:

La fonction ci-dessous renvoie l'intégrale de $\int_0^\pi \sin(x)\mathrm{d}x = 2$ par la méthode de Gauss-Legendre avec 10 points ainsi que l'écart relatif à la valeur exacte :

In [5]:
```
def trapz(a,b,N):
    x=np.linspace(a,b,N)
    y=np.sin(x)
    return (x[1]-x[0])*np.sum(y)-(y[0]+y[-1])/2

def intg(a,b,n):
    x, w = np.polynomial.legendre.leggauss(n)
    f = np.sin(x*(b-a)/2 + (a+b)/2)*w
    return np.sum(f)*(b-a)/2

a, b, n=0, np.pi, 10
print(intg(a,b,n), abs((intg(a,b,n)-2)/2))
print(trapz(a,b,n), abs((trapz(a,b,n)-2)/2))
```

Out [5]:
```
Gauss: 2.0000000000000004 2.220446049250313e-16
Trapz: 1.9796508112164832 0.010174594391758385
```

Fonctions de `scipy.integrate`

Un outil général d'intégration des fonctions 1D existe dans le module `scipy.integrate` : quad (pour quadrature). Il prend comme argument une fonction et ses bornes puis renvoie l'intégrale et la précision absolue sur cette intégrale.

In [6]:
```
from scipy.integrate import quad

a=0
b=np.pi
f=lambda x: np.sin(x)
print(quad(f,a,b))
```

Out[6]:
```
(2.0, 2.220446049250313e-14)
```

Fonctions de `scipy.integrate`

Un outil général d'intégration des fonctions 2D existe dans le module `scipy.integrate` : `dblquad` (pour double quadrature). Voici sa définition :

```
def dblquad(func, a, b, gfun, hfun):
    """
    Compute a double integral.
    Return the double (definite) integral of ``func(y, x)``
     from ``x = a..b`` and ``y = gfun(x)..hfun(x)``.
    """
    ...
```

Elle permet de calculer des intégrales du type :

$$\int_a^b \mathrm{d}x \left(\int_{g(x)}^{h(x)} \mathrm{d}y \; f(y,x) \right) = \int_a^b \int_{g(x)}^{h(x)} \mathrm{d}x\mathrm{d}y \; f(y,x),$$

où les bornes du domaine suivant y peuvent dépendre de x. Attention le premier argument de f doit être y, puis x.

Fonctions de `scipy.integrate`

Exemple avec :

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}x \int_0^{2x} \mathrm{d}y \sin(xy)$$

In [7]:

```
from scipy.integrate import dblquad
import numpy as np

#bornes suivant x
ax, bx = 0, np.pi

#bornes suivant y
h = lambda x : 0
g = lambda x : 2*x

ff = lambda y, x: np.sin(x*y)
print(dblquad(ff, ax, bx, h, g))
```

Out[7]:

```
(1.7611276682757178, 5.967868259385284e-09)
```

Intégration par la méthode de Monte-Carlo

Il s'agit d'évaluer numériquement la valeur de l'intégrale d'une fonction f définie dans un espace $\mathbb{R}^d$

$$I = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

La vitesse de convergence est un indicateur de l'efficacité de la méthode utilisée pour évaluer l'intégrale.

- Méthode des trapèzes : $n^{-2/d}$
- Méthode de Simpson : $n^{-4/d}$

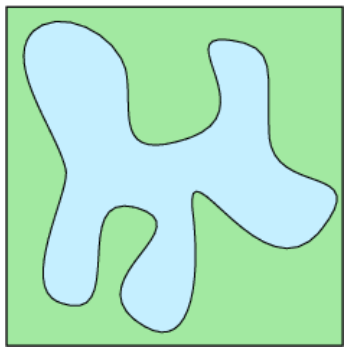
Pour ces méthodes la vitesse de convergence diminue quand d augmente. Ces algorithmes évaluent l'intégrande sur une grille régulière dans $\mathbb{R}^d$.

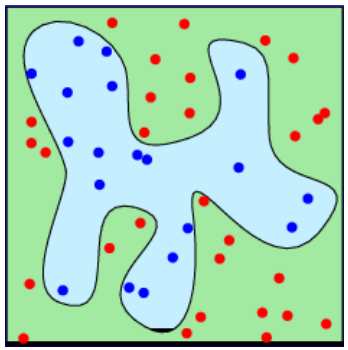
Intégration par la méthode de Monte-Carlo

Méthode vue en L1 : calcul de l'aire d'une surface

- Il s'agit de trouver *manu militari* la valeur de la surface S_L d'un lac à l'intérieur d'un terrain de surface connue S_T.
- On tire N boulets de canon sur le terrain d'une façon aléatoire et homogène et on compte le nombre de boulets M qui sont tombés dans le lac.
- Pour un nombre N très grand on peut estimer la surface du lac comme :

$$S_L = \frac{M}{N} S_T$$





Rappelez-vous, comment calculer π par cette méthode ?

Intégration par la méthode de Monte-Carlo

Nouvel algorithme : méthode de la moyenne.

Dans la méthode Monte-Carlo, les N points $\mathbf{x}_i$ sont répartis aléatoirement dans le domaine d'intégration Ω :

$$x_i \textbf{ est une variable aléatoire et } \mathbf{x_1} \cdots \mathbf{x_N} \in \Omega$$

On définit une fonction densité de probabilité $p(\mathbf{x_i})$ qui donne la probabilité que la variable aléatoire $\mathbf{x_i}$ prenne une valeur comprise entre $\mathbf{x_i}$ et $\mathbf{x_i} + d\mathbf{x}$ de sorte que $\int_\Omega p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$

Or la moyenne d'une fonction continue $f(\mathbf{x})$ où $\mathbf{x}$ est une variable aléatoire suivant la densité de probabilité $p(\mathbf{x})$ est

$$\langle f \rangle_{\mathbf{x}} = \int_\Omega f(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \frac{\sum_{i=1}^{N} p(\mathbf{x_i}) f(\mathbf{x_i})}{\sum_{i=1}^{N} p(\mathbf{x_i})}$$

Intégration par la méthode de Monte-Carlo

Le volume du domaine d'intégration est :

$$V = \int_{\Omega} d\mathbf{x}$$

Une densité de probabilité uniforme correspond à une fonction $p(\mathbf{x_i}) = 1/V$, alors :

$$\langle f \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{N} p(\mathbf{x_i}) f(\mathbf{x_i})}{\sum_{i=1}^{N} p(\mathbf{x_i})} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\mathbf{x_i})$$

Avec $p(\mathbf{x})$ une densité de probabilité uniforme, l'intégrale de la fonction f sur le domaine Ω peut alors être exprimée par :

$$I = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = V \times \langle f \rangle \approx \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\mathbf{x_i}) \xrightarrow[N \to \infty]{} I$$

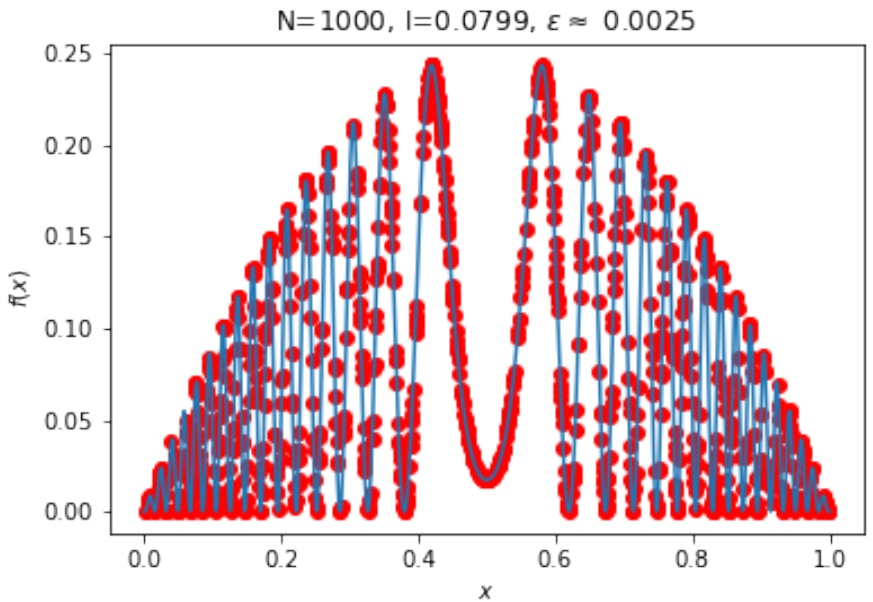
L'erreur commise sur I évolue donc en $1/\sqrt{N}$ d'après le théorème central limite, **quelque soit la dimension d du problème**.

Intégration par la méthode de Monte-Carlo

On applique directement la formule. Exemple ci-dessous pour :

$$f(x) = x(1-x)\sin^2\left(200x(1-x)\right), \qquad \int_0^1 f(x)dx \approx 0.080498$$

```python
# charge les librairies
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.integrate import quad

# fonction a integrer
def f(x):
    return x*(1-x)*np.sin((200*x*(1-x)))**2

# integrale
N = 1000
points = np.random.uniform(0,1,size=N)
I = np.sum(f(points)) / N
print("N =",N,": I =",I)
print("Scipy:", quad(f,0,1))

# graphique
xx  = np.linspace(0, 1, 1000)
fig = plt.figure(figsize=(6,4))
plt.plot(xx, f(xx))
plt.scatter(points,f(points),c="red")
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$f(x)$')
plt.title(f'N={N}, I={I:.4f}, $\epsilon \\
      approx$ {I/np.sqrt(N):.4f}')
plt.show()
```

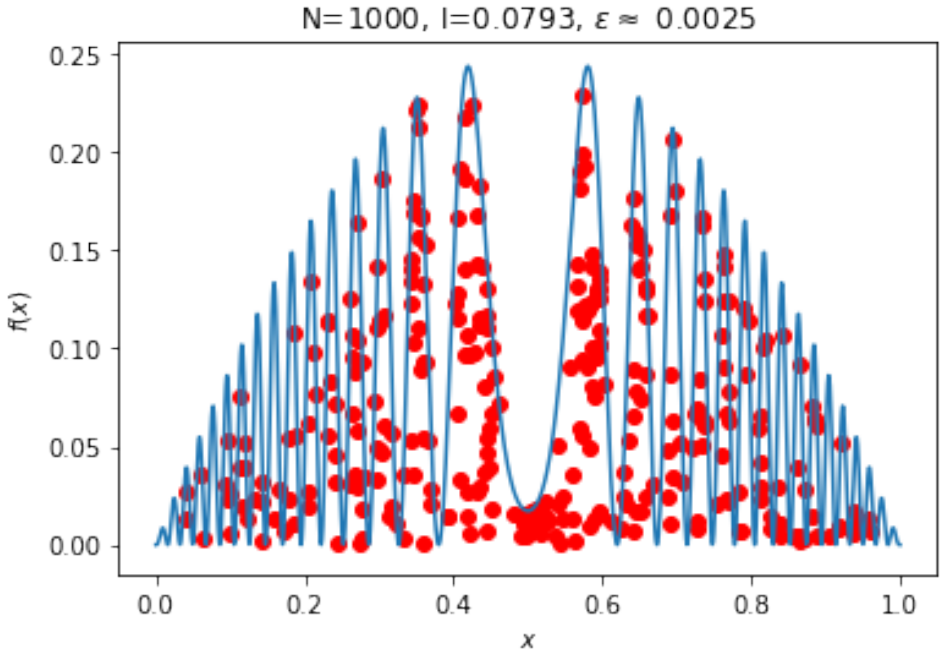


Intégration par la méthode de Monte-Carlo

Retour sur la méthode du jet de pierre vue en L1 : on rajoute une dimension au problème et on calcule l'intégrale de la fonction $g(x, y)$:

$$g(x,y) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad y \leqslant f(x) \\ 0 & \text{si} \quad y > f(x) \end{cases}$$

```python
# charge les librairies
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.integrate import quad

# fonction a integrer
def g(x,y):
    return y < f(x)

# integrale
N = 1000
xmax = 1
ymax = 0.25
x = np.random.uniform(0,xmax,size=N)
y = np.random.uniform(0,ymax,size=N)
res = g(x,y)
I = xmax * ymax * np.sum(res) / N
print("N =",N,": I =",I)
print("Scipy:", quad(f,0,1))

# graphique
xx  = np.linspace(0, 1, 1000)
fig = plt.figure(figsize=(6,4))
plt.plot(xx, f(xx))
plt.scatter(x[res],y[res],c="red")
plt.xlabel('$x$')
plt.ylabel('$f(x)$')
plt.title(f'N={N}, I={I:.4f}, $\epsilon \\
      approx$ {I/np.sqrt(N):.4f}')
plt.show()
```



Intégration par la méthode de Monte-Carlo

A retenir :

- La vitesse de convergence est proportionnelle à $n^{-1/2}$ indépendamment de la dimension du problème.
- La méthode Monte Carlo est ainsi particulièrement utile pour les intégrales à plusieurs dimensions.
- La densité de probabilité uniforme est souvent utilisée mais des lois de probabilité différentes, plus efficaces, peuvent être choisies (voir les notions de Importance Sampling).

À vos TPs !

1. Ouvrir un terminal :
   - soit sur https ://jupyterhub.ijclab.in2p3.fr
   - soit sur un ordinateur du 336
2. Télécharger la séance d'aujourd'hui :

```
methnum fetch L2/Seance4 TONGROUPE
```

   en remplaçant TONGROUPE par ton numéro de groupe.
3. Sur un ordinateur du bâtiment 336 uniquement, lancer le jupyter :

```
methnum jupyter notebook
```

4. Pour soumettre la séance, dans le terminal taper :

```
methnum submit L2/Seance4 TONGROUPE
```

À vos TPs !

Le cours est disponible en ligne ici :
`https://methnum.gitlab.dsi.universite-paris-saclay.fr/L2/`.

Rappel : votre gitlab personnel sert de sauvegarde pour passer vos documents d'une plateforme à l'autre via les commandes methnum/fetch.