Méthodes d'intégrations
Approches déterministes
Quadratures

INSTITUT d'OPTIQUE GRADUATE SCHOOL ParisTech

Approches déterministes
Quadratures

Qu'est ce qu'intégrer

Intégration

Mesurer l'aire sous une courbe.

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

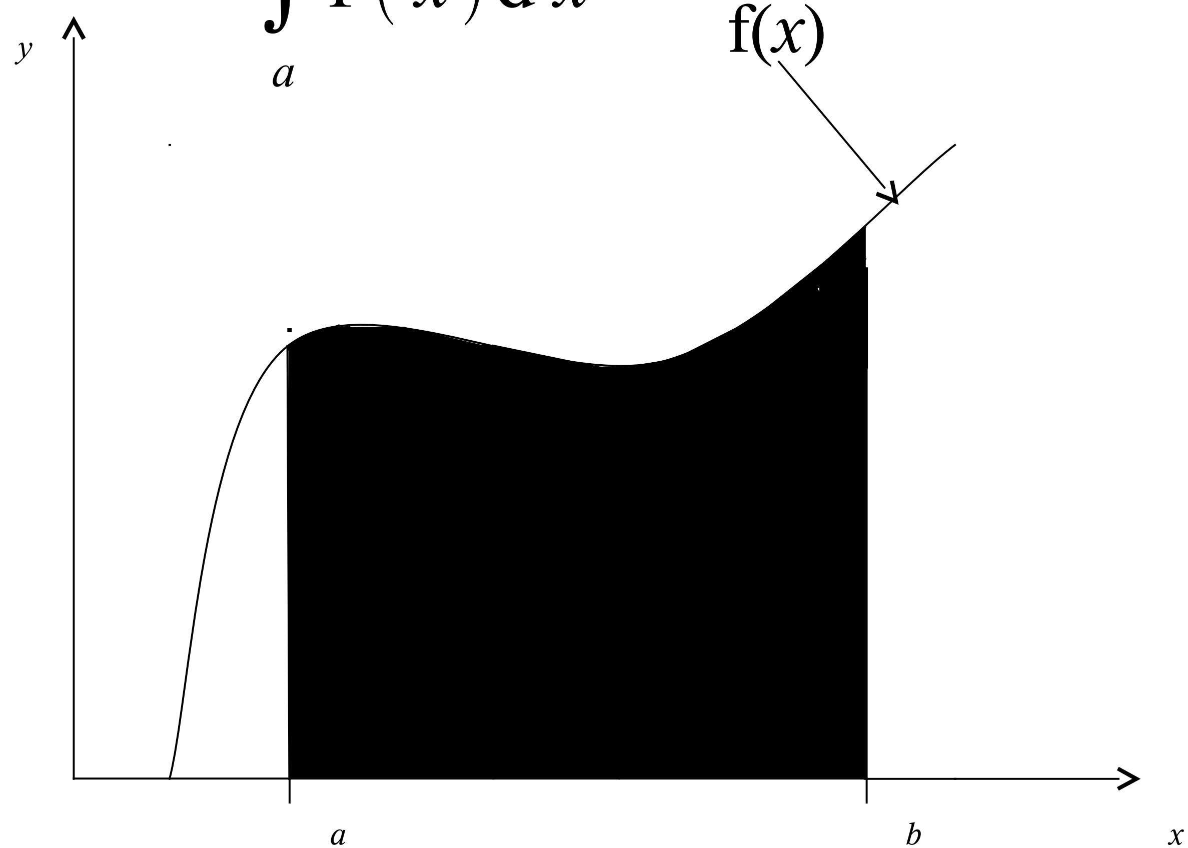
Définitions :

f(x) est l'intégrande

a = borne inférieure

b = borne supérieure

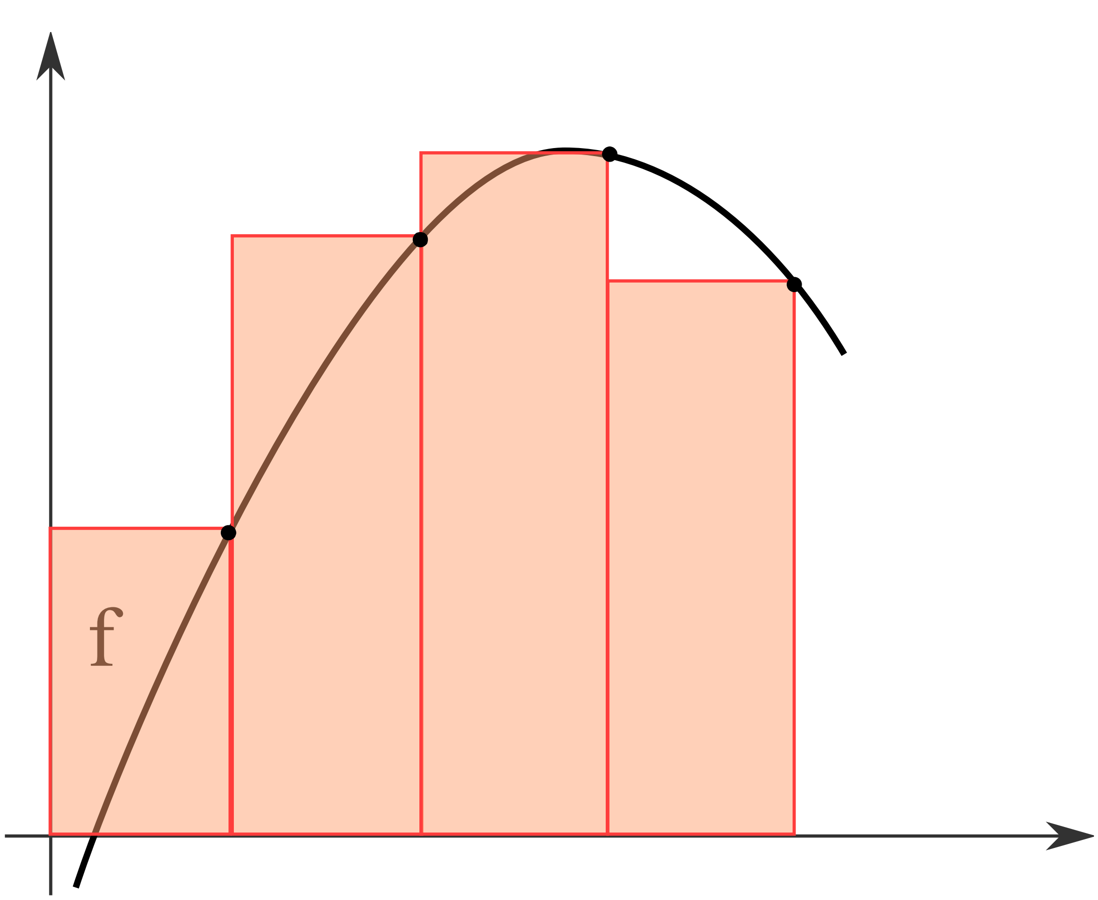
$$\int_a^b f(x)\,dx$$



Intégrale au sens de Riemann

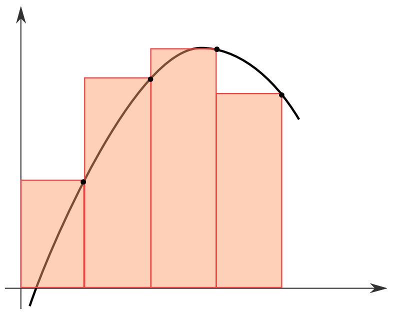
$$I_n = \sum_{k=1}^{n} \mathrm{f}\left(x_k\right)\left(x_k - x_{k-1}\right)$$

$$\lim_{n \to \infty} I_n = \int_{x_0}^{x_n} \mathrm{f}\left(x\right) = I$$



Intégration numérique 1D - Rectangles

- Méthode des rectangles



  - A droite

$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathrm{f}\left(x_k\right)$$

  - A gauche

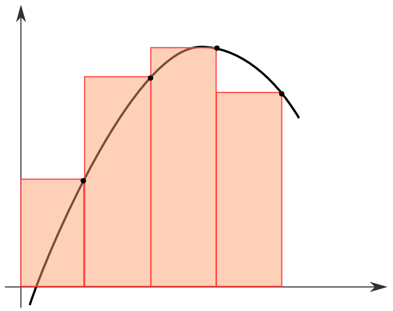
$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathrm{f}\left(x_{k-1}\right)$$

- Convergence
  - Si f est C^0 : $O\left(n^{-1}\right)$

Intégration numérique 1D – Points du milieu

- Méthode des points du milieu

$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^{n} f\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{2}\right)$$



- Convergence
  - Si f est C^0 : O (n^{-1})
  - Si f est au moins C^2 : O (n^{-2})

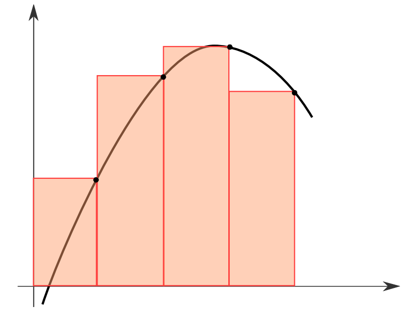
Intégration numérique 1D

- Intervalles uniformes

Convergence

- Méthode des rectangles

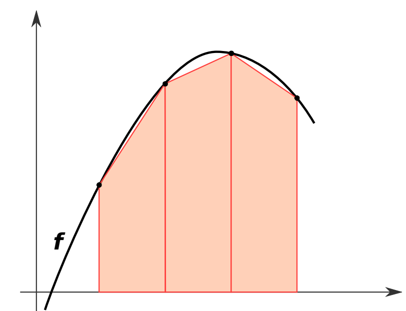
$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathrm{f}\left(x_k\right)$$



$O(n^{-1})$

- Méthode des trapèzes

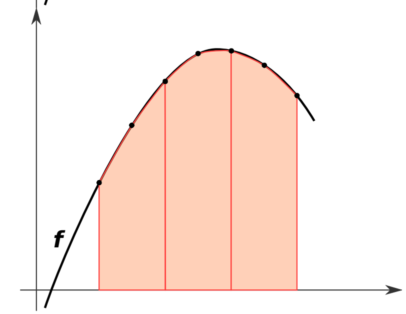
$$I_n = \frac{b-a}{2\mathrm{n}} \sum_{k=1}^{n} \left(\mathrm{f}\left(x_{k-1}\right) + \mathrm{f}\left(x_k\right)\right)$$



$O(n^{-2})$

- Formule de Simpson

$$I_n = \frac{b-a}{6\mathrm{n}} \sum_{k=1}^{n} \left(\mathrm{f}\left(x_{k-1}\right) + 4\,\mathrm{f}\left(x_{k-1/2}\right) + \mathrm{f}\left(x_k\right)\right)$$



$O(n^{-4})$

Quadrature de Gauss en 1D

$$\boxed{I = \int_{-1}^{1} \mathrm{f}(x)\,\mathrm{d}x \simeq \sum_{m=1}^{M} W_m\, \mathrm{f}(\varepsilon_m)}$$

Poids Positions d'intégration

- Les poids et les positions **maximisent la précision**
  - M positions pour l'espace des polynômes de degré 2M-1
  - Le calcul des intégrales est exact sur cet espace

$$\forall\, \mathrm{p} \in P_{2M-1},\ \int_{-1}^{1} \mathrm{p}(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{m=1}^{M} W_m\, \mathrm{p}(\varepsilon_m)$$

  - Les positions sont les racines du polynôme de Legendre
    - Base de polynômes orthogonale sur [-1,1]

$$P_M(x) = \frac{1}{2^M M!} \frac{\mathrm{d}^M}{\mathrm{d}x^M} \left(\left(x^2 - 1 \right)^M \right)$$

1D - M = 1

$$I = \int_{-1}^{1} \mathrm{f}(x)\,\mathrm{d}x = w_1\,\mathrm{f}(x_1)$$

Pour les polynômes de degré au plus 1

Pour $\mathrm{f}(x) = 1$ $\Rightarrow w_1 = 2$

Pour $\mathrm{f}(x) = x$ $\Rightarrow x_1 = 0$

1D - M = 2

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

Pour les polynômes de degré au plus 3

Calcul des positions, racine de

$$\frac{d^2}{d\varepsilon^2}\left(\left(\varepsilon^2-1\right)^2\right)=0=4\left(3\varepsilon^2-1\right)$$

$$\varepsilon_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3},\ \varepsilon_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

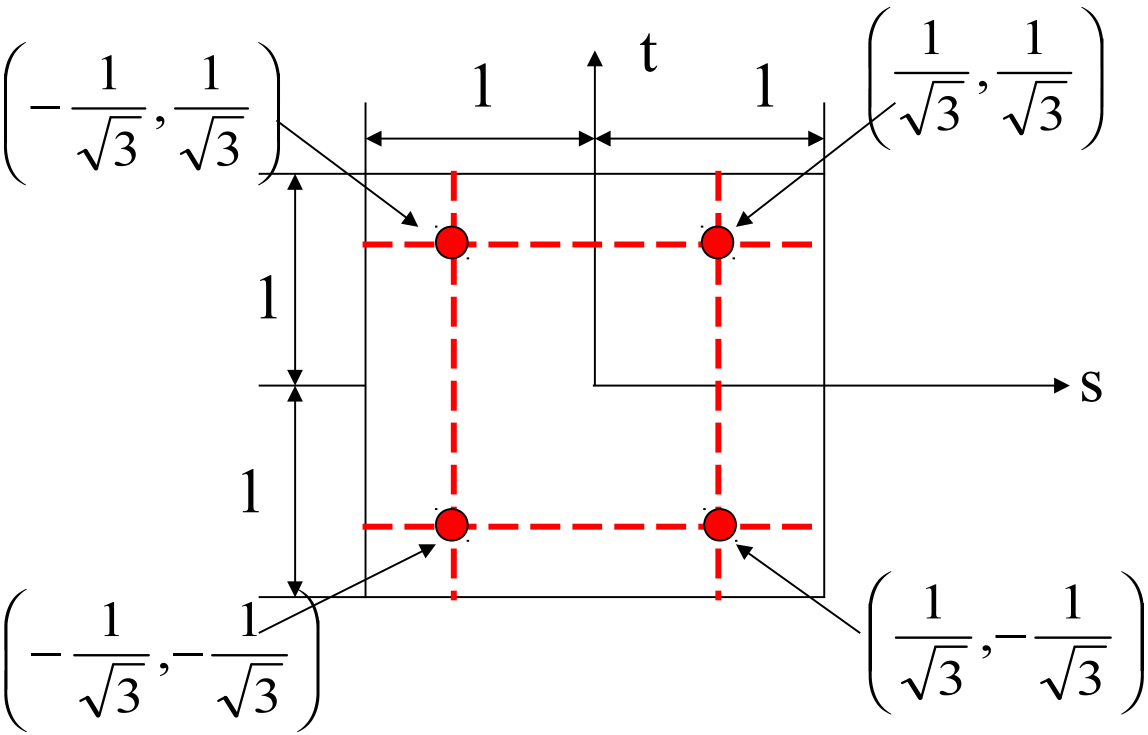
Calcul des poids

Pour $f(x) = 1$ $\Rightarrow w_1 + w_2 = 2$

Pour $f(x) = x$ $\Rightarrow -w_1 + w_2 = 0$

$$w_1 = w_2 = 1$$

2D – M = 2



$$I=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\mathrm{f}(s,t)\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}t$$

$$I\approx\int_{-1}^{1}\left(\sum_{j=1}^{M}W_j f(s,t_j)\right)ds$$

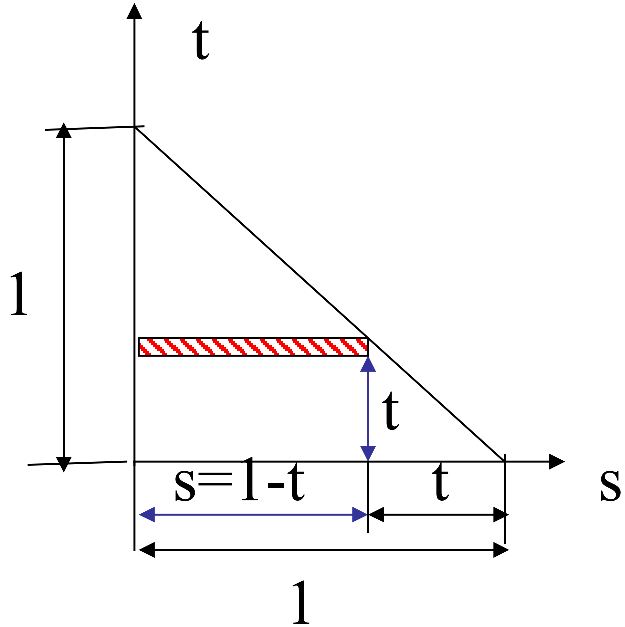
En utilisant la forme 1D pour *t*

$$\approx\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}W_i W_j f(s_i,t_j)$$

En utilisant la forme 1D pour *s*

Quadrature de Gauss 2D : domaine triangulaire

Intégrale sur le domaine de référence



$$I = \int_{t=0}^{1} \int_{s=0}^{1-t} \mathrm{f}(s,t)\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}t$$

$$\approx \sum_{n=1}^{N} W_n \mathrm{f}(s_n, t_n)$$

Contraintes sur les poids – fonction constante

Si $\mathrm{f}(s,t)=1$

$$I=\int_{t=0}^{1}\int_{s=0}^{1-t}\mathrm{f}(s,t)\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}t=\frac{1}{2}$$

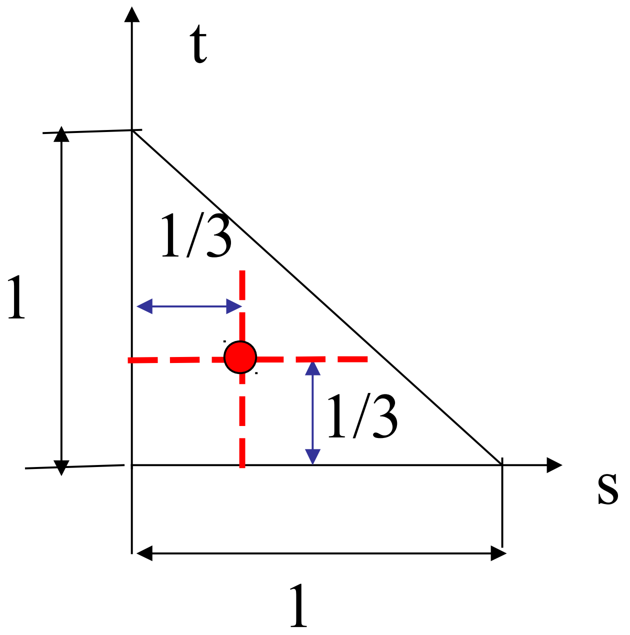
$$=\sum_n W_n$$

$$\therefore\sum_n W_n=\frac{1}{2}$$

Quadrature de Gauss sur un triangle : M = 1

$$f(s,t) \sim \quad 1$$

$$s \quad t$$



$$\boxed{I \approx \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)}$$

Démonstration

Les polynômes de degré 1 s'écrivent

$$f(s,t)=\alpha s+\beta t$$

En intégrant, on obtient

$$\int_{t=0}^{1}\int_{s=0}^{1-t} f(s,t)\ \mathrm{dsdt}=\frac{1}{2}\alpha_1+\frac{1}{3!}\alpha_2+\frac{1}{3!}\alpha_3$$

D'où la contrainte

$$\int_{t=0}^{1}\int_{s=0}^{1-t} f(s,t)\,ds\,dt=W_1 f(s_1,t_1)$$

$$\therefore \frac{1}{3!}\alpha+\frac{1}{3!}\beta=W_1(\alpha s_1+\beta t_1)$$

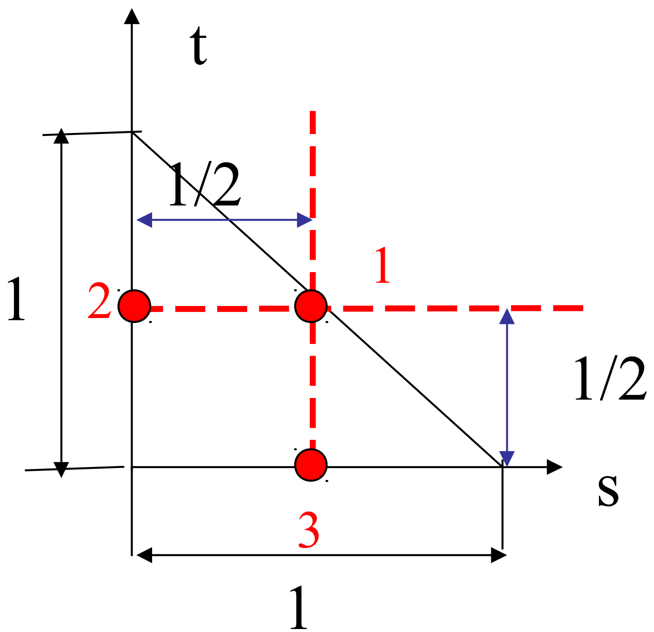
Ainsi

$$W_1=\frac{1}{2};\ W_1 s_1=\frac{1}{3!};\ W_1 t_1=\frac{1}{3!}$$

Quadrature de Gauss sur un triangle : M = 3

Solution exacte pour tous les polynômes de degré au plus 2

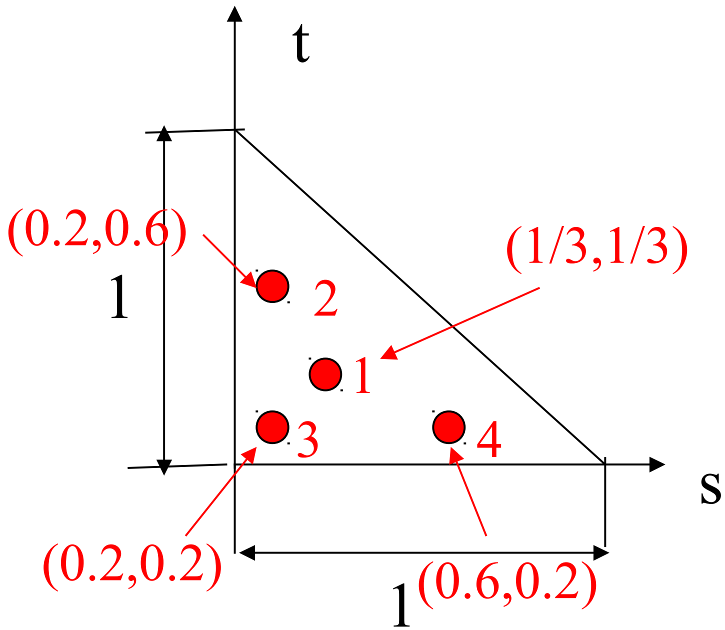
$$f(s,t) = \begin{array}{ccc} & 1 & \\ s & & t \\ s^2 & st & t^2 \end{array}$$



$$\boxed{I \approx \frac{1}{6} f\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6} f\left(\frac{1}{2}, 0\right) + \frac{1}{6} f\left(0, \frac{1}{2}\right)}$$

Quadrature de Gauss sur un triangle : M = 4

Solution exacte pour tous les polynômes de degré au plus 3



$$f(s,t) = \begin{array}{c} 1 \\ s \quad t \\ s^2 \quad st \quad t^2 \\ s^3 \quad s^2t \quad st^2 \quad t^3 \end{array}$$

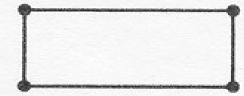
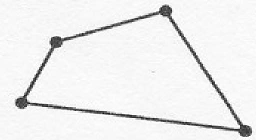
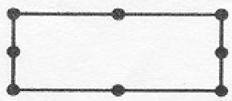
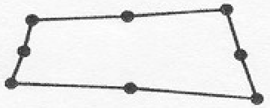
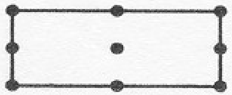
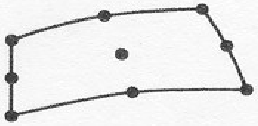
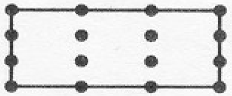
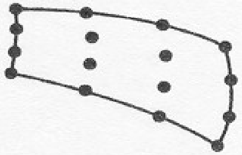
$$\boxed{I \approx -\frac{27}{96} f\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right) + \frac{25}{96} f(0.2,0.6) + \frac{25}{96} f(0.2,0.2) + \frac{25}{96} f(0.6,0.2)}$$

<u>Recommended order of integration</u>

“Finite Element Procedures”

by K. –J. Bathe

TABLE 5.9 *Recommended full Gauss numerical integration orders for the evaluation of isoparametric displacement-based element matrices (use of Table 5.7)*

Two-dimensional elements (plane stress, plane strain and axisymmetric conditions)		Integration order
4-node		2×2
4-node distorted		2×2
8-node		3×3
8-node distorted		3×3
9-node		3×3
9-node distorted		3×3
16-node		4×4
16-node distorted		4×4

INSTITUT d'OPTIQUE GRADUATE SCHOOL ParisTech

Convergence et dimension

- En 1D
  - Convergence en $O(n^{-(c+1)})$
  - c = continuité de la fonction

- En dimension plus élevée d
  - Pour n valeurs / mailles
  - Taille intervalle 1D $n^{1/d}$
  - Convergence en $O(n^{-(c+1)/d})$

Méthodes d'intégrations
Approches stochastiques

Méthode / algorithme probabiliste

- Principe : introduire de l'**aléatoire**
  - Choix de solutions aléatoires, et garder la meilleure
  - Mélanger les données
  - Choisir des valeurs aléatoires

- Pour l'intégration : intégration de **Monte Carlo**

Probabilité en espace continue : 1D

- **Échantillons** aléatoires $\{X_i\}$
- **Densité de probabilité** (PDF)

$$\mathrm{pdf}(x) \geq 0$$

  - Probabilité associée

$$\mathrm{P}\left[X_i \in [x, x+dx]\right] = \mathrm{pdf}(x)\,\mathrm{d}x$$

  - Probabilité totale

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{pdf}(x)\,\mathrm{d}x = 1$$

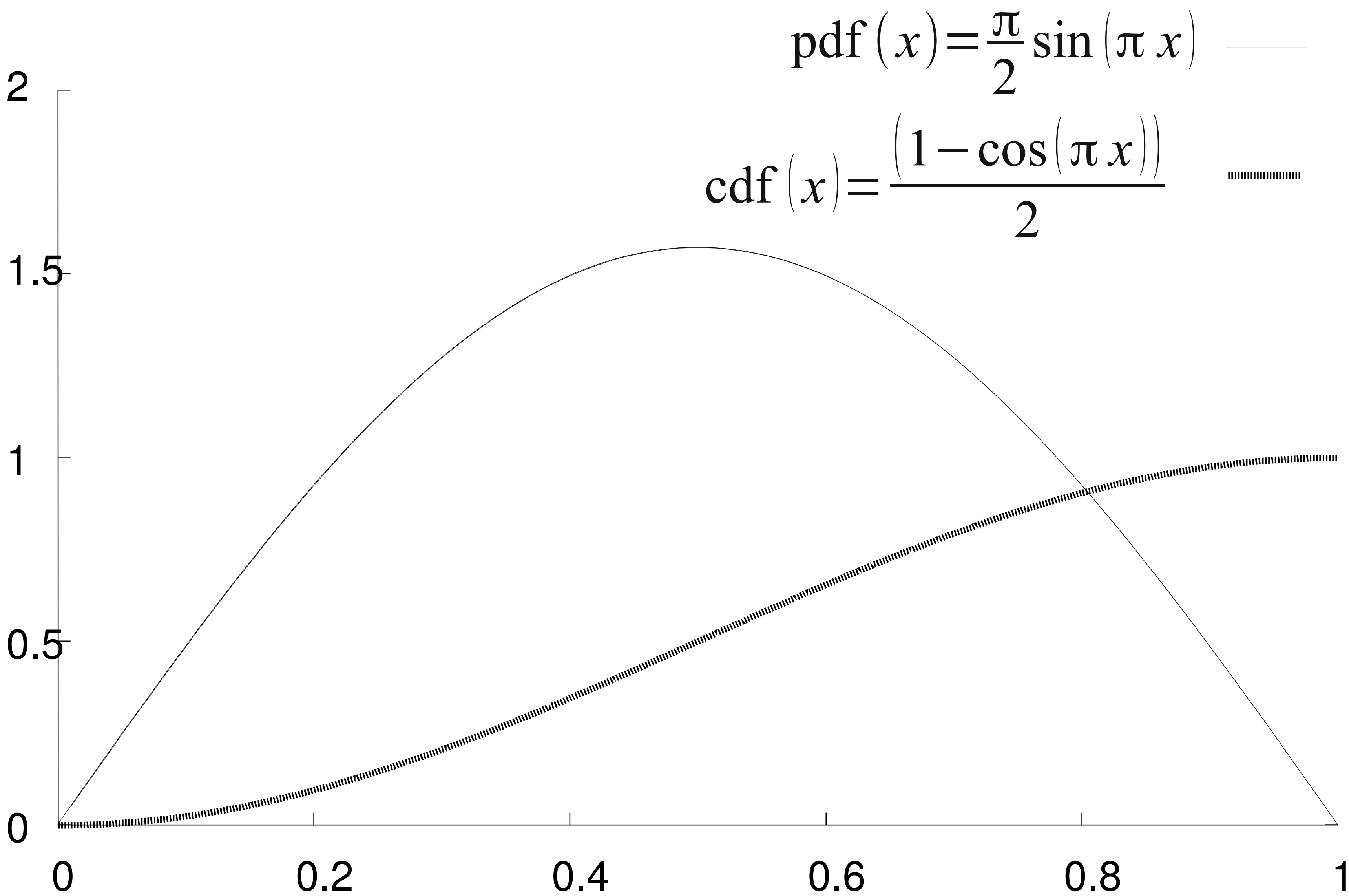
Probabilité en espace continue : 1D

- **Fonction cumulative** (CDF)

$$\mathrm{cdf}\left(a\right)=\mathrm{P}\left(X\in\left[-\infty\,,a\right]\right)=\int_{-\infty}^{a}\mathrm{pdf}\left(x\right)\mathrm{d}\,x$$

$$\mathrm{P}\left[\mathrm{X_i}\in\left[\mathrm{a}\,,\mathrm{b}\right]\right]=\mathrm{cdf}\left(\mathrm{b}\right)-\mathrm{cdf}\left(\mathrm{a}\right)$$

CDF vs PDF



INSTITUT d'OPTIQUE GRADUATE SCHOOL ParisTech

Intégrale de Lebesgue

- Plus générique que Riemann
  - Notion de mesure de l'espace $\mu() \geq 0$

$$I = \int f(x)\mu(dx)$$

Espérance – Variance – Écart-type

- **Espérance** : valeur moyenne

$$\mathrm{E}\left[\mathrm{g}(X)\right]=\int \mathrm{g}(x)\,\mathrm{pdf}(x)\,\mathrm{d}x$$

- **Variance** : distance au carré à la moyenne

$$\mathrm{V}\left[\mathrm{g}(X)\right]=\int \left(\mathrm{g}(x)-\mathrm{E}\left[\mathrm{g}(X)\right]\right)^2\mathrm{pdf}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\mathrm{V}\left[\mathrm{g}(X)\right]=\mathrm{E}\left[\mathrm{g}^2(X)\right]-\mathrm{E}^2\left[\mathrm{g}(X)\right]$$

- **Écart-type** : distance à la moyenne

$$\sigma\left[\mathrm{g}(X)\right]=\sqrt{\mathrm{V}\left[\mathrm{g}(X)\right]}$$

Méthode de Monte Carlo

- **Estimateur**

$$I_n = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, \mathrm{f}\left(x_i\right)$$

$$I_n = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} \frac{1}{\mathrm{pdf}\left(X_i\right)} \mathrm{f}\left(X_i\right)$$

- **Biais**
  - Différence valeur attendue vs cherchée

$$\mathrm{biais} = \mathrm{E}\left[I_n\right] - I$$

  - Estimateur sans biais

$$\mathrm{biais} = 0$$

Convergence

- **Variance**

$$V[I_n]=E[I_n^2]-E[I_n]^2=\frac{1}{n}V[I_1]$$

- **Convergence**

$$\sigma[I_n]=\frac{1}{\sqrt{n}}\sigma[I_1]$$

- Meilleur choix de la PDF

$$\mathrm{pdf}(x)=\frac{1}{I}f(x)\Rightarrow V[I_n]=0$$

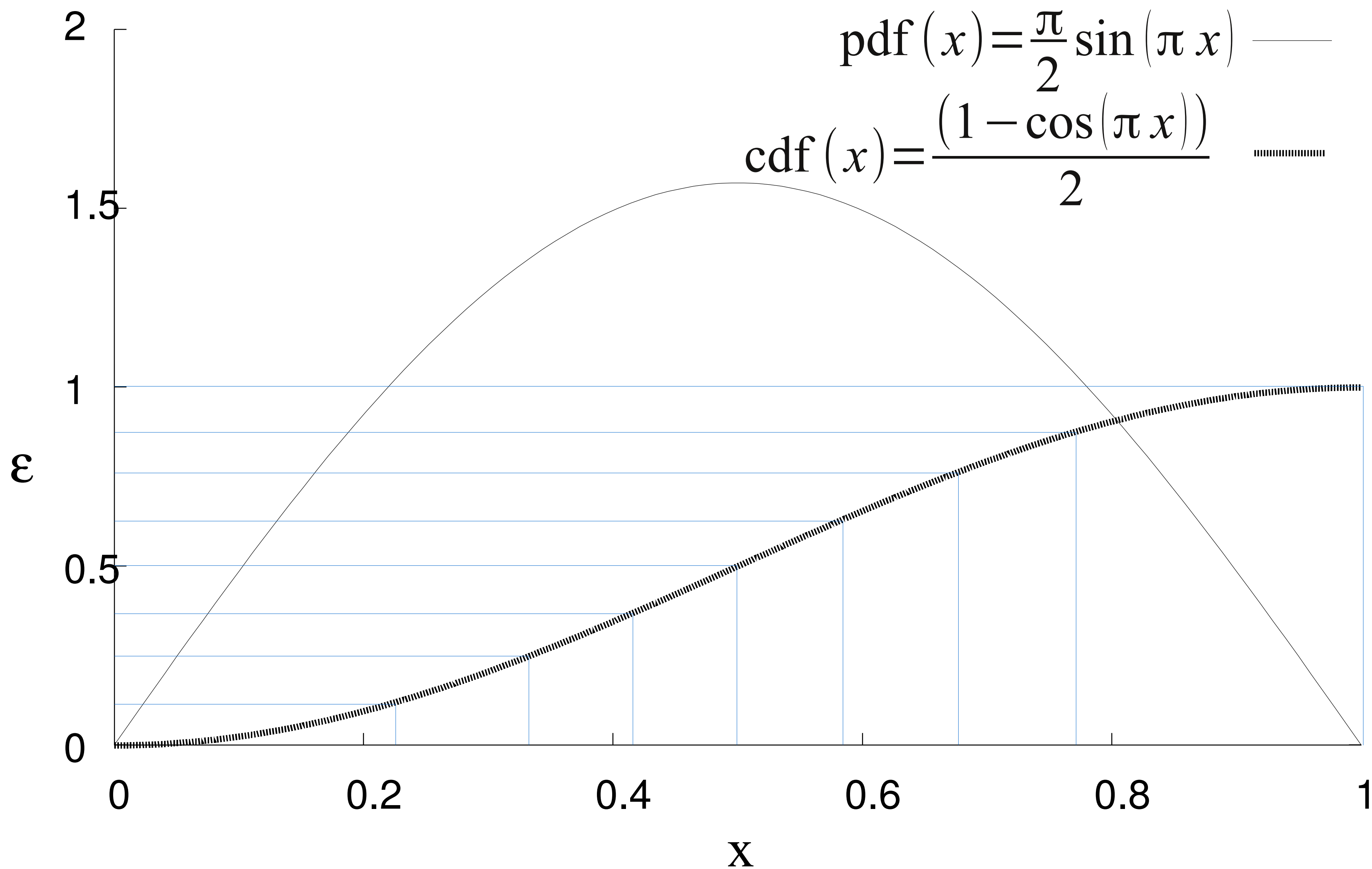
Choix de la PDF / Importance Sampling

- Algorithme d'échantillonnage
  - En fonction d'une PDF
    - ε_i = nombre aléatoire uniforme (drand48(), …)
    - $x_i \leftarrow \mathrm{cdf}^{-1}(\varepsilon_i)$
- Choix de la PDF
  - Rappel, l'idéal

$$\mathrm{pdf}(x) = \frac{1}{\int f(x)\,dx} f(x)$$

  - Approximation par une fonction proche
    - Doit être intégrable
    - L'intégrale doit être inversible

Importance Sampling



Choix de la PDF / Importance Sampling

- Algorithme d'échantillonnage
- Choix de la PDF
  - Version tabulée
    - Échantillonnage de la fonction à intégrer
    - PDF constante par morceau
    - CDF linéaire par morceau
    - Calcul de l'échantillon en O(ln (k))

Définitions xD

- $X_i = (X_{1,i}, \ldots\ldots, X_{n,i})$

- **Probabilité conditionnelle**
  - Probabilité de $X_{j,i}$ sachant que l'on connaît les autres

$$\mathrm{pdf}\left(x_j \middle| \left\{x_k, k \neq j\right\}\right) \geq 0$$

  - Propriétés (**Bayes**)

$$\mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_n\right) = \mathrm{pdf}\left(x_j \middle| \left\{x_k, k \neq j\right\}\right) \mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_n\right)$$

$$\mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots x_n\right) = \int \mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_n\right) \mathrm{d}\, x_j$$

Définitions xD

- $X_i = (X_{1,i}, \ldots\ldots, X_{n,i})$
- **Variables indépendantes**

$$\mathrm{pdf}\left(x_j \middle| \left\{x_k, k \neq j\right\}\right) = \mathrm{pdf}\left(x_j\right)$$

$$\mathrm{pdf}\left(x_{1,}.., x_n\right) = \prod_j \mathrm{pdf}\left(x_j\right)$$

Définitions xD

- $X_i = (X_{1,i}, \ldots\ldots, X_{n,i})$
- **CDF conditionnelle**

$$\mathrm{cdf}\left(a_j \middle| \left\{a_k, k \neq j\right\}\right) = \int_{-\infty}^{a_j} \mathrm{pdf}\left(x_j \middle| \left\{x_k = a_k, k \neq j\right\}\right) dx_j$$

$$\mathrm{cdf}\left(a_j \middle| \left\{a_k, k \neq j\right\}\right) = \frac{\int_{-\infty}^{a_j} \mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_n\right) dx_j}{\mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_{j-1}, x_{j+1}, \ldots, x_n\right)}$$

$$\mathrm{cdf}\left(a_j \middle| \left\{a_k, k \neq j\right\}\right) = \frac{\int_{-\infty}^{a_j} \mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_n\right) dx_j}{\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{pdf}\left(x_1, \ldots, x_n\right) dx_j}$$

Importance Sampling xD

- Exemple en 2D: (X,Y)
- Données
  - CDF(X)
  - CDF(Y|X)
- Algorithme
  - e1 et e2 : valeurs aléatoires
  - X tel que e1 = CDF(X)
  - Y tel que e2 = CDF(Y|X)

Convergence et dimension

- En 1D
  - Convergence en $O(n^{-(c+1)})$
  - c = continuité de la fonction

- En dimension plus élevée d
  - Pour n valeurs / mailles
  - Taille intervalle 1D $n^{1/d}$
  - Convergence en $O(n^{-c/d})$
  - **Monte Carlo en $O(n^{-1/2})$**