1. Scipy et l'intégration numérique

Évidemment Scipy contient tout ce qu'il faut ! L'extension `scipy.integrate` propose pour une fonction
- intégrale simple `quad`
- intégrale double `dblquad`, triple `tplquad`
- quadrature de Gauss `fixed_quad` (on fixe l'ordre de la méthode), `quadrature` (on fixe ordre et tolérance)
- `romberg` méthode de Romberg (voir plus loin).

Si on dispose d'un échantillon d'une fonction, c'est à dire la discrétisation $(x_i)_{0\le i\le n}$ et $(y_i = f(x_i))_{0\le i\le n}$ alors on dispose aussi
- `trapz(y,x)` méthode des trapèzes
- `cumptrapz(y,x)` version cumulative ? (à explorer)
- `simps(y,x)` méthode de Simpson
- `romb(y,x)` méthode de Romberg avec `x` et `y` de taille spécifique 2^k+1

2. Méthodes usuelles d'intégration numérique

Dans la suite f sera une fonction définie de $[a,b]$ dans $\mathbb{R}$ et suffisamment régulière. Pour $N \ge 1$, on pose $h = \frac{b-a}{N}$ le pas de discrétisation de l'intervalle $[a,b]$ et pour $i = 0 \dots N$, $x_i = a + i * h$.

Exercice 1. Trapèzes

Écrire un algorithme amélioré pour la méthode des trapèzes. Compter le nombre d'opérations (+, - et *, /). Rappel :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)\,dt \simeq \frac{h}{2}\Big(f(x_i) + f(x_{i+1})\Big).$$

Exercice 2. Simpson

(a) Écrire un algorithme direct pour la méthode de Simpson. Compter le nombre d'opérations. Rappel :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)\,dt \simeq \frac{h}{6}\Big(f(x_i) + 4 * f\Big(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\Big) + f(x_{i+1})\Big).$$

(b) Ecrire un algorithme amélioré. Compter le nombre d'opérations.

Exercice 3. Python

(a) Écrire deux routines `trap(f,a,b,n)` et `simpson(f,a,b,n)`.

(b) Essayer de «vectoriser» vos routines pour améliorer les performances. En effet Numpy et Scipy permettent l'appel `cos(x)` où `x` est un «array» et qui renvoie un array tandis que `np.sum(y)` renvoie la somme des éléments de `y`.

(c) Tester vos routines sur des exemples d'intégrales dont vous pouvez calculer la valeur.

(d) Soit $I(f) = \int_0^1 20(1-x^2)^3 dx$. Le but est de comparer les deux méthodes composites et de vérifier que l'erreur est conforme aux prévisions. Si $T(f,h)$ et $S(f,h)$ désignent respectivement les formules composites des trapèzes et de Simpson,

$$T(f,N) = h\Big(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \cdots + f(x_{N-1}) + \frac{f(x_N)}{2}\Big),$$

$$S(f,N) = \frac{h}{6}\Big(f(x_0) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + 4\sum_{k=0}^{N-1} f\Big(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}\Big) + f(x_N)\Big),$$

on rappelle qu'il existe ξ_1 et ξ_2 tels que

$$|I(f) - T(f,h)| = \frac{b-a}{12} h^2 |f''(\xi_1)|,$$

$$|I(f) - S(f,h)| = \frac{b-a}{180} \frac{h^4}{2^4} |f^{(4)}(\xi_2)|.$$

L'erreur est donc prévisible si f est assez régulière et à condition de connaître f'' ou $f^{(4)}$, ce qui n'est pas toujours le cas (on fait alors des méthodes dites adaptatives).

Avec Python, pour les valeurs $N = 2,4,8,\ldots,512,1024$ calculer l'erreur exacte pour chaque méthode et tracer sur un même graphique à double échelle logarithmique $(n, \text{Erreur}(n))$. Tracer sur ce même graphique (n, n^{-2}) et (n, n^{-4}). Conclure.

Exercice 4. Python Comparer vos routines avec `trapz` et `simps` de `scipy.integrate`.

3. Méthode de Romberg

La méthode de Romberg est un cas particulier de l'extrapolation de Richardson appliquée à la méthode composite des trapèzes et permet, à peu de frais, d'améliorer l'approximation. Nous admettrons que si f est suffisamment régulière alors pour tout $n \geq 1$ (attention ce n'est pas le N lié au pas de discrétisation $h = (b-a)/N$),

$$T(f,h) = \int_a^b f(t)\,dt + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 + \cdots + \alpha_n h^{2n} + O(h^{2n+2}). \tag{1}$$

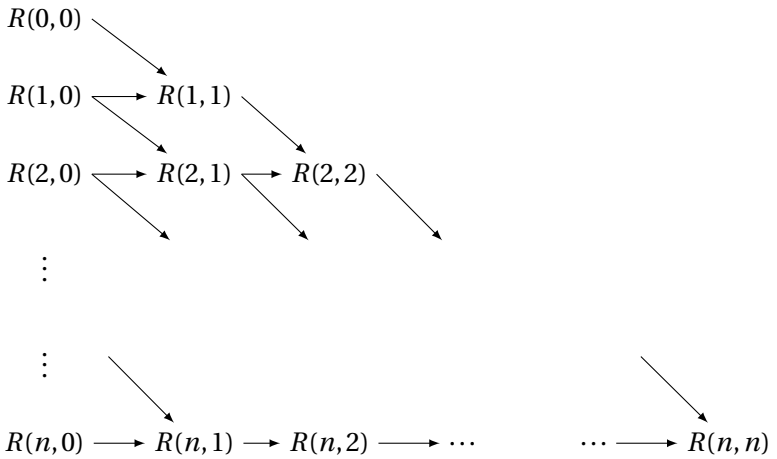
Les coefficients $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ sont évidemment inconnus et dépendent de f. Grosso modo l'idée du procédé d'extrapolation de Richardson est par exemple pour $n = 3$ d'évaluer $T(f,h)$ pour quatre valeurs différentes h_0, h_1, h_2, h_3 et de calculer en 0 la valeur du polynôme d'interpolation de Lagrange passant par $(h_i, T(f,h_i))$, $i \in \{0,1,2,3\}$. Si tout se passe bien et comme par continuité $T(f,0) = \int_a^b f(t)\,dt$, la valeur obtenue est plus précise que celles calculées en h_0, h_1, h_2, h_3. Le calcul du polynôme d'interpolation de Lagrange n'est pas nécessaire, il suffit d'utiliser l'algorithme de Neville (version en un point des différences divisées de Newton).

La méthode de Romberg consiste à prendre $h_0 = h$, $h_1 = \dfrac{h}{2}$, $h_2 = \dfrac{h}{2^2}$, …, $h_n = \dfrac{h}{2^n}$ et les calculs sont assez simples. Soient $h = (b-a)/N$ et $n \geq 1$ fixés. On définit $R(i,k)$ pour $0 \leq k \leq n$ et $k \leq i \leq n$:

$$R(i,0) = T(f, h2^{-i}), \quad 0 \leq i \leq n$$

$$R(i,k+1) = \frac{4^{k+1} R(i,k) - R(i-1,k)}{4^{k+1} - 1} \quad 0 \leq k \leq n-1 \text{ et } k+1 \leq i \leq n.$$

On présente généralement ces valeurs par le diagramme suivant,



Exercice 5. Pour $h = b-a$ et $n = 1$, vérifier que $R(1,1)$ est la formule de quadrature élémentaire de Simpson.

Exercice 6. [Du calcul !] D'après la formule (1) et en ajoutant un indice

$$R(i,0) = \int_a^b f(t)\,dt + \alpha_{1,0}\left(h2^{-i}\right)^2 + \cdots + \alpha_{n,0}\left(h2^{-i}\right)^{2n} + O(h^{2n+2}). \tag{2}$$

Montrer par récurrence que pour tout $0 \leq k \leq n-2$ et $k+1 \leq i \leq n$

$$R(i,k+1) = \int_a^b f(t)\,dt + \alpha_{k+2,k+1}\left(h2^{-i}\right)^{2(k+2)} + \cdots + \alpha_{n,k+1}\left(h2^{-i}\right)^{2n} + O(h^{2n+2}) \tag{3}$$

et que

$$R(n,n) = \int_a^b f(t)\,dt + O(h^{2n+2}).$$

Exercice 7. [Python] Écrire une routine `romberg(f,a,b,N,n)` qui retourne le tableau des $R(i,k)$. Il faut remarquer que les $R(i,k)$ forment un tableau triangulaire (il y a donc une partie du tableau qui n'est pas utilisée). Tester cette routine sur un exemple avec $n=5$ et vérifier que l'approximation s'améliore. Proposer une routine optimisée qui calcule $R(n,n)$. Pour la fonction $f(x)=\exp(1)$, $N=1$ et $n=5$ voici le tableau obtenu

$$\begin{pmatrix} 1.8591409 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1.7539311 & 1.7188612 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1.7272219 & 1.7183188 & 1.7182827 & 0 & 0 & 0 \\ 1.7205186 & 1.7182842 & 1.7182818 & 1.7182818 & 0 & 0 \\ 1.7188411 & 1.718282 & 1.7182818 & 1.7182818 & 1.7182818 & 0 \\ 1.7184217 & 1.7182818 & 1.7182818 & 1.7182818 & 1.7182818 & 1.7182818 \end{pmatrix}.$$

4. Équation intégrale de Fredholm de 2ème espèce, intégration numérique et système linéaire

Soient $a<b$ et $I=[a,b]$ et deux applications continues, $K: I\times I\mapsto\mathbb{R}$ et $f: I\mapsto\mathbb{R}$. Cherchons une fonction u telle que

$$\forall x\in I,\quad u(x) = f(x) + \int_a^b K(x,t)u(t)\,dt \tag{E}$$

4.1. **Indication pour la preuve de l'existence et l'unicité d'une solution de (E)..** On suppose que $\forall (x,t)\in I\times I$ on a $K(x,t)\le \alpha/(b-a)$ avec $\alpha<1$. La preuve se fait (presque) comme pour l'existence d'un point fixe dans la cas réel. Soit $u_0\equiv 0$ la fonction nulle. Pour tout $n\in\mathbb{N}$ soit $u_{n+1}(x) = f(x)+\int_a^b K(x,t)u_n(t)\,dt$. Les fonctions $f(\cdot)$ et $K(\cdot,\cdot)$ étant continues, la suite u_n est une suite parfaitement définie de fonctions continues. On note $\|g\|_\infty = \sup_{x\in I}|g(x)|$, montrer successivement,

(a) Pour tout $n\in\mathbb{N}$, $\quad \|u_{n+2}-u_{n+1}\|_\infty \le \alpha\|u_{n+1}-u_n\|_\infty$.

(b) Pour tout $n\in\mathbb{N}$, $\quad \|u_{n+1}-u_n\|_\infty \le \alpha^n\|u_1-u_0\|_\infty$.

(c) Pour tout $n,p\in\mathbb{N}$, $\quad \|u_{n+p}-u_n\|_\infty \le \alpha^n\|u_1-u_0\|_\infty/(1-\alpha)$.

En déduire que u_n est une suite de Cauchy dans $\mathscr{C}(I)$ muni de la norme de la convergence uniforme et que u_n converge uniformément vers une fonction u solution de (E). Montrer que cette solution est nécessairement unique (toujours sous l'hypothèse initiale faite sur la fonction K).
Remarque. Si $f\equiv 0$, $b-a=1$ et $K\equiv 1$ toute fonction constante est solution.

4.2. **Approximation d'une solution.** L'idée est d'utiliser une formule de quadrature pour calculer $\int_a^b K(x,t)u(t)\,dt$, linéairement dépendante des valeurs de u aux points $x_0,\dots,x_n$, d'écrire (E) pour tout $x=x_i$ ($i\in\{0,\dots,n\}$) et de constater que l'on obtient un problème linéaire.

Choisissons comme formule de quadrature la formule des trapèzes. Soient $n\ge 1$ et $x_i = a+(b-a)i/n$ pour tout $i\in\{0,\dots,n\}$. Pour tout $i\in\{0,\dots,n\}$ écrivons l'approximation

$$\int_a^b K(x_i,t)u(t)\,dt \approx \frac{b-a}{n}\Big(\frac{1}{2}K(x_i,x_0)u(x_0)+K(x_i,x_1)u(x_1)+\cdots+K(x_i,x_{n-1})u(x_{n-1})+\frac{1}{2}K(x_i,x_n)u(x_n)\Big)$$

La version discrète de (E) aux points x_i nous donne le système linéaire, $\forall i\in\{0,\dots,n\}$,

$$u(x_i) - \frac{b-a}{n}\Big(\frac{1}{2}K(x_i,x_0)u(x_0)+K(x_i,x_1)u(x_1)+\cdots+K(x_i,x_{n-1})u(x_{n-1})+\frac{1}{2}K(x_i,x_n)u(x_n)\Big) = f(x_i). \tag{4}$$

Posons (attention nous avons un système linéaire de taille $n+1$)

$$U=\begin{pmatrix} u(x_0)\\ \vdots\\ u(x_n)\end{pmatrix},\quad b=\begin{pmatrix} f(x_0)\\ \vdots\\ f(x_n)\end{pmatrix},\quad \left\{\begin{array}{c} M=(m_{ij})_{1\le i,j\le n+1}\ \text{ avec }\quad m_{i1}=\dfrac{1}{2}K(x_{i-1},x_0),\\ m_{i,(n+1)}=\dfrac{1}{2}K(x_{i-1},x_n),\quad m_{i,j}=K(x_{i-1},x_{j-1})\ \text{si } 2\le j\le n.\end{array}\right\}, \tag{5}$$

La version discrète (4) se traduit matriciellement par $(I-\frac{b-a}{n}M)U=b$.

Exercice. Sous l'hypothèse en 2.1 sur $K(\cdot,\cdot)$, montrer la convergence de l'approximation quand n tend vers $+\infty$. (matrice à diagonale strictement dominante, u (exacte) est solution d'un système linéaire perturbé, d'où conditionnement…)

4.3. **Avec Python.** Écrire un programme Python `fredholm(f,K,a,b,n)` qui calcule l'approximation de u. Organisation :

– créer une matrice carrée `A` de taille $n+1$ et un vecteur `b` de taille $n+1$, tous deux remplis de zéros.

– à l'aide de boucle(s) et de (5) «remplir» `A` et `b` de façon à obtenir `A` $= I-(b-a)M/n$ et `b` $= b$. (évaluation numérique)

– résoudre le système avec `linalg.solve`. Soit U le vecteur solution.

– tracer l'approximation en traçant la ligne brisée `[[`x_0`,U[1]],[`x_1`,U[2]],...,[`x_n`,U[n+1]]]`.

Exemples. a) $a=0$, $b=1$, $f(x)=x^2$ et $K(x,t)=\exp|x-t|$.

b) $a=0$, $b=1$, $f(x)=\dfrac{3}{4}\exp(x)$, $K(x,t)=\exp(x-t)/4$ (solution exacte unique $u(x)=\exp x$)

c) $a=0$, $b=2\pi$, $f(x)=1$, $K(x,t)=\dfrac{1}{10}\cos(x-t)$ (solution exacte unique $u(x)\equiv 1$).

d) $a=0$, $b=1$, $f(x)=\cos(x\pi)(1+1/(2\pi^2))+1/(2\pi^2)$, $K(x,t)=\sup(x,t)/2$.

4.4. **Utilisation de la méthode de Simpson.** Faire 2.2 et 2.3 avec la méthode de Simpson et comparer la précision.

Exercice 8. [Des idées pour la suite]

– un autre choix de suite h_i (suite de Burlisch)

– méthode adaptative de Simpson