

CHAPITRE 1

MA650 PARTIE B, METHODES DE QUADRATURE

L'objectif de ces deux séances de cours est de présenter différentes méthodes de quadrature pour le calcul approché d'intégrales.

On utilise ici les constructions du polynôme d'interpolation de Lagrange et des familles de polynômes orthogonaux réalisées dans les deux chapitres précédents.

A noter que la plupart des résultats énoncés ici sont démontrés. Il est possible (en première lecture) de passer ces démonstrations.

1.1 Étude générale d'une méthode de quadrature

1.1.1 Définitions et notations

Une méthode de quadrature déterministe sur l'intervalle $] \alpha, \beta[$ ($(\alpha, \beta) \in \bar{\mathbf{R}}^2$) est caractérisée par la donnée d'un entier n et de deux familles, $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n} \in \mathbf{R}^{n+1}$ et $(x_i)_{0 \leq i \leq n} \in \mathbf{R}^{n+1}$. Elle consiste à approcher pour toute fonction f correctement définie, l'intégrale $\int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx$ par la somme $\sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i)$. Dans l'intégrale précédente, $\omega \in C^0(] \alpha, \beta[, \mathbf{R}_+^*)$ représente un poids fixé dont tous les moments $x \mapsto x^k \omega(x)$ ($k \in \mathbf{N}$) sont intégrables. On utilise alors la notation

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx \simeq \sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i)$$

pour désigner la méthode de quadrature et on note $E(f)$ l'erreur commise :

$$E(f) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx - \sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i).$$

À toute méthode, on associe enfin un ordre :

Définition 1. On dit qu'une méthode de quadrature est d'ordre $N \in \mathbf{N}$ si elle est exacte pour tous les polynômes de $\mathbf{P}_N$ (espace des polynômes de degré inférieur ou égal à N).

Remarque : Il est préférable dans une méthode de quadrature d'avoir des coefficients λ_i tous positifs afin d'avoir une erreur dans le calcul approché de l'intégrale (ΔI) issue d'une erreur sur la fonction à intégrer (Δf) majorée par :

$$\Delta I \leq \sum_{i=0}^n |\lambda_i| \Delta f = \Delta f \sum_{i=0}^n \lambda_i = \Delta f \int_{\alpha}^{\beta} \omega(x) dx$$

en supposant la méthode au moins d'ordre 0 (à savoir exacte pour les constantes). Cette dernière valeur est en effet la plus petite pouvant être obtenue, étant égale à l'erreur maximale dans le calcul exact de l'intégrale sous les mêmes conditions.

1.2 Méthodes composées

1.2.1 Construction

La construction d'une méthode composée consiste d'abord à se donner une subdivision de l'intervalle d'intégration (supposé borné) :

$$\alpha = \alpha_0 < \alpha_1 < \dots < \alpha_{k+1} = \beta$$

puis à remplacer sur chaque sous-intervalle $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$ la fonction à intégrer par son polynôme d'interpolation de Lagrange associé à $(l + 1)$ points ($l \in \mathbf{N}$) toujours répartis de manière identique.

Plus précisément, soient $(\tau_j)_{0 \leq j \leq l}$, $(l + 1)$ points distincts de $[-1, 1]$ auxquels on associe après translation et homothétie les $(l + 1)$ points de $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$:

$$\alpha_{i,j} = \frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_{i+1} + k_i \tau_j) \quad (0 \leq i \leq k, \quad 0 \leq j \leq l)$$

avec $k_i = \alpha_{i+1} - \alpha_i$. On remplace donc l'intégrale de f sur $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$,

$$\int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(x) dx = \frac{k_i}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_{i+1} + k_i y)\right) dy$$

par $\frac{k_i}{2} \int_{-1}^1 P_{i,l}(y) dy$ où $P_{i,l}$ représente le polynôme d'interpolation de Lagrange de

la fonction $f_i : \begin{pmatrix} [-1, 1] \rightarrow \mathbf{R} \\ y \mapsto f(\frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_{i+1} + k_i y)) \end{pmatrix}$ associé aux points $(\tau_j)_{0 \leq j \leq l}$. On a

$$P_{i,l}(y) = \sum_{j=0}^l f_i(\tau_j) l_j(y) = \sum_{j=0}^l f(\frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_{i+1} + k_i \tau_{i,j})) l_j(y) = \sum_{j=0}^l f(\alpha_{i,j}) l_j(y)$$

où l_j désigne le j -ième polynôme de base de Lagrange associé aux mêmes points.

En notant

$$\omega_j = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 l_j(y) dy, \quad (2)$$

on a donc construit la méthode de quadrature suivante : Définition : On appelle

méthode composée associée aux deux indices $(k, l) \in \mathbf{N}^* \times \mathbf{N}$ et à la famille $(\tau_i)_{0 \leq i \leq l} \in [0, 1]^{l+1}$, la méthode de quadrature définie par :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^k k_i \sum_{j=0}^l \omega_j f(\alpha_{i,j}) \quad (3)$$

où les coefficients k_i , ω_j et $\alpha_{i,j}$ ont été définis au cours de la construction.

On peut également définir la méthode élémentaire associée (correspondant à $k = 0$ et $[\alpha, \beta] = [-1, 1]$) :

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq 2 \sum_{j=0}^l \omega_j f(\tau_j).$$

1.2.2 Exemples de méthodes composées

(i) $l = 0, \tau_0 = -1$: on retrouve la méthode bien connue des rectangles à gauche :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^k k_i f(\alpha_i).$$

(ii) $l = 0, \tau_0 = 0$: on retrouve la méthode du point milieu :

$$\int_a^\beta f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^k k_i f\left(\frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2}\right).$$

(iii) $l = 0, \tau_0 = 1$: on retrouve la méthode des rectangles à droite :

$$\int_a^\beta f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^k k_i f(\alpha_{i+1}).$$

(iv) $l = 1, \tau_0 = -1, \tau_1 = 1$: dans ce cas,

$$\begin{cases} l_0(y) = \frac{1-y}{2} \Rightarrow \omega_0 = \frac{1}{2}, \\ l_1(y) = \frac{y+1}{2} \Rightarrow \omega_1 = \frac{1}{2} \end{cases}$$

et on retrouve la méthode des trapèzes :

$$\int_a^\beta f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^k k_i \frac{f(\alpha_i) + f(\alpha_{i+1})}{2}.$$

1.2.3 Méthodes de Newton Cotes fermées

On peut construire pour tout $l \in \mathbb{N}^*$ une méthode composée en prenant $(l + 1)$ points d'interpolation équirépartis sur $[-1, 1]$:

$$\tau_j = -1 + \frac{2j}{l} \quad (0 \leq j \leq l).$$

On parle alors de la famille des méthodes de Newton Cotes fermées. Les cas particuliers importants sont les suivants : (i) $l = 1$: on retrouve la méthode des trapèzes. (ii)

$l = 2$: dans ce cas on montre que $\omega_0 = \omega_2 = \frac{1}{6}$ et $\omega_1 = \frac{2}{3}$ et on construit la méthode de Simpson :

$$\int_a^\beta f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^k \frac{k_i}{6} \left[f(\alpha_i) + 4f\left(\frac{\alpha_i + \alpha_{i+1}}{2}\right) + f(\alpha_{i+1}) \right].$$

(iii) $l = 4$: dans ce cas, $\omega_0 = \omega_4 = \frac{7}{90}$, $\omega_1 = \omega_3 = \frac{16}{45}$ et $\omega_2 = \frac{2}{15}$ et on construit la

méthode de Boolle-Villarceau.

Remarque : On utilise également les méthodes de Newton Cotes pour $l = 6$ (Weddle-Hardy). Pour des valeurs supérieures de l , ces méthodes ne sont pas utilisées car elles font apparaître des valeurs négatives de ω_i pouvant engendrer des problèmes numériques d'amplification d'erreurs d'arrondis (voir remarque au début du chapitre).

1.2.4 Ordre des méthodes composées

Théorème 1. *Les méthodes composées définies au paragraphe précédent sont d'ordre l . Ce résultat général peut être amélioré dans le cas de la méthode du point milieu (ordre 1) et des méthodes de Newton Cotes fermées lorsque l est pair (ordre $l + 1$).*

Démonstration. : La première affirmation est une conséquence directe de la construction : si $f \in \mathbf{P}_l$ alors, en conservant les notations du paragraphe précédent,

$$\forall i \in \{0, \dots, l\}, \quad \forall y \in [-1, 1], \quad f\left(\frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_{i+1} + k_i y)\right) = P_{i,l}(y)$$

et la formule (3) est exacte. Comme l'ordre de la méthode du point milieu est clairement égal à 1, il reste seulement à améliorer la valeur de l'ordre des méthodes de Newton Cotes lorsque l est pair : on remarque que dans ce cas la méthode élémentaire

$$\int_{-1}^1 f(y) dy \simeq 2 \sum_{j=0}^l \omega_j f(\tau_j) \quad (4)$$

est non seulement exacte pour toute fonction f dans $\mathbf{P}_l$ mais aussi pour toute fonction impaire. En effet, on a alors

$$\forall j \in \{0, \dots, l\}, \quad \tau_{l-j} = -\tau_j$$

ce qui implique

$$\forall y \in [-1, 1], \quad l_j(-y) = l_{l-j}(y)$$

puis $\omega_j = \omega_{l-j}$ et enfin

$$\sum_{j=0}^l f(\tau_j) \omega_j = \sum_{j=0}^{\frac{l}{2}} f(\tau_j) \omega_j + \sum_{j=0}^{\frac{l}{2}} f(-\tau_j) \omega_j = 0 = \int_{-1}^1 f(y) dy.$$

La fonction $f(y) = y^{l+1}$ étant impaire lorsque l est pair, la méthode élémentaire est exacte pour cette fonction. Il en va de même par combinaison linéaire pour l'ensemble des fonctions dans $\mathbf{P}_{l+1}$. La méthode est donc bien d'ordre $l + 1$ $\square$

Remarque : La méthode de Simpson est en particulier d'ordre 3 et la méthode de Boole-Villarceau d'ordre 5.

1.2.5 Convergence des méthodes composées

Avant d'établir un théorème de convergence pour les méthodes composées, on démontre un résultat intermédiaire :

Proposition 1. Les coefficients $(\omega_j)_{0 \leq j \leq l}$ définis par la formule (2) vérifient :

$$\sum_{j=0}^l \omega_j = 1. \quad (5)$$

Démonstration. : Il suffit de remarquer que

$$\sum_{j=0}^l \omega_j = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^l \int_{-1}^1 l_j(y) dy = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 1 dy = 1$$

□

On peut alors démontrer le résultat de convergence suivant :

Théorème 2. Soit $l > 0$ fixé. En notant $\delta_k = \max_{0 \leq i \leq k} k_i$, on a pour toute fonction f intégrable au sens de Rieman sur $[\alpha, \beta]$:

$$\lim_{\substack{k \rightarrow +\infty \\ \delta_k \rightarrow 0}} \sum_{i=0}^k k_i \sum_{j=0}^l \omega_j f(\alpha_{i,j}) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx.$$

Démonstration. : On écrit

$$\sum_{i=0}^k k_i \sum_{j=0}^l \omega_j f(\alpha_{i,j}) = \sum_{j=0}^l \omega_j I_{j,k}(f)$$

où $I_{j,k}(f) = \sum_{i=0}^k k_i f(\alpha_{i,j})$. Par définition de l'intégrale de Rieman, on a pour tout $j \in \{0, \dots, l\}$

$$\lim_{\substack{k \rightarrow +\infty \\ \delta_k \rightarrow 0}} I_{j,k}(f) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx$$

et il suffit alors d'utiliser la Proposition 7 pour conclure la démonstration

□

Remarque : La nécessité d'utiliser une formule composée vient du fait qu'il est impossible d'obtenir un résultat de convergence similaire pour la méthode élémentaire lorsque l tend vers l'infini (puisque'il n'existe aucun résultat de convergence du polynôme d'interpolation vers la fonction interpolée lorsque le nombre de points tend vers l'infini).

1.2.6 Estimation de l'erreur

On peut énoncer le théorème (admis) suivant d'estimation de l'erreur $E(f)$ d'une méthode composée :

Théorème 3. : *on suppose que la méthode élémentaire issue d'une méthode composée est d'ordre $N \in \mathbf{N}$. Alors, il existe une constante C_N telle que*

$$\forall f \in C^{(N+1)}([\alpha, \beta], \mathbf{R}), |E(f)| \leq C_N(\beta - \alpha)\delta_k^{N+1} \|f^{(N+1)}\|_\infty$$

où on a noté $\delta_k = \max_{0 \leq i \leq k} k_i$ le pas maximal de la subdivision.

On verra en exercice, des démonstrations de cette estimation d'erreur pour des cas particuliers de méthodes composées.

Remarque : Ce résultat justifie la définition adoptée pour l'ordre d'une méthode en reliant sa valeur avec la précision de celle-ci pour des fonctions régulières.

1.3 Méthodes de Gauss

1.3.1 Construction

La construction des méthodes de Gauss consiste à fixer un certain nombre de points à l'extérieur de l'intervalle d'intégration $]\alpha, \beta[$ puis à compléter cette famille par des points intérieurs choisis de manière à optimiser l'ordre final de la méthode.

Théorème 4. : *soient $(l, n) \in \mathbf{N}^{*2}$, $l \leq n + 1$ et $(x_i)_{l \leq i \leq n}$ une famille (éventuellement vide lorsque $l = n + 1$) de points distincts extérieurs à $]\alpha, \beta[$. Il existe un unique choix (à une permutation près) de points $(x_i)_{0 \leq i \leq l-1}$, distincts et intérieurs à $]\alpha, \beta[$ et une unique famille de scalaires $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$ telle que la méthode de quadrature*

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx \simeq \sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i) \quad (6)$$

soit d'ordre $n + l$.

La famille de points intérieurs correspond aux racines du $(l + 1)$ -ième polynôme orthogonal sur $] \alpha, \beta [$ associé au poids

$$\Theta(x) = \omega(x) \prod_{i=l}^n (x - x_i). \quad (7)$$

Démonstration. : Unicité : soit une méthode d'ordre $n + l$ à $(n + 1)$ points (l points intérieurs et $(n - l + 1)$ points extérieurs). On note

$$P_l(x) = \prod_{i=0}^{l-1} (x - x_i)$$

et on montre que P_l est le $(l + 1)$ -ième polynôme orthogonal sur $] \alpha, \beta [$ associé au poids Θ défini par (7) (Θ est bien une fonction continue, de signe constant sur $] \alpha, \beta [$ et dont tous les moments sont intégrables). Pour cela, on calcule pour tout $Q \in \mathbf{P}_{l-1}$

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} P_l(x) Q(x) \Theta(x) dx &= \int_{\alpha}^{\beta} \overbrace{\prod_{i=0}^n (x - x_i)}^{\in \mathbf{P}_{n+l}} Q(x) \omega(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^n \lambda_j \prod_{i=0}^n (x_j - x_i) Q(x_j) = 0 \end{aligned}$$

car la méthode est d'ordre $n + l$. Ainsi est démontrée l'unicité (à une permutation près) des points $(x_i)_{0 \leq i \leq l-1}$. Il reste à prouver l'unicité de la famille des scalaires $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$: pour cela, on écrit la formule de quadrature pour chaque polynôme de base de Lagrange $(l_i)_{0 \leq i \leq n}$ associé aux points $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$:

$$l_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \quad (8)$$

Comme $l_i \in \mathbf{P}_n \subset \mathbf{P}_{n+l}$, la méthode de quadrature est exacte pour l_i :

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad \int_{\alpha}^{\beta} l_i(x) \omega(x) dx = \sum_{j=0}^n \lambda_j l_i(x_j) = \lambda_i \quad (9)$$

et la famille des scalaires est bien unique. Existence : on choisit pour famille de points intérieurs $(x_i)_{0 \leq i \leq l-1}$ la famille des l racines distinctes (voir leçon A.III.) du

$(l + 1)$ -ième polynôme orthogonal (noté P_l) associé au poids Θ sur $]\alpha, \beta[$ et pour famille de scalaires $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$, la famille donnée par la relation (9).

On montre tout d'abord que la méthode ainsi définie est d'ordre n : pour cela, on note $P_n(f)$ le polynôme de Lagrange de f associé aux points $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$. Alors

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i f(x_i) = \int_{\alpha}^{\beta} \sum_{i=0}^n l_i(x) \omega(x) f(x_i) dx = \int_{\alpha}^{\beta} P_n(f)(x) \omega(x) dx$$

et la formule est bien exacte si $f \in \mathbf{P}_n$ (car alors $f \equiv P_n(f)$).

Soit ensuite $P \in \mathbf{P}_{l+n}$: grâce à la division euclidienne dans $\mathbf{R}[X]$, on sait qu'il existe $Q \in \mathbf{P}_{l-1}$ et $R \in \mathbf{P}_n$ tels que

$$P(X) = Q(X) \prod_{i=0}^n (X - x_i) + R(X).$$

En particulier,

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} P(x) \omega(x) dx &= \int_{\alpha}^{\beta} Q(x) \prod_{i=0}^n (x - x_i) \omega(x) dx + \int_{\alpha}^{\beta} R(x) \omega(x) dx \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} Q(x) \prod_{i=0}^{l-1} (x - x_i) \Theta(x) dx + \int_{\alpha}^{\beta} R(x) \omega(x) dx \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} \underbrace{Q(x)}_{\in \mathbf{P}_{l-1}} P_l(x) \Theta(x) dx + \sum_{i=0}^n \lambda_i R(x_i) \\ &= 0 + \sum_{i=0}^n \lambda_i R(x_i) \\ &= \sum_{i=0}^n \lambda_i P(x_i) \end{aligned}$$

et la formule de quadrature est bien d'ordre $n + l$ (on a utilisé dans la troisième égalité le fait qu'elle était déjà d'ordre n) $\square$

Définition 2. La méthode construite dans le théorème précédent s'appelle la méthode de Gauss sur $]\alpha, \beta[$ associée aux points extérieurs $(x_i)_{l \leq i \leq n}$ et au poids ω .

Remarque : Cette méthode est exactement d'ordre $n + l$. En effet, en considérant le polynôme $\Pi \in \mathbf{P}_{l+n+1}$ tel que

$$\Pi(x) = \prod_{i=0}^{l-1} (x - x_i)^2 \prod_{i=l}^n (x - x_i),$$

on remarque d'une part que

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i \Pi(x_i) = 0$$

et d'autre part que

$$\int_{\alpha}^{\beta} \Pi(x) \omega(x) dx \neq 0.$$

car Π est non nul et garde un signe constant sur $] \alpha, \beta [$.

Le corollaire suivant précise les caractéristiques des méthodes de Gauss pour une famille particulière de points extérieurs (en l'occurrence la famille vide) :

Corollaire 1. *soit $n \in \mathbb{N}$. Il existe une et une seule méthode de quadrature (avec un poids ω fixé) à $(n+1)$ points dans $] \alpha, \beta [$ et qui soit d'ordre $2n+1$: les points $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ correspondent aux racines du $(n+2)$ -ième polynôme orthogonal sur $] \alpha, \beta [$ pour le poids ω . De plus, les scalaires $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$ définis par (9) sont strictement positifs.*

Démonstration. : Il suffit d'utiliser le Théorème 12 avec $l = n+1$ (ce qui correspond à une famille vide de points extérieurs). En outre, en appliquant la formule de quadrature à $l_i^2 \in \mathbf{P}_{2n} \subset \mathbf{P}_{2n+1}$, (où la famille $(l_i)_{0 \leq i \leq n}$ est définie par (8)) on a la relation

$$0 < \int_{\alpha}^{\beta} l_i^2(x) \omega(x) dx = \sum_{i=0}^n \lambda_i l_i^2(x_i) = \lambda_i$$

ce qui achève la démonstration du corollaire □

1.3.2 Exemples de méthodes de Gauss

À partir du Corollaire précédent et des familles usuelles de polynômes orthogonaux (voir leçon A.III.), on construit les méthodes suivantes : (i) lorsque $\omega(x) = 1$ et

$] \alpha, \beta [=] -1, 1 [$, on parle de la méthode de Gauss-Legendre. Les points $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ correspondent aux racines du $(n+2)$ -ième polynôme de Legendre. Par exemple, si $n = 1$, la méthode (d'ordre 3) s'écrit :

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

(ii) lorsque $\omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ et $] \alpha, \beta [=] -1, 1 [$, on parle de la méthode de Gauss-Tchebychev. Les points correspondent aux racines des polynômes de Tchebychev. On

peut montrer dans ce cas (voir [CLFe]) que la méthode s'écrit :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx \simeq \frac{\pi}{n+1} \sum_{i=0}^n f\left(\cos\left(\frac{2i+1}{2n+2}\pi\right)\right).$$

(iii) lorsque $\omega(x) = e^{-x^2}$ et $]\alpha, \beta[= \mathbf{R}$, on parle de la méthode de Gauss-Hermite. Les points correspondent aux racines des polynômes d'Hermite.

Remarque : Les méthodes de Gauss possèdent rarement d'expression simple. En général, il est nécessaire d'avoir recours à des tables pour obtenir les valeurs approchées des coefficients $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ et $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$. Il est également possible de déterminer ceux-ci en utilisant Maple (voir [GH] pour un exemple de programme).

1.3.3 Convergence des méthodes de Gauss

On peut montrer que toutes les méthodes de Gauss sont convergentes, c'est à dire que $E_n(f)$ tend vers 0 lorsque n tend vers $+\infty$.

On verra en exercice, des démonstrations de cette convergence (et des exemples d'estimation d'erreur) pour des cas particuliers de méthodes de Gauss.

Exemple : On peut montrer que pour la méthode de Gauss-Legendre à deux points, on a

$$\forall f \in C^4([-1, 1], \mathbf{R}), \quad |E(f)| \leq \frac{\|f^{(4)}\|_{\infty}}{135}.$$

Ce résultat est légèrement meilleur que celui obtenu pour la méthode de Simpson dans lequel 135 est remplacé par 90.