Séance 8 : calcul approché d'intégrales

1) Problème à résoudre

On cherche à calculer, au plus exactement, approcher l'intégrale :

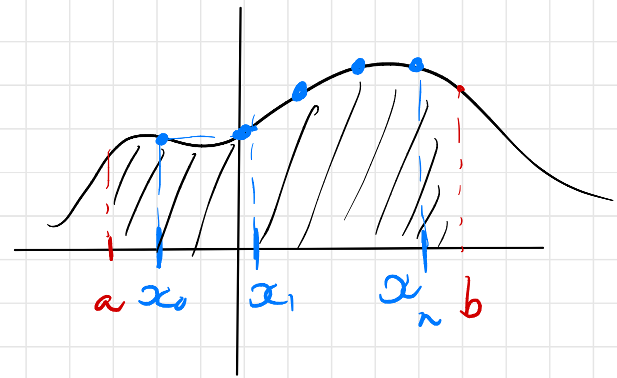
$$I = \int_a^b f(x)\,\omega(x)\,dx$$

(ω : poids ≥ 0, C^0 sur $]a,b[$, $a,b \in \overline{\mathbb{R}}$)

par une somme finie :

$$I \approx \sum_{i=0}^{n} \lambda_i f(x_i) \qquad (*)$$

où $\begin{cases} (x_i) \in \mathbb{R}^{n+1} : \text{points (distincts)} \\ (\lambda_i) \in \mathbb{R}^{n+1} : \text{poids} \end{cases}$ | fixés partout.



Exemples :

→ rectangles à gauche :

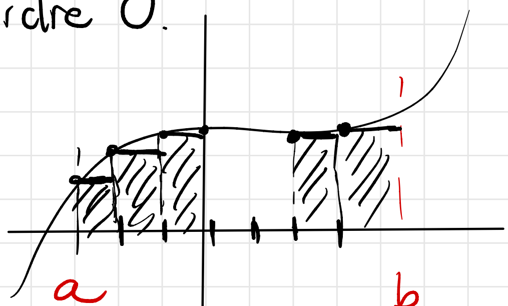
$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(b-a)}{n} f\left(a + i\frac{(b-a)}{n}\right)$$

→ trapèzes, etc...

Pour mesurer la précision de la méthode, on définit son ordre :

* **def** : on dit qu'une méthode de quadrature de type (*) est d'ordre $N \in \mathbb{N}$ si elle est exacte pour tous les polynômes de degré $\leq N$.

* **exemple** : * la méthode des rectangles est d'ordre 0.



* la méthode des trapèzes est d'ordre 1.

On verra par la suite comment déterminer l'ordre d'une méthode et le relier à la précision.

On présente ici 2 types de méthodes :

→ méthodes composées (parmi lesquelles on retrouve : rectangles, trapèzes, ...)

→ méthodes de Gauss

Remarque : on exige que les méthodes construites vérifient :

$$\lambda_i \geq 0 \quad \forall i \in \{0, \dots, n\}$$

pour assurer un bon conditionnement par rapport aux erreurs d'arrondis sur f.

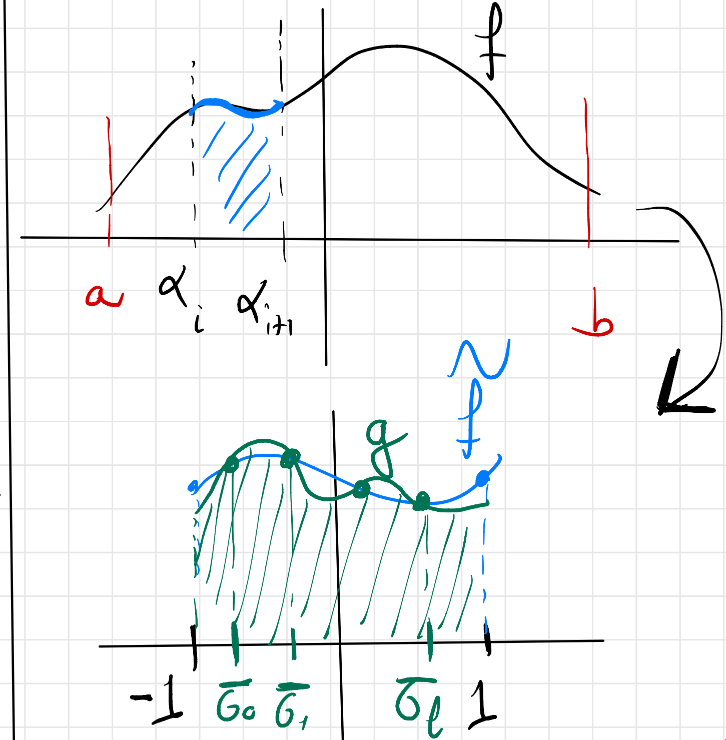
2) Méthodes composées

Dans cette partie, on suppose que $\omega(x)=1$ et $(a,b)\in\mathbb{R}$.

L'idée consiste à calculer I en 2 temps :

→ en subdivisant $[a,b]$ en k sous-intervalles $[\alpha_i,\alpha_{i+1}]$ $(0\le i\le k-1)$

→ en calculant $\int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(x)\,dx$ à l'aide d'un changement affine pour se ramener à $[-1,1]$ puis avec une interpolation de Lagrange sur des points $(\sigma_i)_{0\le i\le \ell}\in[-1,1]$



g : interpolée de Lagrange de $\tilde{f}$ aux points $\{\sigma_0,\dots,\sigma_\ell\}$

On a

$$\boxed{I = \int_a^b f(x)\,dx} = \sum_{i=0}^{k-1} \int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(x)\,dx \text{ (Chasles)}$$

$$= \sum_{i=0}^{k-1} (\alpha_{i+1}-\alpha_i) \int_{-1}^{1} \underbrace{f\left(\tfrac{1}{2}(\alpha_i+\alpha_{i+1}) + \left(\tfrac{\alpha_{i+1}-\alpha_i}{2}\right)y\right)}_{\tilde{f}(y)} dy$$

$$\approx \sum_{i=0}^{k} (\alpha_{i+1}-\alpha_i) \int_{-1}^{1} \underbrace{\sum_{j=0}^{\ell} \tilde{f}(\tau_j)\, \ell_j(y)}_{g(y)}\, dy$$

$$\approx 2\sum_{i=0}^{k} \sum_{j=0}^{\ell} \underbrace{(\alpha_{i+1}-\alpha_i)\overbrace{\left(\tfrac{1}{2}\int_{-1}^{1} \ell_j(y)\,dy\right)}^{\omega_j}}_{\text{poids}} \underbrace{\tilde{f}(\alpha_{i,j})}_{\text{points}}$$

où $\alpha_{ij} = \frac{1}{2}(\alpha_i+\alpha_{i+1}) + \left(\frac{\alpha_{i+1}-\alpha_i}{2}\right)\tau_j$

Il s'agit bien d'une formule de type (*) avec $(k+1).(\ell+1)$ points.

(ℓ_j désigne le $j^{\text{ème}}$ polynôme de base de Lagrange associé aux points $\{\tau_0, \dots \tau_\ell\}$).

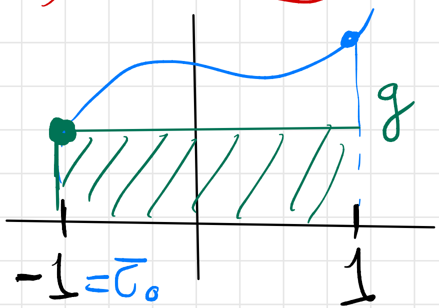
Remarque : la formule élémentaire :

$$\boxed{\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \approx 2\sum_{j=0}^{\ell} \omega_j\, g(\tau_j)}$$

où $\boxed{\omega_j = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \ell_j(y)\,dy}$ est la formule élémentaire associée à la formule composée construite.

* Exemples :

→ $\ell = 0$, $\bar{\tau}_0 = -1$



$$\omega_0 = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} 1 \, dy = 1$$

et $\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \simeq 2\, g(-1)$: rectangles à gauche

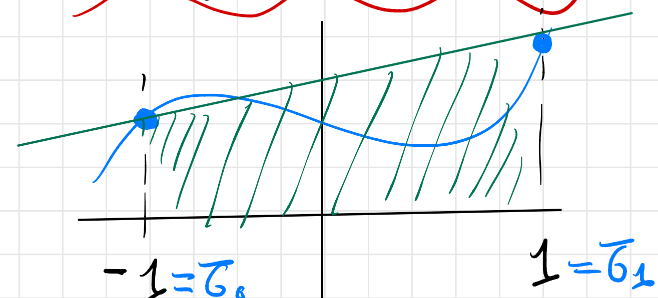
→ $\ell = 0$, $\bar{\tau}_0 = 0$. On trouve $\omega_0 = 1$

et $\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \simeq 2\, g(0)$: point milieu

→ $\ell = 0$, $\bar{\tau}_0 = 1$

on trouve $\omega_0 = 1$ et $\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \simeq 2\, g(1)$: rectangles à droite

→ $\ell = 1$, $\bar{\tau}_0 = -1$, $\bar{\tau}_1 = 1$

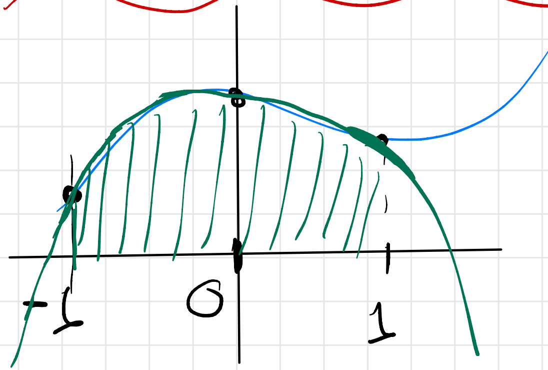


$$\omega_0 = \int_{-1}^{1} \left(\frac{y-1}{(-1)-1} \right) dy = \frac{1}{2}$$

$\omega_1 = \frac{1}{2}$, soit la méthode des trapèzes :

$$\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \simeq 2 \cdot \left(\frac{1}{2} f(-1) + \frac{1}{2} f(1) \right)$$

→ $l=2$, $\tau_0=-1$, $\tau_1=0$, $\tau_2=1$



On trouve $\omega_0=1/6$; $\omega_1=4/6$, $\omega_2=1/6$

soit la formule de Simpson :

$$\int_{-1}^{1} g(y)\,dy \approx 2\left(\frac{1}{6}g(-1)+\frac{4}{6}g(0)+\frac{1}{6}g(1)\right)$$

Plus généralement, pour tout $l \geq 0$, on peut définir la famille des méthodes de Newton Cotes fermées avec :

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

* $l=1$: trapèzes
* $l=2$: Simpson
* $l=4$: Boole Villarceau :

$(\tau_j)_{0\leq j\leq 4} = \left\{-1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1\right\}$

et

$(\omega_j)_{0\leq j\leq 4} = \left\{\frac{7}{90}, \frac{16}{45}, \frac{2}{15}, \frac{16}{45}, \frac{7}{90}\right\}$

* $l=6$: Weddle-Hardy
* $l>6$: certains ω_j sont négatifs.

L'ordre des méthodes composées est donné par le résultat suivant :

Théorème : l'ordre d'une méthode composé est au moins égal à ℓ. Il est égal à $\ell+1$ dans le cas des méthodes de Newton-Cotes fermé si ℓ est pair.

preuve : voir poly (ou [Demailly])

* Exemple :

→ rectangles (gauche ou droite) : 0

→ point milieu : 1

→ trapèzes : 1

→ Simpson : 3

→ Boole-Villarceau : 5

→ Weddle-Hardy : 7

Il existe un lien entre l'ordre de la méthode et sa précision.

Auparavant, on s'assure que toutes les méthodes composées sont convergentes en un certain sens :

Théorème une méthode composée est telle que :

$$\lim_{k\to+\infty \text{ tq } \max\limits_{0\le i\le k}|\alpha_{i+1}-\alpha_i|\to 0} I_{k,\ell} = I \quad (\text{à } \ell \text{ fixé})$$

preuve : on utilise la définition de l'intégrale de Riemann

La vitesse de convergence est reliée à l'ordre de la méthode :

Théorème : soit une méthode composée d'ordre N. Soit f tq $f \in C^{N+1}([a,b], \mathbb{R})$. On a

$$\boxed{|I_{k,l} - I| \leq C_N (b-a) \delta^{N+1} \|f^{(N+1)}\|_\infty}$$

où $\delta = \max_{0 \leq i \leq k} |\alpha_{i+1} - \alpha_i|$ (pas de la subdivision)

(convergence en $O(\delta^{N+1})$)

Exemple : la méthode des trapèzes avec $(n+1)$ pts converge en $O\left(\frac{1}{n^2}\right)$ pour une subdivision régulière (contre $O\left(\frac{1}{n}\right)$ par les rectangles ou $O\left(\frac{1}{n^4}\right)$ par Simpson).

(erreur : $10^{-6} \rightarrow \begin{cases} 10^6 \text{ pts rectangles} \\ 10^3 \text{ pts trapèzes} \\ < 100 \text{ pts Simpson} \end{cases}$)

$\Rightarrow$ Implémentation Python de différentes méthodes composées avec vérification de la vitesse de convergence

3) Méthodes de Gauss

On reprend le problème posé au §1 en essayant à présent de construire une méthode d'ordre le plus élevé possible par un nombre donné, $n+1$, de points $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$.

Par cela, on a besoin de quelques propriétés sur les familles de polynômes orthogonaux associés au poids ω.

Théorème : soit ω un poids sur $]a,b[$ tel que :

$$\begin{cases} * \ \omega(x) > 0 \quad \forall x \in]a,b[\\ * \ \int_a^b x^n \omega(x)\,dx < +\infty \end{cases}$$

Il existe une unique famille de polynômes $\{P_0, \dots, P_n, \dots\}$ telle que

$$\begin{cases} * \ d^\circ P_n = n \quad (n \geq 0) \\ * \ P_n \text{ est unitaire (coeff. dominant} = 1) \\ * \ \forall Q \in \mathbb{R}_{n-1}[X], \\ \langle P_n, Q \rangle = \int_a^b P_n(x) Q(x) \omega(x)\,dx = 0 \end{cases}$$

on parle de la famille des polynômes orthogonaux associée au poids ω

preuve : basée sur orthogonalisation de Gram-Schmidt.

* Exemples :

→ $[a,b] = [-1,1]$ et $\omega(x) = 1$:

on parle des polynômes de Legendre.

→ $]a,b[=]-1,1[$, $\omega(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

on parle des polynômes de Tchebychev

→ $]a,b[=]0,+\infty[$, $\omega(x) = e^{-x}$

on parle des polynômes de Laguerre

→ $]a,b[=]-\infty,+\infty[$, $\omega(x) = e^{-x^2}$

on parle des polynômes de Hermite

→ voir TD8 bis (propriétés des polynômes orthogonaux)

Pour le problème présent, on utilise une propriété particulière de ces polynômes :

Théorème On note $\{P_0, \dots, P_n, \dots\}$ la famille des polynômes orthogonaux associée au poids ω. Alors, le polynôme P_n est scindé, à racines simples, toutes dans $]a,b[$.

preuve (voir poly ou [Demailly])

A présent, on énonce le resultat fondamental construisant la méthode de quadrature d'ordre maximal à n fixé :

Théorème : il existe une unique méthode de quadrature à $(n+1)$ pts :

$$\int_a^b f(x)\omega(x)\,dx \simeq \sum_{i=0}^{n} \lambda_i f(x_i)$$

qui soit d'ordre $2n+1$.

* Les points $(x_i)_{0\leq i\leq n}$ sont les $(n+1)$ racines du polynôme orthogonal P_{n+1} associé au poids ω.
* Les poids $(\lambda_i)_{0\leq i\leq n}$ sont tels que :

$$\lambda_i = \int_a^b l_i(x)\,\omega(x)\,dx \quad \text{où}$$

$(l_i)_{0\leq i\leq n}$ famille des polynômes de base d'interpolation de Lagrange associée aux $(n+1)$ pts $(x_i)_{0\leq i\leq n}$.

On a de plus

$$\forall i\in\{0,\dots,n\},\ \lambda_i>0.$$

preuve :

* Unicité : soit une méthode de quadrature à $(n+1)$ pts. On note

$$\tilde{P}_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$$

On a
* $d^\circ \tilde{P}_{n+1} = n+1$
* $\tilde{P}_{n+1}$ unitaire et

$$\langle \tilde{P}_{n+1}, \underset{\substack{\uparrow\\ d^\circ\leq n}}{Q}\rangle = \int_a^b \underbrace{\tilde{P}_{n+1}(x)Q(x)}_{d^\circ\leq 2n+1}\omega(x)\,dx.$$

Comme la méthode est exacte pour $\tilde{P}_{n+1} Q$, on a

$$\langle \tilde{P}_{n+1}, Q \rangle = \sum_{i=0}^{n+1} \lambda_i (\tilde{P}_{n+1} Q)(x_i)$$
$$= 0 \quad //$$

$\tilde{P}_{n+1}$ est bien égal à P_{n+1} et on a l'unicité des $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$

* Comme la méthode est exacte par l_i, on a :

$$\int_a^b l_i(x)\, \omega(x)\, dx = \lambda_i + 0$$

et on a l'unicité des $(\lambda_i)_{0 \leq i \leq n}$

* Réciproquement, la méthode proposée est bien d'ordre $2n+1$. En effet

$\rightarrow$ elle est d'ordre $\geq n$ car si $Q \in \mathbb{R}_n[X]$,

$Q(x) = \sum_{i=0}^{n} Q(x_i)\, l_i(x)$ et

$$\int_a^b Q(x)\, \omega(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i Q(x_i)$$

par définition des (λ_i).

$\rightarrow$ soit $Q \in \mathbb{R}_{2n+1}[X]$. On a par la division euclidienne :

$$\underbrace{Q(x)}_{d^\circ \leq 2n+1} = \underbrace{M(x)}_{d^\circ \leq n} \underbrace{\prod_{i=0}^{n} (x - x_i)}_{P_{n+1}} + \underbrace{R(x)}_{d^\circ \leq n}$$

On a

$$\int_a^b Q(x)\omega(x)dx = \int_a^b M(x)P_{n+1}(x)\omega(x)dx + \int_a^b R(x)\omega(x)dx$$

et

$$\sum_{i=0}^{n} \lambda_i Q(x_i) = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i R(x_i).$$

Or, $\int_a^b \underbrace{P_{n+1}(x)}\ \underbrace{M(x)}_{d^\circ \leq n}\omega(x)dx = 0$ (orthogonalité)

et $\int_a^b R(x)\omega(x)dx = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i R(x_i)$ (méthode exacte pour R)

$\rightarrow$ méthode exacte pour Q //

On a de plus

$$\int_a^b \underbrace{l_i^2(x)}_{d^\circ = 2n}\omega(x)dx = \sum_{j=0}^{n} \lambda_j l_i^2(x_j) = \lambda_i$$

$\Rightarrow \lambda_i > 0$ //

On parle des méthodes de Gauss (- Lagrange, Tchebychev, ...)

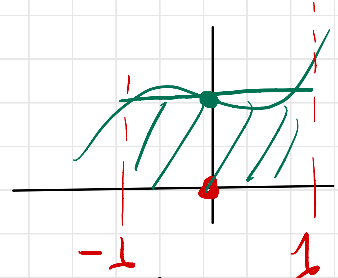
* Exemples

$\longrightarrow [a,b] = [-1,1]$; $\omega(x) = 1$

On parle des méthodes de Gauss-Legendre :

* $n=0$: $\begin{cases} x_0 = 0 \\ \lambda_0 = 2 \end{cases}$

(pt milieu d'ordre 1)



* $n=1$: $P_2(x) = x^2 - \frac{1}{3}$

$\left(\int_{-1}^{1} P_2 \, dx = \int_{-1}^{1} x P_2 \, dx = 0 \right)$

d'où $\begin{cases} x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \, , & \lambda_0 = 1 \\ x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} & \lambda_1 = 1 \end{cases}$

et

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

d'ordre 3 //

(à comparer avec Simpson)

* $n=2$: 3 pts $\Rightarrow$ ordre 5

$\rightarrow \,]a,b[\, = \,]-1,1[\, , \; \omega(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

Méthode de Gauss-Tchebychev

dont on trouve une expression explicite :

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

d'ordre $2n+1$ //

On peut démontrer le résultat suivant de convergence (avec vitesse associée) des méthodes de Gauss :

Théorème : Sur la méthode de Gauss associée au poids ω.

On a

$$\lim_{n \to +\infty} \sum_{i=0}^{n} \lambda_i f(x_i) = \int_a^b f(x)\,\omega(x)\,dx$$

(si f C^0).

De plus, en notant $E(f)$ l'erreur commise,

on a

$$|E(f)| \leq \frac{C_n}{(2n+2)!} \|f^{(2n+2)}\|_\infty$$

(si f est C^{2n+2})

où $C_n = \int_a^b \prod_{i=0}^{n} (x-x_i)^2\,\omega(x)\,dx$.

Exercices : TD8