Master 1 Métiers de l'Enseignement, Mathématiques - ULCO, La Mi-Voix, 2010/2011

ANALYSE NUMÉRIQUE - TPs

Fiche de Mathématiques 4 - Méthodes de quadrature numérique.

1 Formules de quadrature

1.1 Expression générale

Soit $f \in \mathcal{C}([a,b])$, on cherche à approcher

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \tag{1}$$

par le nombre

$$Q(f) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i \tag{2}$$

où les x_i sont des points de $[a,b]$ et w_i des réels donnés. Une telle formule est appelée formule de quadrature.

1.2 Résultat de convergence

On le résultat général suivant :

Théorème 1.1 *Soit $I = [a,b]$ un intervalle fermé borné de $\mathbb{R}$. Soit $f \in \mathcal{C}([a,b])$ et la formule de quadrature*

$$Q_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) \tag{3}$$

où les $x_i^{(n)}$ sont des points de I pour tout n. On suppose que

1. $\exists M > 0, \forall n, \displaystyle\sum_{i=1}^{n} |w_i^{(n)}| \leq M$,
2. $\forall p$, *polynôme,*

$$\lim_{n\to+\infty} Q_n(f) = I(f) = \int_a^b p(x)dx.$$

Alors, la formule de quadrature converge vers f, i.e. $\displaystyle\lim_{n\to+\infty} Q_n(f) = I(f)$.

2 Formules de type interpolation

2.1 Obtention des formules (formules de Newton-Cotes)

L'idée de base est la suivante : pour $f \in \mathcal{C}([a,b])$ et $(x_i)_{i=1,\ldots,n+1}$ une suite de points deux à deux distincts on approche $I(f)$ par l'intégrale $I(p_n)$ où p_n est le polynôme d'interpolation de f aux points $(x_i)_{i=1}^{n+1}$. Les formules de quadrature s'obtiennent assez facilement. On a la

Proposition 2.1 *Soient $(x_i)_{i=1,\ldots,n+1}$ une suite de points deux à deux distincts, tous dans $[a,b]$ et $f \in \mathcal{C}([a,b])$. On note p_n le polynôme d'interpolation de f aux points $(x_i)_{i=1,\ldots,n+1}$. On a*

$$\int_a^b p_n(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$$

avec

$$w_i = \int_a^b l_i(x)dx$$

où $l_i(x)$ est le i-ième polynôme de Lagrange associé aux points $(x_i)_{i=1,\ldots,n+1}$.

Exemple 2.1 *$n = 0$, $Q(f) = (b-a)f(x_1)$, Formule des rectangles.*

Exemple 2.2 *$n = 1$, $x_1 = a$, $x_2 = b$: $Q(f) = \dfrac{b-a}{2}(f(a) + f(b))$, Formule des trapèzes.*

Exemple 2.3 *$n = 2$, $x_1 = a$, $x_2 = \dfrac{a+b}{2}$, $x_3 = b$: $Q(f) = \dfrac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\dfrac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$, Formule de Simpson.*

On trouvera ci-après (TABLE 1) une liste de formules de quadrature lorsque les points d'intégration (ou d'interpolation) sont régulièrement espacés. Relativement à ce tableau, on rappelle la définition de l'ordre de précision d'ue formule de quadrature.

Définition 2.1 *On dit qu'une formule de quadrature est d'ordre m si m est le plus grand entier tel que la formule soit exacte sur $\mathcal{P}_m$, autrement dit tel que $I(p) = Q(p)$, $\forall p \in \mathcal{P}_m$.*

n	α_i							Num	Erreur	Nom
1	1	1						2	$\dfrac{h^3}{12}f^{(2)}(\xi)$	Trapèzes
2	1	4	1					6	$\dfrac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$	Simpson
3	1	3	3	1				8	$\dfrac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi)$	3/8
4	7	32	12	32	7			90	$\dfrac{8h^7}{945}f^{(6)}(\xi)$	Milne
5	19	75	50	50	75	19		288	$\dfrac{275h^7}{11096}f^{(6)}(\xi)$	Milne
6	41	216	27	272	27	216	41	840	$\dfrac{9h^9}{1400}f^{(8)}(\xi)$	Weddle

TABLE 1 – Formules de quadrature

2.2 Formules composites

Elles consistent découper l'intervalle d'intégration en sous-intervalles sur lesquels une formule de quadrature (de type interpolation par exemple) est appliquée. Ces formules reposent sur la relation de Chasles. Plus précisément, on se donne $n+1$ points $x_0 = a < x_1 < \ldots < x_n = b$. On a

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i-1}} f(x)dx.$$

En approchant $\displaystyle\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ par une formule de quadrature $Q_i(f)$ sur $[x_i, x_{i+1}]$, on obtient

$$I(f) \simeq \sum_{i=0}^{n-1} Q_i(f).$$

On retrouve ainsi les sommes de Riemann. En effet, si on approche f sur $[x_i, x_{i+1}]$ par sa valeur en $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$, on obtiendra

$$Q_i(f) \simeq (x_{i+1} - x_i)f(\xi_i)$$

et donc

$$I(f) = \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)f(\xi_i).$$

On obtient la méthode des rectangles à gauche composite pour $\xi_i = x_i$, celle des des rectangles à droite composite pour $\xi_i = x_{i+1}$.

3 Accélération par Romberg

Elle est basée sur l'extrapolation à la limite de Richardson. Soit $A(h)$ une suite de nombres réels convergeant vers a_0 lorsque h tend vers 0. Supposons que $Q(h)$ admette le développement

$$A(h) = a_0 + a_1 h + a_2 h^2 + \ldots + a_n h^n + R_{n+1}(h).$$

Si $a_1 \neq 0$, la suite $A(h)$ approche a_0 au premier ordre. De manière générale, soit k_0 le plus petit indice tel que $a_k 0 \neq 0$. Alors $A(h)$ approche a_0 à l'ordre k_0. Pour rendre la convergence plus rapide, il faudrait pouvoir « éliminer » les coefficients successifs de a_{k_0}. À cet effet, on construit de proche en proche une suite $B(h)$ convergeant aussi vers a_0 mais plus vite puisqu'avec un développement en 0 sous la forme

$$B(h) = a_0 + b_{k_1} h^{k_1} + \ldots \text{ avec } k_1 \ll k_0.$$

Remarquons qu'en remplaçant h par δh, on a

$$A(\delta h) = a_0 + a_1 \delta h + a_2 \delta_2 h^2 + a_n \delta^n h^n + R_{n+1}(h).$$

Ainsi, en définissant $B(h)$ par

$$B(h) = \frac{A(\delta h) - A(h)}{1 - \delta} = a_0 + b_2 h^2 + \ldots,$$

la nouvelle suite $B(h)$ approche a_0 à l'ordre 2. On peut généraliser ce procédé comme suit :

Méthode de Romberg

`Initialisation`	$\mathcal{A}_{m,0} = A(\delta^m h), \; m = 0, \ldots, n$
`Pour` $k = 0, \ldots$	
`poser`	$\mathcal{A}_{m,k+1} = \dfrac{\mathcal{A}_{m,k} - \delta^{2(k+1)} \mathcal{A}_{m-1,k}}{1 - \delta^{2(k+1)}}$

La méthode de Romberg consiste à répéter ce procédé recursivement avec $\delta = \dfrac{1}{2}$ et on l'applique à l'approximation d'une intégrale par la formule des trapèzes composite.

4 Introduction à la quadrature de Gauss

4.1 Formulation du problème

Dans les méthodes de quadrature de type interpolation, les points d'intégration étaient fixés au préalable. Les formules produites sont de l'ordre du nombre de ces points. En revenant à l'expression générale des formules de quadrature, une question naturelle se pose : peut-on déterminer les points x_i et les poids w_i de sorte à ce que la formule soit d'ordre maximal ?
Formulée mathématiquement cette question devient

$$\text{Trouver } x_i,\ w_i,\ i = 1, \ldots, n+1 \text{ tels que } \sum_{i=1}^{n} p(x_i) w_i = \int p(x) w(x) dx \text{ pour tout } p \text{ dans } \mathcal{P}_m \text{ avec } m \text{ maximum.}$$

Ici $w(x)$ est une fonction positive, intégrable, appelée fonction poids. Sans faire davantage de calculs, on voit immédiatement qu'ayant $2(n+1)$ inconnues, il faut au moins $2(n+1)$ équations pour espérer atteindre l'ordre $2n+1$. Peut-on alors choisir x_i et w_i pour que l'ordre atteint soit maximum, c'est-à-dire $2n+1$?

4.2 Le résultat général avec les polynômes orthogonaux

Soit f une fonction continue. Considérons le problème de l'évaluation numérique de l'intégrale

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

où $w(x)$ est une fonction poids jouissant des propriétés suivantes :

- $w(x) \geq 0$ est mesurable sur $[a, b]$,
- tous les moments $\mu_k = \displaystyle\int_a^b x^k w dx$ existent et sont finis.
- pour les polynômes positifs P sur $[a, b]$, $\displaystyle\int_a^b P(x) w(x) dx = 0 \Rightarrow P = 0$.

On cherche à approcher $I(f)$ sous la forme

$$\tilde{I}(f) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) w_i$$

où les x_i et les w_i sont à déterminer de sorte à ce que cette formule soit d'ordre le plus élevé possible, i.e. exacte pour les polynômes de degré le plus grand possible. Ces formules dites de Gauss, sont uniques et d'ordre $2n-1$.

Théorème 4.1 *Soient $x_1, \ldots, x_n$ les racines du polynôme p_n, $w_1, \ldots, w_n$ les racines du système d'équations*

$$\sum_{i=1}^{n} c_i p_i(x_k) w_i = \begin{cases} (p_0, p_0) & si\ k = 0 \\ 0 & si\ k = 1, \ldots, n-1 \end{cases}.$$

Alors $w_i > 0$ et

1. $\displaystyle\int_a^b p(x)w(x)dx = \sum_{i=1}^{n} c_i p_i(x_k) w_i$ *pour tout $p \in \mathcal{P}_{2n-1}$. Les w_i sont appelés poids.*
2. *Inversement, si w_i, x_i sont tels que la formule soit exacte pour tout polynôme de $\mathcal{P}_{2n-1}$, alors ce sont les nombres définis par le système.*
3. *Il n'est pas possible de trouver des x_i, w_i tels que la formule soit exacte sur $\mathcal{P}_{2n}$.*

5 Exercices

Exercice 1 *Méthodes de quadrature à 1 point.*

Un unique point $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$ est utilisé dans la formule de quadrature élémentaire.

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt \simeq (x_{i+1} - x_i) f(\xi_i)$$

Trois choix « naturels » se présentent pour le choix des ξ_i, qui définissent chacun une méthode d'intégration différente :

- méthode des rectangles à gauche : $\xi_i = x_i$,
- méthode des rectangles à droite : $\xi_i = x_{i+1}$,
- méthode du point milieu : $\xi_i = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$.

1. Définir la fonction $f : x \mapsto \dfrac{\pi}{2} \sin\left(\dfrac{\pi}{2}\right)$ et calculer son intégrale exacte $I(f)$ sur $[0, 1]$.
2. Écrire la fonction `rectG` qui retournera en sortie l'intégrale approchée d'une fonction g sur l'intervalle $[0, 1]$ par la quadrature des rectangles à gauche.

```
function [I]=rectG(g,N)
// g fonction à intégrer
// N le nombre de points de la subdivision
// I en sortie, l intégrale calculée par les rectangles à gauche
endfunction
```

3. Écrire de même la fonction `rectM` qui retournera en sortie l'intégrale approchée par la quadrature du point milieu pour N points.
4. Comparer les deux méthodes. Pour cela on calculera pour différentes valeurs $N = 50, 100, \ldots, 450, 500$, l'erreur $E_N(f)$ relativement à la valeur exacte pour la fonction f, et on tracera en échelle logarithmique les deux courbes $E_N(f)$ en fonction de N.
5. Quel est, à partir de la pente des courbes précédemment tracées, l'ordre de ces méthodes.

Exercice 2 *Méthodes de quadrature à 2 points.*

Étant donné un réel $\theta \in [0, 1]$, on s'intéresse à la quadrature à deux points suivante :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt \simeq (x_{i+1} - x_i)(\theta f(x_{i+1}) + (1-\theta) f(x_i)).$$

1. Lorsque $\theta = 1$ ou $\theta = 0$, quelles méthodes retrouve-t-on ?
2. Définir une fonction `DeuxPts` qui prendra en arguments une fonction `g`, un réel `theta` et un entier naturel `N` et retournera en sortie l'intégrale de g évaluée selon cette méthode pour $\theta =$ `theta` sur une subdivision régulière de $[0, 1]$ contenant N points.

3. Pour $N = 500$ puis pour $N = 600$, calculer respectivement les valeurs de l'erreur `Err1` et `Err2` obtenues pour différentes valeurs de `theta` dans $[0, 1]$. On pourra définir pour cela

```
n1=500 ; n2=600 ;
Err1=[] ; Err2=[] ;
THETA=[0 :0.05 :1] ;
for theta=THETA
 Err1=[Err1,abs(DeuxPts(f,theta,n1)-1)] ;
 Err2=[Err2,abs(DeuxPts(f,theta,n2)-1)] ;
end
```

4. Tracer alors, en fonction de θ, l'ordre approximatif évalué comme suit :

$$\texttt{ordre}(\theta) \simeq -\frac{\log(\texttt{ Err2}(\theta)) - \log(\texttt{ Err1}(\theta))}{\log(\texttt{ n2}) - \log(\texttt{ n1})}.$$

Que remarque-t-on ?

5. Justifier la dénomination de méthode des trapèzes lorsque $\theta = \dfrac{1}{2}$.

Exercice 3 *Méthode de quadrature à 3 points : Méthode de Simpson d'ordre 3.*
Il s'agit d'une méthode de quadrature à poids basée sur la formule suivante :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt \simeq \frac{1}{6}(x_{i+1} - x_i)\left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1})\right).$$

1. Définir une fonction `Simpson` qui permettra de calculer l'intégrale approchée d'une fonction g sur une subdivision de N points de $[0, 1]$.
2. Calculer l'intégrale approchée par cette méthode dans le cas d'un polynôme de degré 0,1,2 puis 3. Que peut-on remarquer ?
3. Tracer, toujours en échelle logarithmique, $E_N(f)$ en fonction de N pour les valeurs N très grandes.

Exercice 4 *Régularité vs. vitesse de convergence.*
On considère la fonction f définie sur l'intervalle $[0, 1]$ par $f(x) := |2x^4 - 1|$.

1. Quelle est la régularité de f ?
2. Calculer à la main son intégrale exacte sur $[0, 1]$.
3. Implémenter la méthode de quadrature de Simpson

```
function I=Simpson(g,n,a,b)
...
endfunction
```

permettant d'évaluer l'intégrale sur $[a, b]$ de la fonction g avec n quadratures de Simpson élémentaires

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t)dt \simeq \frac{1}{6}(x_{i+1} - x_i)\left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1})\right).$$

4. Tracer en échelle log-log la courbe de convergence en fonction du nombre de points. Quelle est la vitesse de convergence ? On pourra également tracer les courbes de $N \mapsto \dfrac{1}{N^2}$ et $N \mapsto \dfrac{1}{N^4}$.
5. Justifier la différence obtenue par rapport à la décroissance habituelle de l'erreur en $\dfrac{1}{N^4}$.
6. Tracer de nouveau la courbe de convergence lorsqu'on calcule désormais cette intégrale par la quadrature de Simpson, mais en découpant le calcul en deux :

$$\int_0^1 f(t)dt = \int_0^{1/2} f(t)dt + \int_{1/2}^1 f(t)dt.$$

Exercice 5 *Méthodes de Gauss.*
Une méthode de Gauss est de la forme

$$\int_{-1}^1 f(t)w(t)dt \simeq \sum_{i=0}^{\ell} \lambda_i f(x_i)$$

et est d'ordre $2\ell + 1$.

1. Programmer les méthodes de Gauss-Legendre suivantes ($w = 1$ sur $[-1, 1]$) :
   - $\ell = 1$, $x_0 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}}$, $x_1 = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$ et $\lambda_0 = \lambda_1 = 1$,
   - $\ell = 2$, $x_0 = -\sqrt{\dfrac{3}{5}}$, $x_1 = 0$, $x_2 = \sqrt{\dfrac{3}{5}}$ et $\lambda_0 = \lambda_2 = \dfrac{5}{9}$, $\lambda_1 = \dfrac{8}{9}$.

   Appliquer ces méthodes au calcul des intégrales
   $$I_1 = \int_{-1}^{1} \frac{dt}{1+t^2} \text{ et } \int_0^1 \sqrt{t}dt.$$
   Comparer avec les méthodes de Newton-Cotes avec le même nombre de points (i.e. méthode des trapèzes et méthode de Simpson).
2. Programmer les méthodes de Gauss-Tchebychev ($w = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ sur $]-1, 1[$, quel que soit ℓ, $x_i = \cos\left(\dfrac{2i+1}{2\ell+2}\pi\right)$ et $\lambda_i = \dfrac{\pi}{\ell+1}$, $0 \leq i \leq \ell$.

   Appliquer ces méthodes au calcul de
   $$\int_1^{-1} \frac{\sqrt{1+t^2}}{\sqrt{1-t^2}}dt, \text{ puis de } \int_{-1}^{1} \frac{\sqrt{1+t}}{1-t^2}dt.$$
   Conclure.

Références

[1] B. BOUTIN. *Méthodes de quadrature pour l'intégration numérique*
Université Pierre et Marie Curie (année universitaire 2006/2007).
http ://perso.univ-rennes1.fr/benjamin.boutin/Docs/336tp2.pdf

[2] B. BOUTIN. *Méthodes de quadrature pour l'intégration numérique (2)*
Université Pierre et Marie Curie (année universitaire 2006/2007).
http ://perso.univ-rennes1.fr/benjamin.boutin/Docs/336tp3.pdf

[3] Jean-Paul CHEHAB. *Intégration numérique*
Notes de cours, Université de Picardi Jules Verne (6 Mai 2009).
http ://www.mathinfo.u-picardie.fr/chehab/Ens/cours_integration.pdf

[4] P. MEIER, A.BONANOMI, D.MESSINA. *Intégration numérique*
École Polytechnique Fédérale de Lausanne.
http ://sma.epfl.ch/∼bonanomi/files/Integration_numerique.pdf