

Chapitre 5

Méthodes d'intégration numérique

Le but

Le but de ce chapitre est d'aborder le calcul général de l'intégrale d'une fonction $f(x)$ sur un domaine fini délimité par des bornes finies a et b (les cas des bornes infinies n'est donc pas couvert ici) :

$$I = \int_a^b f(x)dx . \quad (5.1)$$

Les motivations

Dans certains cas très limités, une telle intégrale peut être calculée analytiquement (à la main). Cependant, ce n'est que très rarement possible, et le plus souvent un des cas suivants se présente :

- Le calcul analytique est long, compliqué et rébarbatif
- Le résultat de l'intégrale est une fonction compliquée qui fait appel à d'autres fonctions elles-mêmes longues à évaluer
- Cette intégrale n'a pas d'expression analytique (par exemple la fonction erreur : $Er f(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x'^2} dx'$).

Dans tous ces cas, on préférera calculer numériquement la valeur de l'intégrale I .

Le principe

L'idée principale est de trouver des méthodes qui permettent de calculer rapidement une valeur approchée \tilde{I} de l'intégrale à calculer :

$$\tilde{I} \approx I \quad (5.2)$$

Comme toujours, un programme numérique n'invente rien, et ne fait que procéder très rapidement à un calcul que l'on pourrait en principe faire à la main. Une méthode bien connue consiste par exemple à diviser l'aire sous la courbe en un grand nombre de petits rectangles d'aire \tilde{I}_k et de les sommer. Le résultat $\tilde{I} = \sum_k \tilde{I}_k$ est alors une approximation de l'intégrale I . Cette approximation est d'autant meilleure que la largeur h des rectangles tend vers 0, c'est à dire : $\lim_{h \rightarrow 0} \tilde{I} = I$. Cette méthode dite *des rectangles* est un exemple parmi d'autres. Nous le reverrons, mais nous verrons aussi d'autres méthodes, plus générales et plus performantes.

Pour presque toutes les méthodes (sauf la méthode de Monte-Carlo), l'intégrale numérique est calculée à partir de l'évaluation de la fonction $f(x)$ en un nombre de point $n + 1$ distincts : $f_k = f(x_k)$, $k \in [0, n]$. Elle s'écrit alors :

$$\tilde{I} = (b - a) \sum_{k=0}^n w_k f_k \quad (5.3)$$

Dans ce cas, on parle de méthodes de *quadrature*.

Nous allons voir 4 types de méthodes différentes :

- 1.1- Les méthodes de Newton-Cotes simples
- 1.2- Les méthodes de Newton-Cotes composites
- 1.3- Les méthodes de Gauss-Legendre
- 1.4- Les méthodes de Monte-Carlo

Performances

La performance d'une méthode se juge en comparant

- la précision du résultat : Celle-ci se caractérise en estimant l'erreur ϵ entre l'approximation et la valeur réelle de l'intégrale :

$$\epsilon = I - \tilde{I} \quad (5.4)$$

La valeur de l'erreur ne peut pas être calculée exactement puisqu'en général, on ne connaît pas l'intégrale I que l'on cherche à calculer. Cependant, une majoration peut souvent être estimée en étudiant le développement en série de Taylor de la fonction $f(x)$.

- La rapidité d'exécution nécessaire pour atteindre ce résultat. De manière générale, toutes les méthodes peuvent atteindre de très grandes précisions. Cependant, le temps de calcul augmente avec la précision. Ce temps n'augmente pas de la même manière pour toutes les méthodes si bien que certaines s'avèrent plus efficaces que d'autres. En particulier, le temps de calcul des méthodes de quadrature est proportionnel au nombre de points où la fonction $f(x)$ est évaluée.

5.1 Lois de Newton-Cotes simples

Comme nous allons le voir, les méthodes de Newton-Cotes *simples* ne permettent pas, à elles-seules, d'atteindre des précisions suffisantes sur des intervalles $[a, b]$ finis et ne sont donc jamais utilisées dans ce cas. En revanche, elles deviennent précises lorsque $|b - a| \rightarrow 0$, et elles constituent alors la base élémentaire des méthodes *composites* présentées dans la section suivante.

5.1.1 Principe

Le principe générale des méthodes de Newton-Cotes simples est d'approximer la fonction $f(x)$ à intégrer par un polynôme $P(x) \approx f(x)$. Si cette approximation est suffisamment bonne alors, l'intégrale de ce polynôme

$$\tilde{I} = \int_a^b P(x) dx \quad (5.5)$$

sera une bonne approximation de $I = \int_a^b f(x) dx$. L'avantage est que l'on sait calculer analytiquement la valeur exacte de \tilde{I} . Dans ces méthodes, on choisit des polynômes de degré p qui coïncident avec $f(x)$ en $p+1$ points distincts, espacés régulièrement entre les bornes a et b . Ces points sont situés aux positions :

$$\{x_k = a + kh, k \in [0, p]\} \quad \text{avec} \quad h = \frac{b-a}{p} \quad (5.6)$$

On a alors $\forall k \in [0, p] P(x_k) = f_k = f(x_k)$.

Des polynômes de degrés différents définissent des méthodes différentes aux performances différentes. Nous allons voir les plus courantes, c'est à dire les méthodes d'ordres les plus bas.

5.1.2 Méthode du rectangle ($p = 0$)

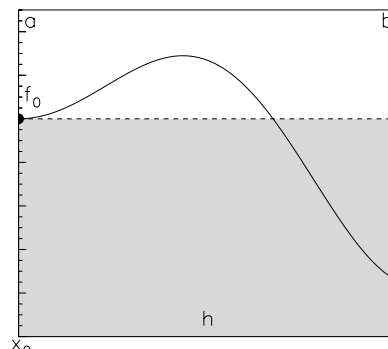
Cette méthode utilise le polynôme de degré le plus bas, à savoir le polynôme constant :

$$P_0(x) = f(a) = f_0. \quad (5.7)$$

L'intégrale approchée $\tilde{I}_0 = \int_a^b P_0(x) dx$ se calcule alors trivialement et donne :

$$\tilde{I}_0 = (b - a)f_0 \quad (5.8)$$

Il s'agit de l'aire du rectangle.



Cette intégrale numérique nécessite une unique évaluation de la fonction f (en $x_0 = a$) et représente donc ce qu'on peut faire de plus rapide.

L'erreur peut être estimée en utilisant les développements en série de Taylor ou le théorème des accroissements finis on trouve alors pour $h = b - a$:

$$\exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_0 = \frac{h^2}{2} f'(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_0| \leq \frac{h^2}{2} \text{Sup}_{[a,b]} (|f'|) \quad (5.9)$$

Démonstration : Pour calculer l'erreur, on peut utiliser le théorème des accroissements finis : $\forall x \in [a, b], \exists \xi \in [a, b]$ tel que :

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(\xi)$$

En remplaçant dans l'expression de l'intégrale et de l'erreur, on trouve :

$$\begin{aligned} \epsilon &= I - \tilde{I} \\ &= \int_a^b (f(x) - P_0(x)) dx = \int_a^b (f(x) - f(a)) dx \\ &= \int_a^b (x - a)f'(\xi) dx = f'(\xi) \int_0^{b-a} x dx \\ &= \frac{(b - a)^2}{2} f'(\xi) = \frac{h^2}{2} f'(\xi) \end{aligned}$$

L'erreur ϵ n'est pas connue car la valeur de $\xi \in [a, b]$ reste indéterminée. Cependant, on peut la majorer par la plus grande valeur de la dérivée sur le domaine considéré. Quelques remarques sur cette erreur :

- Cette méthode d'intégration est exacte pour toutes les fonctions f constantes (dans ce cas $\epsilon_0 = 0$ puisque qu'elles vérifient $f' = 0$). Dans le cas plus général cette méthode est d'autant plus précise que les variations de f sont faibles (f' petit).
- Plus le domaine $[a, b]$ est petit, plus l'erreur est faible. Cette erreur décroît en h^2 .

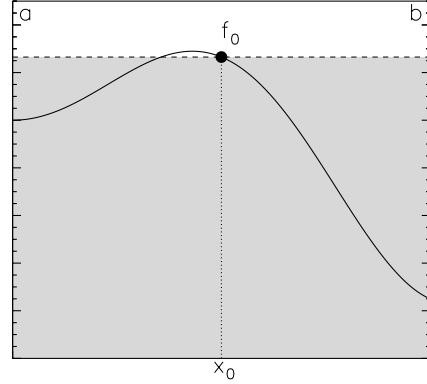
5.1.3 Méthode du point milieu ($p = 0$)

Cette méthode utilise également le polynôme constant pour approximer la fonction f . Cependant, elle exploite mieux les symétries du problème en choisissant la valeur milieu :

$$P_{0'}(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) = f_0. \quad (5.10)$$

L'intégrale approchée $\tilde{I}_{0'} = \int_a^b P_0(x)dx$ se calcule alors trivialement et donne :

$$\tilde{I}_{0'} = (b-a)f_0 \quad (5.11)$$



Il s'agit de l'aire du rectangle. Cette méthode nécessite une unique évaluation de la fonction f (en $x_0 = (a+b)/2$) et correspond donc aussi à ce qu'on peut faire de plus rapide.

L'erreur peut être estimée en utilisant les développements en série de Taylor, ou le théorème des accroissements finis. On trouve alors pour $h = b - a$:

$$\exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_{0'} = \frac{h^3}{24} f''(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_{0'}| \leq \frac{h^3}{24} \text{Sup}_{[a,b]} (|f''|) \quad (5.12)$$

Démonstration : Pour calculer l'erreur, on peut utiliser le théorème des accroissements finis au deuxième ordre : $\forall x \in [a, b], \exists \xi \in [a, b]$ tel que :

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + \left(x - \frac{a+b}{2}\right) f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 \frac{f''(\xi)}{2}$$

En remplaçant dans l'expression de l'intégrale et de l'erreur, on trouve :

$$\begin{aligned} \epsilon &= I - \tilde{I} \\ &= \int_a^b (f(x) - P_0(x)) dx = \int_a^b \left(f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) \right) dx \\ &= \int_a^b \left[\left(x - \frac{a+b}{2}\right) f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 \frac{f''(\xi)}{2} \right] dx \\ &= f'\left(\frac{a+b}{2}\right) \int_{-\frac{b-a}{2}}^{\frac{b-a}{2}} x dx + \frac{f''(\xi)}{2} \int_{-\frac{b-a}{2}}^{\frac{b-a}{2}} x^2 dx = 0 + \frac{f''(\xi)}{3} \left(\frac{b-a}{2}\right)^3 = \frac{h^3}{3} f''(\xi) \end{aligned}$$

L'erreur ϵ n'est pas connue car la valeur de $\xi \in [a, b]$ reste indéterminée. Cependant, on peut la majorer par la plus grande valeur de la dérivée seconde sur le domaine considéré. Quelques remarques sur cette erreur :

- Du fait des symétries, cette méthode d'intégration est exacte pour les fonctions f constante, mais aussi pour les fonctions affines (dans ce cas $\epsilon_{0'} = 0$ puisqu'elles vérifient $f'' = 0$).
- Dans le cas plus général, cette méthode est d'autant plus précise que les variations de f sont faibles (f'' petit).
- Plus le domaine $[a, b]$ est petit, plus l'erreur est faible. Cette erreur décroît en h^3 , c'est à dire plus vite que l'erreur de la méthode précédente : $\epsilon_{0'}/\epsilon_0 \propto h \rightarrow 0$. Ainsi, pour des domaines $[a, b]$ suffisamment petits, la méthode du point milieu est toujours plus précise que la méthode précédente.

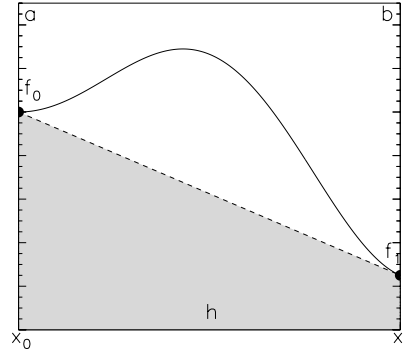
5.1.4 Méthode du trapèze ($p = 1$)

Pour approximer la fonction f , cette méthode utilise le polynôme d'ordre 1 (la droite) qui passe par $f_0 = f(a)$ et $f_1 = f(b)$:

$$P_1(x) = \frac{f_0 + f_1}{2} + \frac{f_1 - f_0}{b - a} \left(x - \frac{a + b}{2} \right) \quad (5.13)$$

L'intégrale approchée $\tilde{I}_1 = \int_a^b P_1(x)dx$ se calcule alors mathématiquement ou géométriquement et donne :

$$\tilde{I}_1 = (b - a) \frac{f_0 + f_1}{2} \quad (5.14)$$



Il s'agit de l'aire du trapèze. Cette méthode nécessite deux évaluations de la fonction f (en a et en b). Elle est donc en gros deux fois plus lente que les méthodes précédentes.

L'erreur peut être estimée en utilisant les développements en série de Taylor, ou le théorème des accroissements finis. On trouve alors¹ pour $h = b - a$:

$$\exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_1 = -\frac{h^3}{12} f''(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_1| \leq \frac{h^3}{12} \text{Sup}_{[a,b]} (|f''|) \quad (5.15)$$

L'erreur ϵ n'est pas connue car la valeur de $\xi \in [a, b]$ reste indéterminée. Cependant, on peut la majorer par la plus grande valeur de la dérivée seconde sur le domaine considéré. Les remarques sur l'erreur sont les mêmes que pour la méthode du point milieu. En précision, cette méthode est donc équivalente à celle du point milieu ($\epsilon_1 \approx \epsilon_0$), mais elle est deux fois plus lente.

5.1.5 Méthode de Simpson simple ($p = 2$)

Pour approximer la fonction f , cette méthode utilise le polynôme de degré 2 (la parabole) qui passe par les trois points $f_0 = f(a)$, $f_1 = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ et $f_2 = f(b)$:

$$P_2(x) = 2 \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{(x_2 - x_0)^2} (x - x_1)^2 + \frac{f_2 - f_0}{x_2 - x_0} (x - x_1) + f_1 \quad (5.16)$$

L'intégrale approchée $\tilde{I}_2 = \int_a^b P_2(x)dx$ se calcule alors simplement et donne :

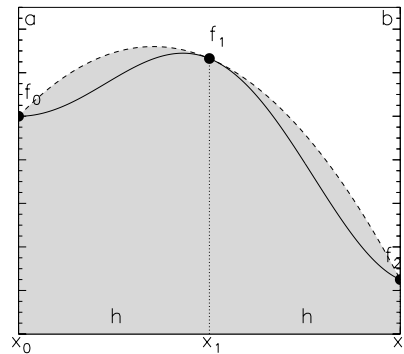
$$\tilde{I}_2 = (b - a) \frac{f_0 + 4f_1 + f_2}{6} \quad (5.17)$$

Cette méthode nécessite trois évaluations de la fonction f (en $x_0 = a$, $x_1 = (a + b)/2$ et $x_2 = b$). Elle est donc en gros 3 fois plus lente que les méthodes à 1 point.

L'erreur peut être estimée en utilisant les développements en série de Taylor, ou le théorème des accroissements finis.

On trouve alors² pour $h = (b - a)/2$:

$$\exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_2 = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_2| \leq \frac{h^5}{90} \text{Sup}_{[a,b]} (|f^{(4)}|) \quad (5.18)$$



1. En fait, le calcul commence à être un poil compliqué et est laissé à la curiosité du lecteur.
 2. Cette démonstration est aussi laissée au lecteur...

L'erreur ϵ n'est pas connue car la valeur de $\xi \in [a, b]$ reste indéterminée. Cependant, on peut la majorer par la plus grande valeur de la dérivée quatrième sur l'intervalle considéré. Quelques remarques sur cette erreur :

- Cette méthode d'intégration est exacte pour les fonctions f polynomiales d'ordre 3 (car elles vérifient $f^{(4)} = 0$), ce qui inclut en particulier les fonctions constantes, les fonctions affines, et les paraboles par exemple. Plus généralement elle est d'autant plus précise que les variations de f sont faibles ($f^{(4)}$ petit).
- Plus l'intervalle $[a, b]$ est petit, plus l'erreur est faible. Cette erreur décroît en h^5 lorsque h diminue, c'est à dire beaucoup plus rapidement que les méthodes précédentes : $\epsilon_2/\epsilon_0 \propto h^3 \rightarrow 0$, $\epsilon_2/\epsilon_0' \propto \epsilon_2/\epsilon_1 \propto h^2 \rightarrow 0$. Ainsi, pour des intervalles $[a, b]$ suffisamment petits, la méthode de Simpson est toujours plus précise que les méthodes précédentes.

5.1.6 Méthodes d'ordres plus élevés

Plus généralement, on peut construire des approximations en utilisant des polynômes d'ordre quelconque. Le polynôme d'ordre p passant par $p+1$ points régulièrement espacés entre a et b s'exprime en fonction des polynômes de Lagrange $L_k(x)$, $k \in [0, p]$:

$$P_p(x) = \sum_{k=0}^p f_k L_k(x) \quad \text{avec} \quad L_k(x) = \prod_{j=0, j \neq k}^p \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \quad (5.19)$$

L'intégrale approchée $\tilde{I} = \int_a^b P_p(x) dx$ peut alors se calculer et donne :

$$\tilde{I} = (b - a) \sum_{k=0}^p w_k f_k \quad \text{avec} \quad w_k = \frac{\int_a^b L_k(x) dx}{b - a} \quad (5.20)$$

Un telle méthode nécessite $p+1$ évaluations de la fonction f (en x_k , $k \in [0, p]$). Ainsi, plus le degré est élevé, plus la méthode est lente.

L'erreur peut aussi se calculer (mais ça devient franchement compliqué), et on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \text{si } p \text{ est impair :} & \quad \exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_p = \frac{h^{p+2}}{C_p} f^{(p+1)}(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_p| \leq \frac{h^{p+2}}{C_p} \text{Sup}_{[a,b]} \left(\left| f^{(p+1)} \right| \right) \\ \text{si } p \text{ est pair :} & \quad \exists \xi \in [a, b] \quad \epsilon_p = \frac{h^{p+3}}{C_p} f^{(p+2)}(\xi) \quad \text{c.a.d.} \quad |\epsilon_p| \leq \frac{h^{p+3}}{C_p} \text{Sup}_{[a,b]} \left(\left| f^{(p+2)} \right| \right) \end{aligned}$$

où C_p est un coefficient qui dépend de l'ordre du polynôme.

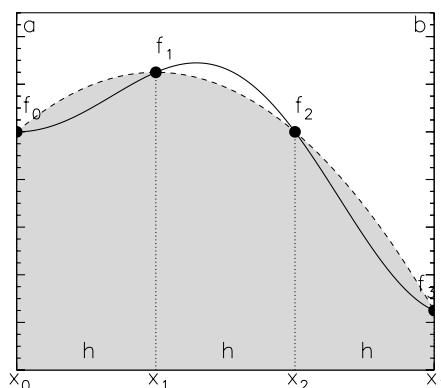
- Un telle méthode est exacte pour les polynômes de degré p , car ceux-ci vérifient $f^{(p+1)} = 0$ (et même en fait pour des polynômes de degré $p+1$ si p est pair). Sinon, elle est d'autant plus précise que la fonction varie peu sur le domaine $[a, b]$.
- Plus le domaine $[a, b]$ est petit, plus l'erreur est faible. Cette erreur décroît en h^{p+2} lorsque h diminue (et h^{p+3} si p est pair), c'est à dire beaucoup plus rapidement que les méthodes utilisant des polynômes de degré plus faible.

On trouve ainsi parfois référence aux méthodes suivantes :

– Méthode de Simpson 3/8 (degré $p = 3$) :

$$\tilde{I} = (b-a) \frac{f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3}{8}$$

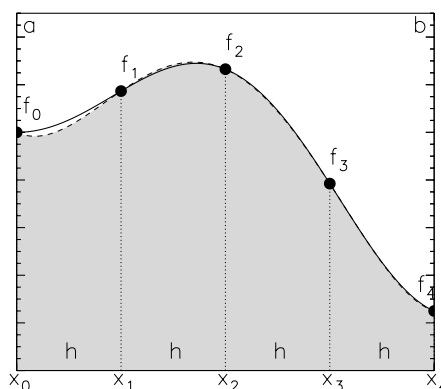
$$\epsilon = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$$



- Méthode de Boole (degré $p = 4$) :

$$\tilde{I} = (b-a) \frac{7f_0 + 12f_1 + 32f_2 + 12f_3 + 7f_4}{90}$$

$$\epsilon = -\frac{8}{945} h^7 f^{(6)}(\xi)$$



En pratique cependant, les coefficients deviennent de plus en plus grands lorsque l'ordre du polynôme augmente. De plus, à partir du degré $p = 7$, certains coefficients deviennent négatifs, ce qui se traduit par des polynômes fortement oscillants. Les différences entre des grands nombres posent des problèmes d'arrondi machine qui rendent très vite ces méthodes inutilisables. Elles ne sont donc jamais utilisées pour $p > 7$.

5.1.7 Bilan

Plus les méthodes de Newton-Cotes simples sont basées sur des polynômes de degré élevé, plus elles sont lentes et plus elles sont difficiles à coder, mais plus elles sont précises. Le plus souvent en pratique, le domaine total d'intégration $[a, b]$ est beaucoup trop grand et la fonction varie trop sur ce domaine pour que ces méthodes donnent des résultats satisfaisants. Elles ne sont donc quasiment jamais utilisées en tant que telles.

On subdivise donc le domaine total $[a, b]$ en un grand nombre de petits intervalles sur chacun desquels on peut appliquer avec succès les méthodes de Newton-Cotes simples. On parle alors de méthode de Newton-Cotes *composites*.

5.2 Lois de Newton-Cotes composites

5.2.1 Principe

L'idée est donc de découper le domaine total d'intégration $[a, b]$ en m intervalles. On approxime alors l'aire \tilde{I}_k , $k \in [0, m-1]$ de chaque intervalle par des méthodes de Newton-Cotes simples, et on en déduit une

approximation de l'aire totale par une simple somme :

$$\tilde{I} = \sum_{k=0}^{m-1} \tilde{I}_k \quad (5.21)$$

Lorsque m est suffisamment grand, la largeur $(b-a)/m$ des intervalles devient aussi petite que l'on veut, si bien que ces méthodes peuvent atteindre des précisions aussi grandes que nécessaire, sans pour autant se heurter au problème des polynômes de grand degré.

En utilisant sur chaque intervalle des méthodes de Newton-Cotes simples de degrés différents, on obtient des méthodes composites aux propriétés et aux performances différentes. Sur chaque intervalle, une méthode de degré $p+1$ évalue la fonction à intégrer en $p+1$ points, ce qui revient à le subdiviser en p sous-intervalles. Si on applique ce principe à m intervalles contigus, la méthode de Newton-Cotes composite définit $n = m * p$ sous-intervalles au total³ et nécessite l'évaluation de $n+1$ points. Plus ce nombre est élevé, plus la méthode est lente mais, en général, plus elle est précise. Les comparaisons de méthodes de différents degrés se feront donc à nombre total de points n commun, c'est à dire à rapidité équivalente. Les méthodes les plus précises seront les plus performantes.

Dans certains cas, ces m intervalles peuvent être espacés de manière non régulière pour mieux représenter une zone ou la fonction $f(x)$ varie beaucoup, mais dans cette partie, nous nous limiterons au cas d'intervalles réguliers.

5.2.2 Méthode des rectangles ($p = 0, n = m$)

La méthode des rectangles composite applique la méthode des rectangles simple ($p = 0$) sur chacun des m intervalles. Le nombre total de sous-intervalles est donc $n = m$. L'aire de chaque intervalle vaut :

$$\tilde{I}_{0,k} = (x_{k+1} - x_k) f_k = h f_k \quad (5.22)$$

Si bien que l'intégrale totale vaut :

$$\begin{aligned} \tilde{I}_0 &= h (f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1} + 0 \times f_n) \\ &= h \sum_{k=0}^{n-1} f_k \end{aligned} \quad (5.23)$$

Dans cette formule, tous les points ont le même coefficient (1), sauf le dernier point f_n qui n'est pas utilisé (coefficient 0).

L'erreur est simplement la somme de toutes les erreurs :

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= \sum_{k=0}^{n-1} \epsilon_{0,k} = \frac{h^2}{2} \sum_{k=0}^{n-1} f'(\xi_k) \\ &= \frac{h^2}{2} n f'(\xi) \\ |\epsilon_0| &\leq \frac{(b-a)^2}{2n} \text{Sup}_{[a,b]} (|f'|) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le fait que $h = (b-a)/n$ pour la dernière inégalité. A nouveau, cette méthode est exacte pour les fonctions constantes. Plus généralement, elle est d'autant plus précise que le nombre de points est

3. pour le cas particulier des méthode d'ordre 0 ($p = 0$), on a $n = m$.

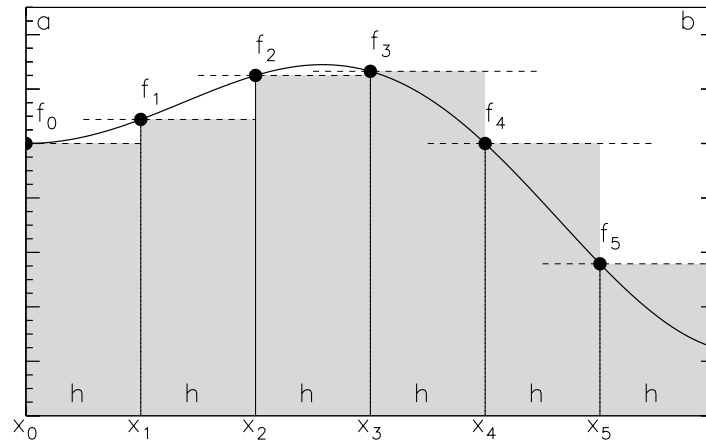


FIGURE 5.1 – Méthode composite des rectangles ($p = 0$) pour $m = 6$ intervalles (c'est à dire $n = 6$ sous-intervalles et $n + 1 = 7$ points au total).

grand :

$$\epsilon_0 = O\left(\frac{1}{n}\right) = O(h) \quad (5.24)$$

L'erreur décroît comme $1/n$. La méthode des rectangles est une **méthode d'ordre 1**.

5.2.3 Méthode des trapèzes ($p = 1, n = m$)

La méthode des trapèzes composite applique la méthode des trapèzes simple ($p = 1$) sur chacun des m intervalles. Le nombre total de sous-intervalles est donc à nouveau $n = m$. Chaque intégrale vaut :

$$\tilde{I}_{1,k} = (x_{k+1} - x_k) \frac{f_k + f_{k+1}}{2} \quad (5.25)$$

Si bien que l'intégrale totale vaut :

$$\begin{aligned} \tilde{I}_1 &= h \frac{f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{n-1} + f_n}{2} \\ &= h \left(\frac{f_0}{2} + \sum_{k=1}^{n-1} f_k + \frac{f_n}{2} \right) \end{aligned} \quad (5.26)$$

Dans cette formule, les points du bord du domaine ont des coefficients différents ($1/2$) de tous les points intérieurs (1).

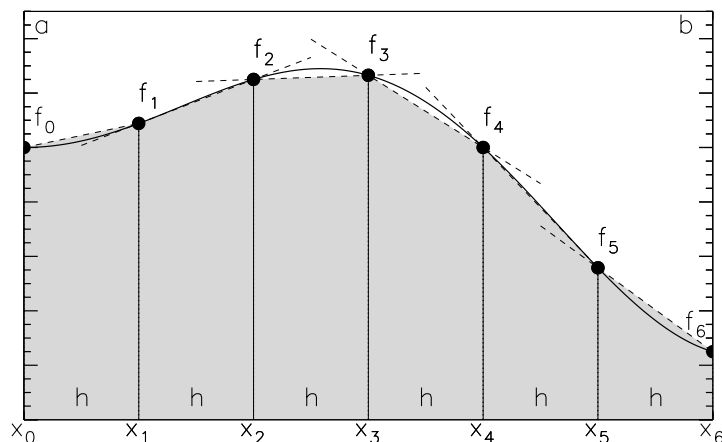


FIGURE 5.2 – Méthode composite des trapèzes ($p = 1$), pour $m = 6$ intervalles (c'est à dire $n = 6$ sous-intervalles et $n + 1 = 7$ points au total).

L'erreur est simplement la somme de toutes les erreurs :

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \epsilon_{1,0}/2 + \sum_{k=1}^{n-1} \epsilon_{1,k} + \epsilon_{1,n}/2 = -\frac{h^3}{12} \left(f''(\xi_0)/2 + \sum_{k=1}^{n-1} f''(\xi_k) + f''(\xi_n)/2 \right) \\ &= -\frac{h^3}{12} n f''(\xi) \\ |\epsilon_1| &\leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \text{Sup}_{[a,b]} (|f''|) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le fait que $h = (b-a)/n$. A nouveau, cette méthode est exacte pour les fonctions constantes et affines (et même les paraboles en fait). Plus généralement, elle est d'autant plus précise que le nombre de points est grand :

$$\boxed{\epsilon_1 = O\left(\frac{1}{n^2}\right) = O(h^2)} \quad (5.27)$$

L'erreur décroît comme $1/n^2$. La méthode des trapèzes est une **méthode d'ordre 2**.

5.2.4 Méthode de Simpson ($p = 2, n = 2m$)

La méthode de Simpson composite applique la méthode de Simpson simple ($p = 2$) sur chacun des m intervalles. Le nombre total de sous-intervalles est donc cette fois-ci $n = 2m$ (il est forcément pair et le nombre de points $n + 1$ est forcément impair!). Chaque intégrale vaut :

$$\tilde{I}_{2,k} = (x_{k+2} - x_k) \frac{f_k + 4f_{k+1} + f_{k+2}}{6} \quad (5.28)$$

Si bien que (pour un nombre d'intervalles n pair) l'intégrale totale vaut :

$$\begin{aligned} \tilde{I}_2 &= h \frac{f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n}{3} \\ &= \frac{h}{3} \left(f_0 + 4 \sum_{k=0}^{n/2-1} f_{2k+1} + 2 \sum_{k=1}^{n/2-1} f_{2k} + f_n \right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Dans ces formules, il y a 3 coefficients différents : $1/3$ pour les points du bord, $4/3$ pour les points internes impairs, et $2/3$ pour les points internes pairs.

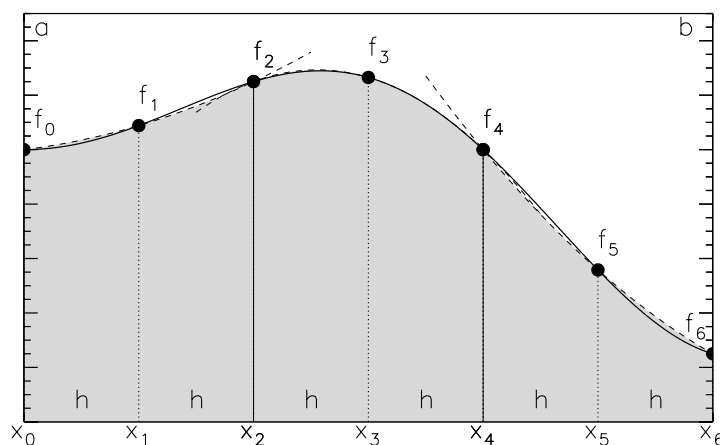


FIGURE 5.3 – Méthode composite de Simpson ($p = 2$) pour $m = 3$ intervalles (c'est à dire $n = 6$ sous-intervalles et $n + 1 = 7$ points au total).

À nouveau, l'erreur est simplement la somme de toutes les erreurs :

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= \dots \\ &= -\frac{h^5}{90} m f^{(4)}(\xi) \\ |\epsilon_2| &\leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} \text{Sup}_{[a,b]} (|f^{(4)}|) \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le fait que $h = (b-a)/n$ et $n = 2m$. Plus le nombre de points est grand, plus la méthode est précise :

$$\epsilon_2 = O\left(\frac{1}{n^4}\right) = O(h^4) \quad (5.30)$$

L'erreur décroît comme $1/n^4$. La méthode de Simpson est une **méthode d'ordre 4**.

5.2.5 Généralités

Bien évidemment, on peut construire des méthodes composites d'ordres plus élevés.

- Les méthodes utilisant des polynômes de degré plus élevé (tout en restant <8) sont plus précises (à nombre de points égal). Plus précisément, l'erreur associée à l'utilisation d'un polynôme de degré p décroît en $n^{-(p+1)}$ si p est impair et $n^{-(p+2)}$ si p est pair. Autrement dit, **l'ordre des méthodes associées est $p + 1$ si p est impair et $p + 2$ si p est pair.**
- La précision de toutes les méthodes de Newton-Cote augmente avec le nombre de points utilisés.
- Numériquement, chaque addition génère une petite erreur d'arrondi machine (l'erreur relative est de l'ordre de 10^{-17} pour des réels doubles précision). Lorsque l'on somme beaucoup de nombres, les erreurs de chaque addition s'ajoutent et l'erreur relative totale augmente. Dans le cas des méthodes de Newton-Cotes composites, une erreur due aux arrondis machine s'ajoute donc aux erreurs de troncations étudiées précédemment. Et cette erreur augmente avec le nombre de points. En pratique, on ne peut donc pas augmenter infiniment le nombre d'intervalles des méthodes de Newton-Cotes, et il existe un nombre de points particulier qui permet une précision optimale.

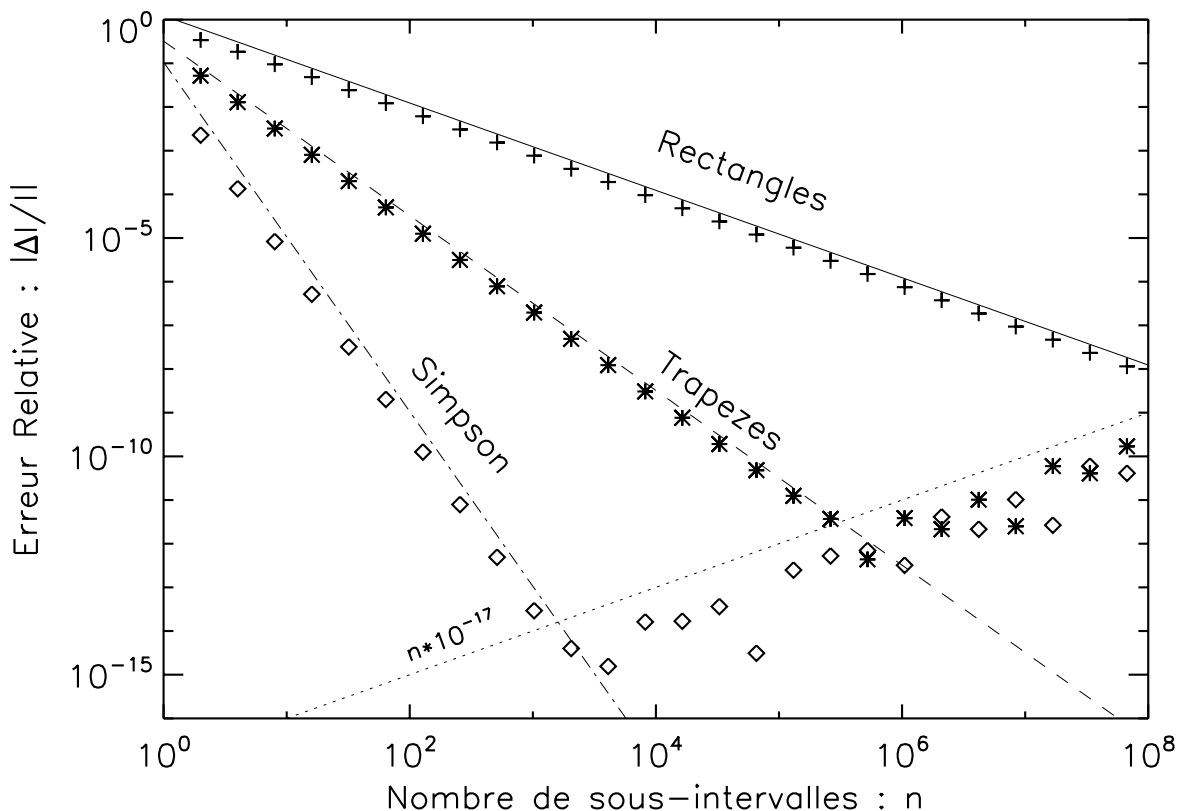


FIGURE 5.4 – Erreur des différentes méthodes de Newton-Cotes en fonction du nombre d'intervalles utilisés pour intégrer la fonction $f(x) = \sin x$ sur l'intervalle $[0, \pi/2]$. Les points correspondent aux erreurs mesurées. Les droites décroissantes sont les erreurs maximales théoriques associées. La droite en pointillés correspond aux erreurs d'arrondi machine.

5.3 Exercices

- Définir en C une fonction simple à intégrer sur un intervalle $[a, b]$, par exemple $f(x) = \sin x$ sur $[0, \pi/2]$, $f(x) = e^{-x}$ sur $[0, 1]$, ou autre (choisir une fonction dont on connaît la valeur exacte de l'intégrale).
- En utilisant la méthode des rectangles et un nombre d'intervalles n donnés, **intégrer numériquement** cette fonction par la méthode des rectangles. Essayer plusieurs valeurs de n et observer l'évolution de l'**erreur mesurée**.
- Intégrer cette même fonction avec les méthodes des trapèzes et de Simpson (on pourra par exemple définir une fonction pour chaque méthode). Observer qualitativement l'évolution de l'erreur mesurée pour les différentes méthodes.
- Réaliser une boucle et enregistrer dans un fichier l'erreur des trois méthodes pour toutes les valeurs du nombre d'intervalles n entre 1 et 10^8 (on pourra multiplier n par 2 à chaque itération pour limiter le temps de calcul et la taille du fichier). Visualiser le résultat en échelle log-log avec gnuplot.
- Après avoir calculé **analytiquement** le maximum théorique des dérivées successives de f sur l'intervalle considéré, tracer également la majoration **théorique** de l'erreur pour ces trois méthodes. Commenter.
- Recommencer avec $f(x) = \sin x$ sur l'intervalle $[0, \pi]$, ou encore $f(x) = \sin^2 x$ sur l'intervalle $[-\pi, \pi]$. Idem pour $f(x) = \sqrt{x}$ sur $[0, 1]$. Interpréter...
- Intégrer la fonction f avec la méthode de Gauss (voir section suivante) et comparer l'erreur à celle des méthodes de Newton-Cotes composites.

5.4 Méthode de Gauss-Legendre

5.4.1 Principe

Nous avons vu que les méthodes de Newton-Cotes simples pouvaient s'écrire $\tilde{I} = (b-a) \sum_{k=0}^n w_k f_k$ où la fonction $f(x)$ est évaluée en $n+1$ points x_k , $k \in [0, n]$. Avec ces méthodes, les points étaient régulièrement espacés sur le domaine et on approximait la fonction $f(x)$ pour un polynôme de degré n qui coïncidait avec f en ces $n+1$ points.

L'idée de la quadrature de Gauss-Legendre est de généraliser cette méthode pour des points espacés **de manière non-régulière** sur l'intervalle d'intégration. Si on ne fixe pas a priori les positions des $n+1$ points, cela laisse $n+1$ degrés de libertés supplémentaires et on peut choisir les positions de ces points de manière à obtenir une méthode optimale.

Quelle que soit la position des $n+1$ points, la méthode qui consiste à calculer l'intégrale du polynôme de degré n passant par ces points est exacte pour tous les polynômes de degré $d \leq n$. On peut donc utiliser les $n+1$ degrés de liberté qui correspondent à la position des points et calculer leur positions de manière à ce que la valeur de l'intégrale soit exacte également pour tous les polynômes de $n+1$ degrés de plus, c'est à dire pour tous les polynôme de degré $d \leq 2n+1$ ⁴. L'erreur de cette méthode est alors beaucoup plus petite que celle des méthodes de Newton-Cotes simples utilisant le même nombre de points.

Afin de trouver l'expression des méthodes de Gauss pour différents nombres de points, on cherche à déterminer les positions des x_k et les coefficients w_k associés de manière à ce que cette méthode soit exacte pour les polynômes $1, x, x^2, \dots$ et x^{2n+1} .

Le plus souvent, la méthode de Gauss-Legendre est présentée sur un intervalle $[-1, 1]$. Une intégration sur un intervalle plus général $[a, b]$ peut néanmoins s'obtenir par le changement de variable : $x \rightarrow \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x$.

5.4.2 Méthode à 1 point ($n = 0$)

À l'ordre le plus bas ($n+1 = 1$ point), on cherche la position de l'unique point x_0 ainsi que l'unique coefficient associé w_0 de manière à ce que la méthode soit exacte pour tous les polynômes de degré $2n+1 = 1$. En l'occurrence, il faut ici qu'elle soit exacte pour les polynômes $P_0 = 1$ et $P_1 = x$.

- Pour le polynôme constant : $P_0 = 1$, l'intégrale exacte est $I_0 = \int_{-1}^1 1 dx = 2$. Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^0 w_k P_0(x_k) = 2 \sum_{k=0}^0 w_k 1 = 2w_0 \quad (5.31)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne directement : $w_0 = 1$.

- Pour le polynôme de degré 1 : $P_1 = x$, l'intégrale exacte est $I_1 = \int_{-1}^1 x dx = 0$. Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I}_1 = 2 \sum_{k=0}^0 w_k P_1(x_k) = 2 \sum_{k=0}^0 w_k x_k = 2w_0 x_0 \quad (5.32)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne directement : $w_0 x_0 = 0$, soit $x_0 = 0$.

L'unique point de quadrature correspond au point milieu et

$$\tilde{I}_0 = 2f(0) \quad (5.33)$$

La méthode de Gauss-Legendre à un point correspond en fait à la méthode du point milieu (Newton-Cotes).

4. Cela revient à dire que l'intégrale de tous les polynômes de degré n à $2n+1$ qui coïncident avec $f(x)$ aux $n+1$ points de cette quadrature possèdent la même intégrale. L'intégrale du polynôme de degré n étant exacte, elle l'est aussi pour tous ces autres polynômes de degré plus élevé.

5.4.3 Méthode à 2 points ($n = 1$)

À l'ordre suivant ($n + 1 = 2$ points), on cherche la position des deux points x_0 et x_1 ainsi que les deux coefficients associés w_0 et w_1 de manière à ce que la méthode soit exacte pour tous les polynômes de degré $2n + 1 = 3$. En l'occurrence, il faut ici qu'elle soit exacte pour les polynômes $P_0 = 1$, $P_1 = x$, $P_2 = x^2$ et $P_3 = x^3$.

- Pour le polynôme constant : $P_0 = 1$, l'intégrale exacte est $I_0 = \int_{-1}^1 1 \, dx = 2$. Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^1 w_k P_0(x_k) = 2 \sum_{k=0}^1 w_k 1 = 2(w_0 + w_1) \quad (5.34)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne : $w_0 + w_1 = 1$.

- Pour le polynôme de degré 1 : $P_1 = x$, l'intégrale exacte est $I_1 = \int_{-1}^1 x \, dx = 0$. Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^1 w_k P_1(x_k) = 2 \sum_{k=0}^1 w_k x_k = 2(w_0 x_0 + w_1 x_1) \quad (5.35)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne : $w_0 x_0 + w_1 x_1 = 0$.

- Pour le polynôme de degré 2 : $P_2 = x^2$, l'intégrale exacte est $I_2 = \int_{-1}^1 x^2 \, dx = 2/3$ Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^1 w_k P_2(x_k) = 2 \sum_{k=0}^1 w_k x_k^2 = 2(w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2) \quad (5.36)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne : $w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 = 1/3$.

- Pour le polynôme de degré 3 : $P_3 = x^3$, l'intégrale exacte est $I_3 = \int_{-1}^1 x^3 \, dx = 0$. Et l'intégrale par quadrature s'écrit :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^1 w_k P_3(x_k) = 2 \sum_{k=0}^1 w_k x_k^3 = 2(w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3) \quad (5.37)$$

si bien que $\tilde{I} = I$ donne : $w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 = 0$.

Un peu de travail pour résoudre ce système donne finalement :

$$w_0 = w_1 = 1/2, \quad x_0 = -1/\sqrt{3}, \quad x_1 = +1/\sqrt{3} \quad (5.38)$$

La méthode de Gauss à deux points s'écrit donc :

$$\tilde{I} = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3}) \quad (5.39)$$

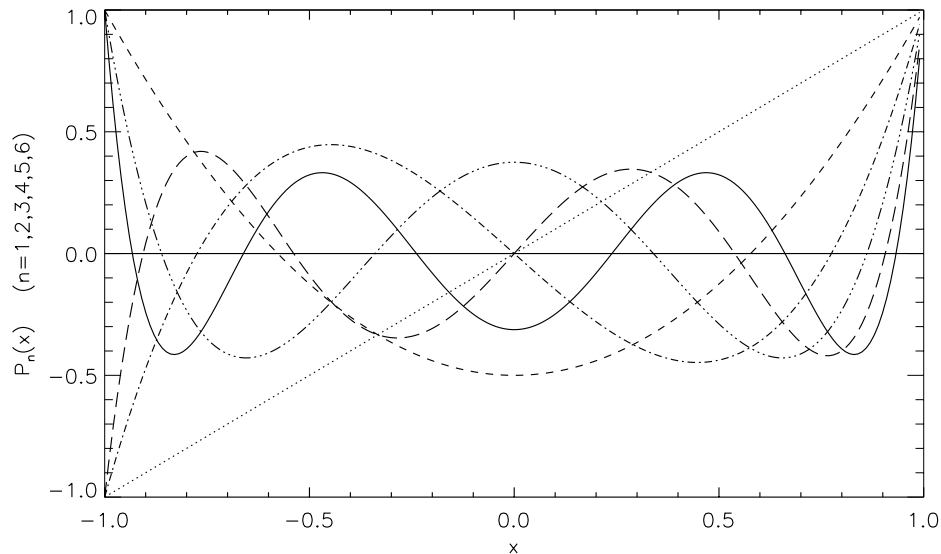
5.4.4 Généralisation

Principe

Cette méthode peut être appliquée à un nombre de points $n + 1$ quelconque. On peut alors montrer qu'une bonne approximation de l'intégrale à calculer est :

$$\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^n w_k f_k \quad (5.40)$$

où :


 FIGURE 5.5 – Polynômes de Legendre \mathcal{P}_n de degrés $n = 1$ à 6 et leurs racines.

- les positions x_k des points de quadrature sont les racines du polynôme de Legendre \mathcal{P}_{n+1} de degré $n + 1$. Les polynômes de Legendre peuvent se calculer par récurrence avec la relation (voir Fig. 5.5) :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_0 &= 1 \\ \mathcal{P}_1 &= x \\ \mathcal{P}_n &= \frac{(2n-1)x\mathcal{P}_{n-1}(x) - (n-1)\mathcal{P}_{n-2}(x)}{n} \end{aligned}$$

Leurs racines n'ont pas toujours d'expression analytique, et le plus souvent, elles doivent être calculées numériquement.

- Les $n + 1$ coefficients associés aux points de quadrature valent respectivement :

$$\forall k \in [0, n] \quad w_k = \frac{1}{(1-x_k^2)\mathcal{P}'_{n+1}(x_k)^2} = \frac{(1-x_k^2)}{(n+1)^2\mathcal{P}_n^2(x_k)} \quad (5.41)$$

On peut montrer que $\forall n > 0, \sum_{k=0}^n w_k = 1$.

On trouve facilement ces valeurs dans des livres ou sur internet. Quelques exemples sont donnés dans la table 5.1.

Intégrale sur un intervalle quelconque

Dans le cas où l'intégrale n'est pas calculée sur $[-1, 1]$, mais sur un domaine quelconque $[a, b]$, alors la méthode est la même avec :

$$\tilde{I} = (b-a) \sum_{k=0}^n w_k f_k \quad (5.42)$$

où les poids w_k sont les mêmes que précédemment et la fonction f est évaluée aux points de quadrature suivants : $f_k = f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x_k\right)$ (où les x_k sont les points de quadrature racines des polynômes de Legendre calculés sur $[-1, 1]$).

| $n + 1$ | $2w_k$ | x_k |
|---------|--|--|
| 1 | 2 | 0 |
| 2 | 1, 1 | $-1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}$ |
| 3 | $5/9, 8/9, 5/9$ | $-\sqrt{3/5}, 0, \sqrt{3/5}$ |
| 4 | $\frac{18-\sqrt{30}}{36}, \frac{18+\sqrt{30}}{36},$ $\frac{18+\sqrt{30}}{36}, \frac{18-\sqrt{30}}{36}$ | $-\sqrt{(3+2\sqrt{6/5})/7}, -\sqrt{(3-2\sqrt{6/5})/7},$ $\sqrt{(3-2\sqrt{6/5})/7}, \sqrt{(3+2\sqrt{6/5})/7}$ |
| 5 | $\frac{322-13\sqrt{70}}{900}, \frac{322+13\sqrt{70}}{900}, \frac{128}{255},$ $\frac{322+13\sqrt{70}}{900}, \frac{322-13\sqrt{70}}{900}$ | $-\frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{10/7}}, -\frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{10/7}}, 0,$ $\frac{1}{3}\sqrt{5-2\sqrt{10/7}}, \frac{1}{3}\sqrt{5+2\sqrt{10/7}}$ |
| ... | | ... |

TABLE 5.1 – Position x_k et coefficients w_k est points associés pour la méthode de Gauss-Legendre à $n + 1$ points : $\tilde{I} = 2 \sum_{k=0}^n w_k f(x_k)$.

Erreur

Contrairement aux méthodes de Newton-Cotes qui décroissent en $1/n^{d+1}$ ou $1/n^{d+2}$ (où $n + 1$ est le nombre de points où $f(x)$ est évaluée et d le degré du polynôme utilisé), les méthodes de Gauss décroissent exponentiellement avec d , ce qui s'avère extrêmement rapide. De plus, on peut montrer que les coefficients w_k sont toujours positifs, si bien qu'il n'y a aucune soustraction de grands nombres comme il peut y avoir pour les méthodes de Newton-Cotes de degré $d > 8$. Les méthodes de Gauss peuvent donc être utilisées avec un nombre de points arbitrairement grand. Néanmoins, la mise en place de ces méthodes est beaucoup plus complexe et il n'est pas facile de changer le nombre de points une fois le programme écrit. En général, un nombre de points de 4 à 6 est largement suffisant pour la plupart des applications.

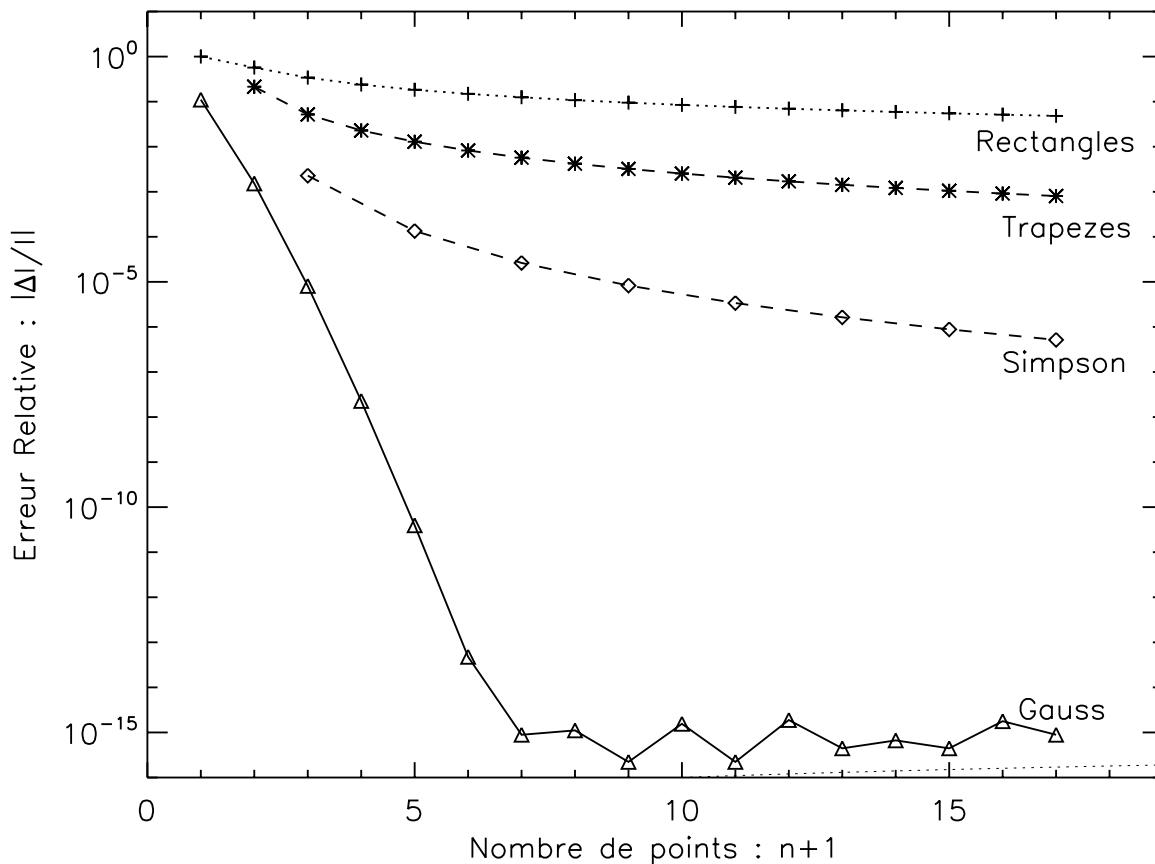


FIGURE 5.6 – Erreur de la méthode de Gauss en fonction du nombre de utilisés pour intégrer fonction $f(x) = \sin x$ sur l'intervalle $[0, \pi/2]$. Les erreurs de quelques méthodes de Newton-Cotes composites sont rappelées pour comparaison. La droite en pointillés tout en bas correspond aux erreurs d'arrondi machine.