TP 2 : Intégration numérique

Il est en général impossible de calculer l'intégrale d'une fonction sur un intervalle (dès qu'on ne connait pas d'intégrale de la fonction et que les méthodes classiques, intégration par parties ou changement de variables, ne s'appliquent pas). Par exemple, on ne peut pas calculer de manière exacte $\int_0^1 \exp(-x^2)\,\mathrm{d}x$.

C'est pour cela qu'on met en œuvre des méthodes numériques. Plus généralement, d'ailleurs, les outils de calcul numérique (calculatrices, ordinateurs) auront forcément recours à ces méthodes numériques.

Étant donné une fonction *f: [a, b]* $f : [a,b] \longrightarrow \mathbf{R}$ assez régulière (au moins continue, voire $\mathscr{C}^1$ ou plus au besoin), on notera $I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ son intégrale, et on cherche des méthodes permettant d'approcher la valeur de $I(f)$ à l'aide des valeurs de f en un nombre fini de points $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$. On appelle ces méthodes des **méthodes de quadrature**, ou d'intégration numérique. La qualité d'une méthode de quadrature se mesure à son **degré de précision (ou degré d'exactitude)** qui est le degré maximal d'un polynôme pour lequel la méthode de quadrature donne la valeur exacte de l'intégrale.

1. Formules de quadrature de type interpolation

Il semble naturel d'approcher f par une fonction plus facile à intégrer, par exemple un polynôme, et de contrôler l'erreur entre les intégrales par l'erreur entre les fonctions. Rappelons donc (Feuille de TP 5) qu'étant donné $n+1$ points $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$, il existe un unique polynôme Π_n de degré inférieur ou égale à n tel que $\Pi_n(x_i) = f(x_i)$. De plus, on a une forme explicite pour Π_n :

$$\Pi_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x) \quad \text{avec} \quad L_i(x) = \prod_{\substack{0\leq j\leq n \\ j\neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j},$$

et un contrôle de l'erreur : si f est $\mathscr{C}^{n+1}$, notons $M_{n+1} = \max_{a\leq x\leq b} |f^{(n+1)}(x)|$. Alors pour tout $x \in [a,b]$,

$$\left|f(x) - \Pi_n(x)\right| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\left|\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right|.$$

Ainsi, si $I_n(f) = \int_a^b \Pi_n(x)\,\mathrm{d}x$, on aura

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b L_i(x)\,\mathrm{d}x, \tag{1}$$

$$\text{et} \quad \left|I(f) - I_n(f)\right| \leq \|f - \Pi_n\|_1 \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int_a^b \left|\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right| \mathrm{d}x. \tag{2}$$

La formule (1) est intéressante algorithmiquement : on peut calculer les coefficients $\alpha_i = \int_a^b L_i(x)\,\mathrm{d}x$ en fonction des points d'interpolation $x_0, x_1, \ldots, x_i$, indépendamment de f, puis calculer très simplement l'approximation de $I(f)$ comme une somme pondérée des $f(x_i)$ par les α_i.

1. (Degré de précision) Pourquoi la méthode de quadrature donnée par la formule $I_n(f) = \int_a^b \Pi_n(x)\,\mathrm{d}x$ est-elle de degré de précision (au moins) n ?

Nous allons maintenant étudier quelques cas particuliers, pour de petites valeurs de n.

2. (Formules du rectangle)
(a) On prend $n = 0$ et on choisit $x_0 = a$.
Exprimer explicitement Π_0, puis $I_0(f)$, en fonction de a, b et $f(a)$. Calculer l'erreur donnée par la formule (2) dans ce cas. Montrer, à l'aide d'un exemple, que cette méthode est de degré de précision exactement 0.
(b) On prend toujours $n = 0$ mais on choisit maintenant $x_0 = \frac{a+b}{2}$ (variante dite du « point-milieu »).
Exprimer explicitement Π_0, puis $I_0(f)$, en fonction de a, b et $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$. À l'aide d'un développement de Taylor-Lagrange au point $x_0 = \frac{a+b}{2}$, montrer que

$$|I(f) - I_0(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{24} M_2 .$$

En déduire que cette méthode est de degré de précision 1.

3. (Formule du trapèze) On prend $n = 1$ et on choisit $x_0 = a$ et $x_1 = b$.
Exprimer explicitement Π_1, puis $I_1(f)$, en fonction de a, b, $f(a)$ et $f(b)$. Calculer l'erreur donnée par la formule (2). Vérifier que cette méthode est de degré de précision exactement 1.

4. (Formule de Simpson) On prend $n = 2$ et on choisit $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ et $x_2 = b$.
Exprimer explicitement Π_2, puis $I_2(f)$, en fonction de a, b, $f(a)$, $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ et $f(b)$. Calculer l'erreur donnée par la formule (2).
On peut en fait faire mieux et montrer que si f est $\mathscr{C}^4$, alors

$$|I(f) - I_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} M_4 .$$

5. (Illustration avec Scilab)
(a) Écrire une fonction Scilab qui prend en entrée un réel $b > 0$ et applique les quatre (il y en a deux dans la question **2.**) méthodes précédentes au calcul de l'intégrale de la fonction $f(x) = \exp(x)$ sur l'intervalle $[0, b]$.
La fonction doit :
- tracer la fonction f et ses quatre polynômes approximants sur un même graphe ;
- calculer et afficher) la valeur « exacte » et les quatre valeurs approchées de $I(f)$, ainsi que l'erreur commise par chaque méthode.

(b) Commenter les résultats. En particulier, justifier les noms des trois premières méthodes.
(c) Comparer les erreurs observées avec les bornes théoriques calculées dans les exercices précédents, par exemple pour $b = 1$.

2. MÉTHODES COMPOSITES

Plutôt que de continuer à augmenter le nombre de points d'interpolation, donc le degré du polynôme, ce qui rend les calculs plus compliqués et augmente les erreurs numériques (à partir de $n = 9$, certains coefficients α_i deviennent négatifs, ce qui augmente l'instabilité numérique), on préfère généralement mettre en œuvre des méthodes dites composites : on choisit un entier n, on coupe l'intervalle de départ $[a, b]$ en n sous-intervalles égaux de bornes successives $a = a_0 < a_1 < \cdots < a_n = b$ définies par la formule $a_k = a + (b-a)\frac{k}{n}$, puis on applique une méthode de type interpolation sur chacun des sous-intervalles $[a_{k-1}, a_k]$.

Comme l'intégrale de f sur $[a, b]$ est égale à la somme des intégrales de f sur tous les sous-intervalles, on aura une approximation en faisant la somme des n approximations sur les sous-intervalles. L'erreur totale sera quant à elle majorée par la somme des n erreurs.

6. (Illustration Scilab à n fixé) Écrire une fonction qui prend $b > 0$ et n en entrée, et :
- représente graphiquement la fonction $f(x) = \exp(x)$ et les quatre approximations obtenues en découpant l'intervalle $[0, b]$ en n sous-intervalles, puis en appliquant chacune des quatre méthodes précédentes sur chaque sous-intervalle ;
- calcule la valeur exacte et les quatre valeurs approchées calculées de cette façon, ainsi que l'erreur commise par chaque méthode.

Remarque : Pour $n = 1$, cette fonction doit donner exactement la même chose que celle de la question **5.**

7. (Étude des vitesses de convergence)
(a) Écrire une fonction Scilab qui prend $b > 0$ et N en entrée, calcule les erreurs d'approximation pour les méthodes composites de calcul de l'intégrale de $f(x) = \exp(x)$ sur l'intervalle $[0, b]$ associées aux quatre formules précédentes, pour n variant de 1 à N données par l'utilisateur, et représente graphiquement les résultats (c'est-à-dire les fonctions $n \longmapsto$ erreur de la méthode en découpant en n sous-intervalles).
(b) En ajoutant une représentation en échelle logarithmique, mettre en évidence, à b fixé, une décroissance de l'erreur d'interpolation en $\frac{C}{n^k}$, avec k entier, pour chaque méthode.
Faire une conjecture (à partir du graphe) sur l'entier k pour chaque méthode.
(c) Confirmer la conjecture en calculant les bornes de l'erreur d'estimation pour chaque méthode (en utilisant les bornes obtenues dans la première partie sur chaque sous-intervalle).