

Chapitre I

Intégration Numérique

Pour ses calculs en physique et en astronomie, Newton est le premier à utiliser des formules de quadrature, suivi en cela par ses successeurs anglais (Cotes 1711, Simpson 1743). Euler, dans son gigantesque traité (*Inst. Calculi Integralis* 1768, 1769, 1770, Opera XI-XIii), met toute son ingéniosité à rechercher des primitives analytiques. Cependant, de nombreuses intégrales résistent encore et toujours à l’envahisseur (exemples $\int \frac{e^x}{x} dx$, $\int \frac{dx}{\log x}$); de nombreux calculs en astronomie (perturbations des orbites planétaires) contraignent Gauss (1814) à intensifier la théorie des formules de quadrature. Les programmes qui ont tourné sur les premiers ordinateurs furent en grande partie les calculs d’intégrales: ces problèmes sont les plus faciles à programmer. Pour cette même raison, nous commençons par ce sujet.

Problème. Etant donné une fonction continue sur un intervalle borné

$$f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}, \quad (0.1)$$

on cherche à calculer l’intégrale

$$\int_a^b f(x) dx. \quad (0.2)$$

Bibliographie sur ce chapitre

P.J. Davis & P. Rabinowitz (1975): *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, New York.

G. Evans (1993): *Practical Numerical Integration*. John Wiley & Sons. [MA 65/336]

V.I. Krylov (1959): *Priblizhennoe Vychislenie Integralov*. Goz. Izd. Fiz.-Mat. Lit., Moscow. Traduction anglaise: *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962. [MA 65/185]

R. Piessens, E. de Doncker-Kapenga, C.W. Überhuber & D.K. Kahaner (1983): QUADPACK. *A Subroutine Package for Automatic Integration*. Springer Series in Comput. Math., vol. 1. [MA 65/210]

A.H. Stroud (1974): *Numerical quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations*. Springer. [MA 65/89]

I.1 Formules de quadrature et leur ordre

La plupart des algorithmes numériques procèdent comme suit: on subdivise $[a, b]$ en plusieurs sous-intervalles ($a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N = b$) et on utilise le fait que

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx. \quad (1.1)$$

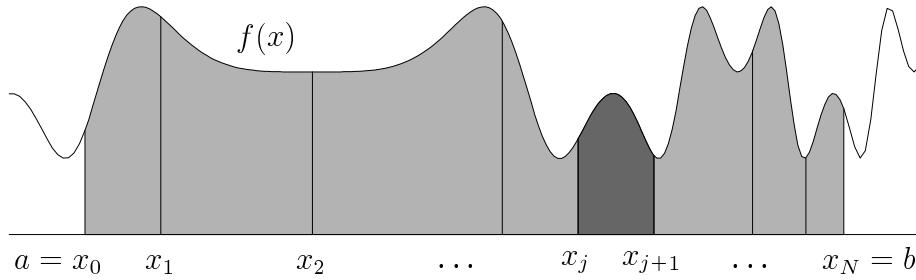


FIG. I.1: Une division d'un intervalle en sous-intervalles

De cette manière, on est ramené au calcul de plusieurs intégrales pour lesquelles la longueur de l'intervalle d'intégration est relativement petite. Prenons une de ces intégrales et notons la longueur de l'intervalle par $h_j := x_{j+1} - x_j$. Un changement de variable nous donne alors

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx = h_j \int_0^1 f(x_j + th_j) dt.$$

Notons enfin $g(t) := f(x_j + th_j)$. Il reste alors à calculer une approximation de

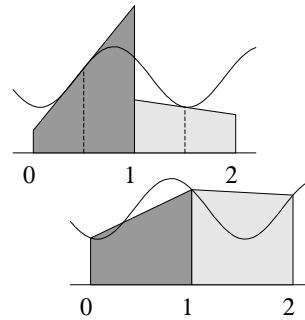
$$\int_0^1 g(t) dt. \quad (1.2)$$

Exemples. 1. La *formule du point milieu*

$$\int_0^1 g(t) dt \approx g(1/2).$$

2. La *formule du trapèze*

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{2}(g(0) + g(1)).$$



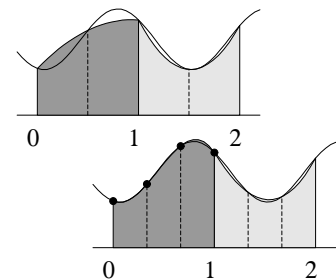
Ces deux formules (point milieu et trapèze) sont exactes si $g(t)$ est un polynôme de degré ≤ 1 .

3. On obtient la *formule de Simpson* si l'on passe une parabole (polynôme de degré 2) par les trois points $(0, g(0))$, $(1/2, g(1/2))$, $(1, g(1))$ et si l'on approche l'intégrale (1.2) par l'aire sous la parabole:

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{6}(g(0) + 4g(1/2) + g(1)).$$

4. La "pulcherrima et utilissima regula" de *Newton* (degré 3) :

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{8}(g(0) + 3g(1/3) + 3g(2/3) + g(1)).$$



5. En généralisant cette idée (passer un polynôme de degré $s - 1$ par les s points équidistants $(i/(s-1), g(i/(s-1)))$, $i = 0, \dots, s-1$), on obtient les *formules de Newton-Cotes* (Newton 1676, Cotes 1711). Pour $s \leq 7$ les coefficients de ces formules sont donnés dans le tableau I.1. Leur dessin en figure I.2 montre que les poids "explorent" au-delà de $s = 10$. Si on veut augmenter la précision, il vaut mieux raffiner les subdivisions en (1.1) qu'augmenter le degré s .

Définition 1.1 Une formule de quadrature à s étages est donnée par

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \sum_{i=1}^s b_i g(c_i). \quad (1.3)$$

Les c_i sont les nœuds de la formule de quadrature et les b_i en sont les poids.

TAB. I.1: Formules de Newton-Cotes

s	ordre	poids b_i							nom
2	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						trapèze
3	4	$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$					Simpson
4	4	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$				Newton
5	6	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$			Boole
6	6	$\frac{19}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{50}{288}$	$\frac{75}{288}$	$\frac{19}{288}$		—
7	8	$\frac{41}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{272}{840}$	$\frac{27}{840}$	$\frac{216}{840}$	$\frac{41}{840}$	Weddle

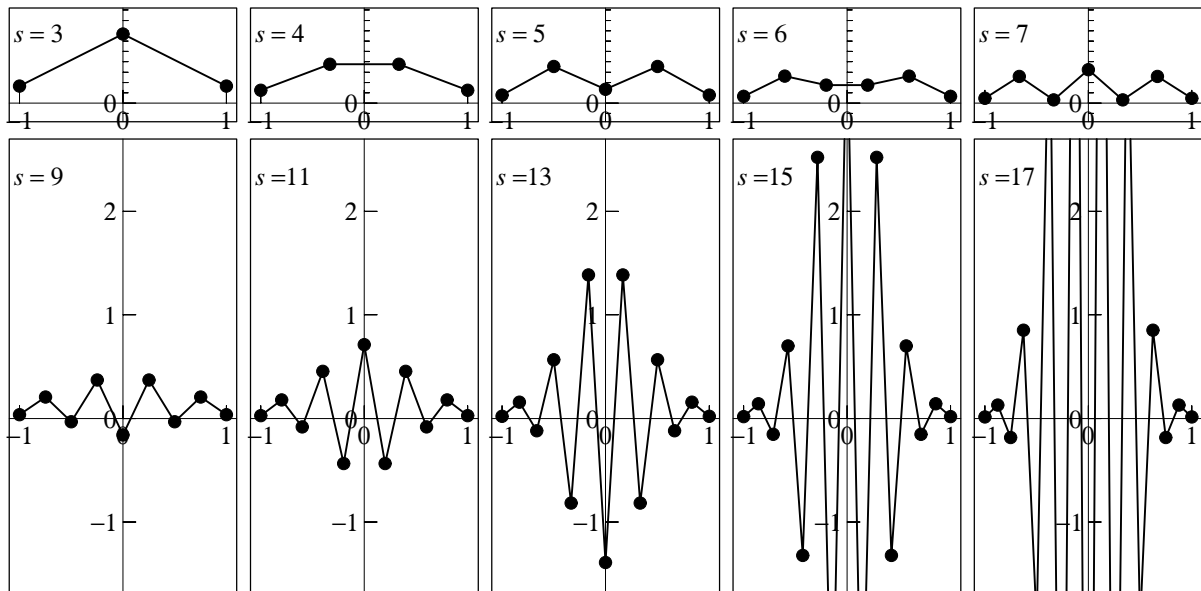


FIG. I.2: Dessin des poids des formules de Newton-Cotes

If there are four ordinates at equal intervals, let A be the sum of the first and the fourth, B the sum of the second and third, and R the interval between the first and the fourth ; then ... the area between the first and the fourth ordinates will be $(A + 3B)R/8$.

(I. Newton, *Methodus*, publ. 1711, cité d'après H.H. Goldstine, p. 76)

Définition 1.2 On dit que l'ordre de la formule de quadrature (1.3) est p , si la formule est exacte pour tous les polynômes de degré $\leq p - 1$, c.-à-d.,

$$\int_0^1 g(t) dt = \sum_{i=1}^s b_i g(c_i) \quad \text{pour} \quad \deg g \leq p - 1. \quad (1.4)$$

On voit que les formules du point milieu et du trapèze sont d'ordre 2. La formule de Newton-Cotes à s étages a un ordre $p \geq s$ (par définition).

Théorème 1.3 La formule de quadrature (1.3) a un ordre p si et seulement si

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{q-1} = \frac{1}{q} \quad \text{pour} \quad q = 1, 2, \dots, p. \quad (1.5)$$

Démonstration. La nécessité de (1.5) est une conséquence de (1.4) si l'on pose $g(t) = t^{q-1}$. Pour en montrer la suffisance, on utilise le fait qu'un polynôme de degré $p-1$ est une combinaison linéaire de $1, t, \dots, t^{p-1}$ et que l'intégrale $\int_0^1 g(t) dt$ ainsi que l'expression $\sum_{i=1}^s b_i g(c_i)$ sont linéaires en g . \square

En fixant les nœuds c_1, \dots, c_s (distincts), la condition (1.5) avec $p = s$ est un système linéaire pour b_1, \dots, b_s

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ c_1 & c_2 & \dots & c_s \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_1^{s-1} & c_2^{s-1} & \dots & c_s^{s-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \\ \vdots \\ 1/s \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

Comme la matrice dans (1.6) est inversible (matrice de Vandermonde), la résolution de ce système nous donne une formule de quadrature d'ordre $p \geq s$.

Si l'on vérifie les conditions (1.5) pour la formule de Simpson, on fait une observation intéressante. Par définition, il est évident que la condition (1.5) est satisfaite pour $q = 1, 2, 3$, mais on remarque qu'elle satisfait aussi (1.5) pour $q = 4$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{6} \cdot 0^3 + \frac{4}{6} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{1}{6} \cdot 1^3 &= \frac{1}{4} \\ \frac{1}{6} \cdot 0^4 + \frac{4}{6} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^4 + \frac{1}{6} \cdot 1^4 &= \frac{5}{24} \neq \frac{1}{5}. \end{aligned}$$

Elle est donc d'ordre 4. Par conséquent, elle n'est pas seulement exacte pour des polynômes de degré 2 mais aussi pour des polynômes de degré 3. Ceci est une propriété générale d'une formule symétrique.

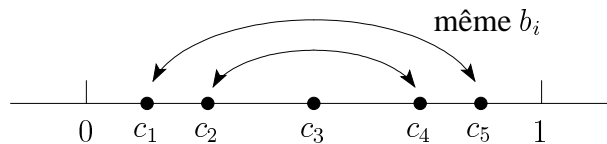


FIG. I.3: Coefficients et nœuds d'une formule de quadrature symétrique

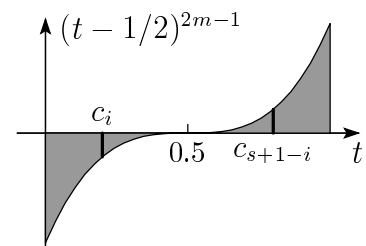
Théorème 1.4 Une formule de quadrature symétrique (c.-à-d. $c_i = 1 - c_{s+1-i}$, $b_i = b_{s+1-i}$ pour tout i ; voir la fig. I.3) a toujours un ordre pair. C.-à-d., si elle est exacte pour les polynômes de degré $\leq 2m - 2$, elle est automatiquement exacte pour les polynômes de degré $2m - 1$.

Démonstration. Chaque polynôme de degré $2m - 1$ peut être écrit sous la forme

$$g(t) = C \cdot (t - 1/2)^{2m-1} + g_1(t)$$

où $g_1(t)$ est de degré $\leq 2m - 2$. Il suffit alors de montrer qu'une formule symétrique est exacte pour $(t - 1/2)^{2m-1}$. A cause de la symétrie de cette fonction, la valeur exacte vaut

$$\int_0^1 (t - 1/2)^{2m-1} dt = 0.$$



Pour une formule de quadrature symétrique on a $b_i(c_i - 1/2)^{2m-1} + b_{s+1-i}(c_{s+1-i} - 1/2)^{2m-1} = 0$. Donc, l'approximation numérique de $\int_0^1 (t - 1/2)^{2m-1} dt$ est également zéro. \square

I.2 Etude de l'erreur

Afin d'étudier l'erreur commise en approchant l'intégrale par une formule de quadrature, commençons par une *expérience numérique* :

Prenons une fonction $f(x)$, définie sur $[a, b]$, divisons l'intervalle en plusieurs sous-intervalles équidistants ($h = (b - a)/N$) et appliquons une formule de quadrature du paragraphe précédent. Ensuite, étudions l'erreur (en échelle logarithmique)

$$err = \int_a^b f(x) dx - \sum_{j=0}^{N-1} h \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h) \tag{2.1}$$

en fonction de fe (nombre d'évaluations de la fonction $f(x)$; on a $fe = N \cdot (s - 1) + 1$ pour Newton-Cotes). Le nombre fe représente une mesure pour le travail (proportionnel au temps de calcul sur un ordinateur). La fig. I.4 montre les résultats (pour $N = 1, 2, 4, 8, 16, 32, \dots$) obtenus par les formules de Newton-Cotes pour les deux intégrales :

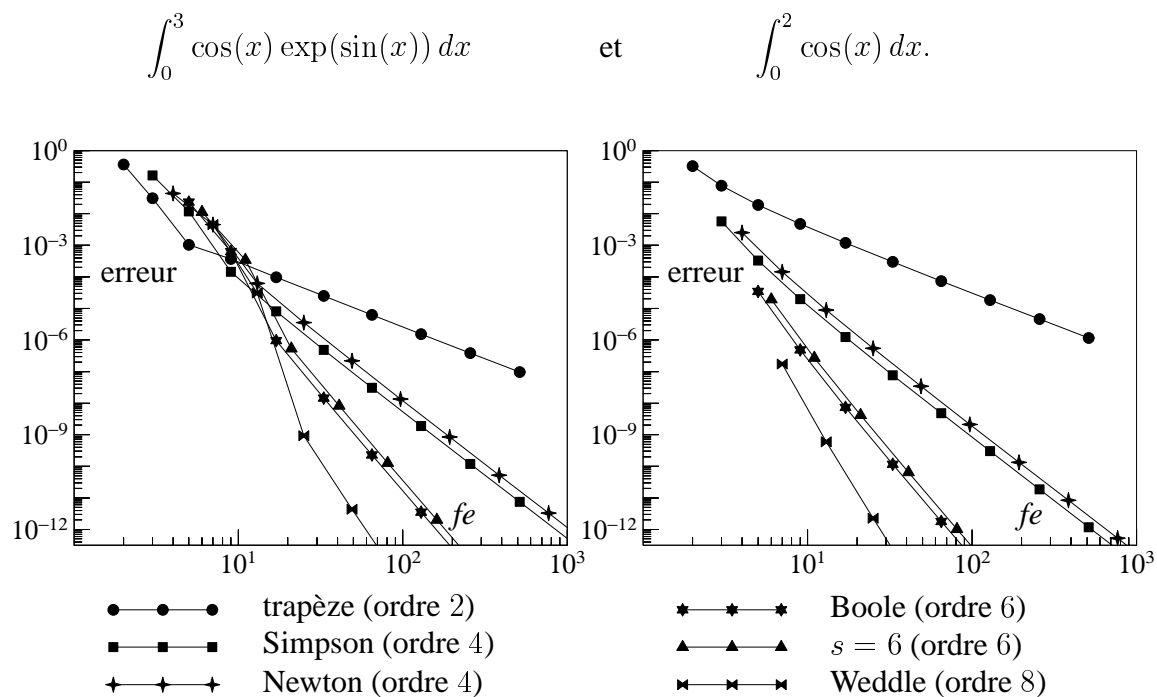


FIG. I.4: L'erreur en fonction du travail fe pour les formules de Newton-Cotes

En étudiant les résultats de la fig. I.4, nous constatons que :

- le nombre de chiffres exacts, donné par $-\log_{10}(err)$, dépend linéairement de $\log_{10}(fe)$;
- la pente de chaque droite est $-p$ (où p est l'ordre de la formule);
- pour un travail équivalent, les formules avec un ordre élevé ont une meilleure précision.

Explication des résultats de la fig. I.4.

Etudions d'abord l'erreur faite sur un sous-intervalle de longueur h

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx - h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) \\ &= h \left(\int_0^1 f(x_0 + th) dt - \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) \right). \end{aligned} \tag{2.2}$$

En supposant f suffisamment différentiable, on peut remplacer $f(x_0 + th)$ et $f(x_0 + c_i h)$ par les séries de Taylor (développées autour de x_0), et on obtient ainsi

$$\begin{aligned} E(f, x_0, h) &= \sum_{q \geq 0} \frac{h^{q+1}}{q!} \left(\int_0^1 t^q dt - \sum_{i=1}^s b_i c_i^q \right) f^{(q)}(x_0) \\ &= \frac{h^{p+1}}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) f^{(p)}(x_0) + \mathcal{O}(h^{p+2}) \end{aligned} \quad (2.3)$$

(ici, on a bien supposé que la formule de quadrature ait l'ordre p mais pas l'ordre $p+1$). La constante

$$C = \frac{1}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) \quad (2.4)$$

s'appelle *constante de l'erreur*. Supposons que h soit petit de manière à ce que le terme $\mathcal{O}(h^{p+2})$ dans (2.3) soit négligeable par rapport au terme $Ch^{p+1}f^{(p)}(x_0)$, alors on obtient

$$err = \sum_{j=0}^{N-1} E(f, x_j, h) \approx Ch^p \sum_{j=0}^{N-1} h f^{(p)}(x_j) \approx Ch^p \int_a^b f^{(p)}(x) dx = Ch^p (f^{(p-1)}(b) - f^{(p-1)}(a)).$$

Cette formule nous permet de mieux comprendre les résultats de la fig. I.4. Comme $err \approx C_1 \cdot h^p$ et $fe \approx C_2/h$, nous avons

$$\log_{10}(err) \approx \log_{10}(C_1) + p \cdot \log_{10}(h) \approx Const - p \cdot \log_{10}(fe).$$

Ceci montre la dépendance linéaire entre les quantités $\log_{10}(err)$ et $\log_{10}(fe)$, et aussi le fait que la pente soit de $-p$.

Estimation rigoureuse de l'erreur.

Notre but suivant est de trouver une formule exacte de l'erreur d'une formule de quadrature. Une telle estimation nous permettra de démontrer des théorèmes de convergence et assurera une certaine précision du résultat numérique.

Théorème 2.1 *Considérons une formule de quadrature d'ordre p et un entier k satisfaisant $k \leq p$. Si $f : [x_0, x_0 + h] \rightarrow \mathbb{R}$ est k fois continûment différentiable, l'erreur (2.2) vérifie*

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 N_k(\tau) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \quad (2.5)$$

où $N_k(\tau)$, le noyau de Peano, est donné par

$$N_k(\tau) = \frac{(1-\tau)^k}{k!} - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \quad \text{où} \quad (\sigma)_+^{k-1} := \begin{cases} (\sigma)^{k-1} & \text{si } \sigma > 0, \\ 0 & \text{si } \sigma \leq 0. \end{cases}$$

Démonstration. Nous introduisons la série de Taylor avec reste¹

$$f(x_0 + th) = \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(th)^j}{j!} f^{(j)}(x_0) + h^k \int_0^t \frac{(t-\tau)^{k-1}}{(k-1)!} f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau \quad (2.6)$$

dans la formule (2.2) pour $E(f, x_0, h)$. En utilisant

$$\int_0^t (t-\tau)^{k-1} g(\tau) d\tau = \int_0^1 (t-\tau)_+^{k-1} g(\tau) d\tau$$

¹voir le paragraphe III.7 du livre de E. Hairer & G. Wanner (1995), *Analysis by Its History*. Undergraduate Texts in Mathematics, Springer.

et le fait que la partie polynomiale de (2.6) ne donne pas de contribution à l'erreur (à cause de $p \geq k$), nous obtenons

$$E(f, x_0, h) = h^{k+1} \int_0^1 \left(\int_0^1 \frac{(t - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} dt - \sum_{i=1}^s b_i \frac{(c_i - \tau)_+^{k-1}}{(k-1)!} \right) f^{(k)}(x_0 + \tau h) d\tau.$$

Une évaluation de l'intégrale intérieure donne le résultat. □

Théorème 2.2 (Propriétés du noyau de Peano) *Considérons une formule de quadrature d'ordre p et un nombre k satisfaisant $1 \leq k \leq p$. Alors, on a:*

- a) $N'_k(\tau) = -N_{k-1}(\tau)$ pour $k \geq 2$ (pour $\tau \neq c_i$ si $k = 2$);
- b) $N_k(1) = 0$ pour $k \geq 1$ si $c_i \leq 1$ ($i = 1, \dots, s$);
- c) $N_k(0) = 0$ pour $k \geq 2$ si $c_i \geq 0$ ($i = 1, \dots, s$);
- d) $\int_0^1 N_p(\tau) d\tau = \frac{1}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) = C$ (constante de l'erreur (2.4));
- e) $N_1(\tau)$ est linéaire par morceaux, de pente -1 et avec des sauts de hauteur b_i aux points c_i ($i = 1, \dots, s$). □

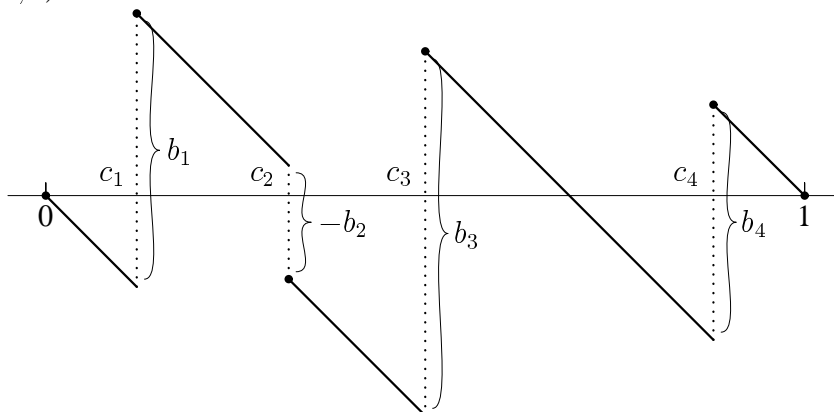


FIG. I.5: Le noyau de Peano $N_1(\tau)$ d'une formule de quadrature

Les noyaux de Peano pour la formule du point milieu sont

$$N_1(\tau) = \begin{cases} -\tau & \text{si } \tau < 1/2 \\ 1 - \tau & \text{si } \tau \geq 1/2 \end{cases} \quad N_2(\tau) = \begin{cases} \tau^2/2 & \text{si } \tau \leq 1/2 \\ (1 - \tau)^2/2 & \text{si } \tau \geq 1/2 \end{cases}$$

(voir la fig. I.6). Pour la formule de Newton-Cotes ($s = 5$), ils sont dessinés dans la fig. I.7.

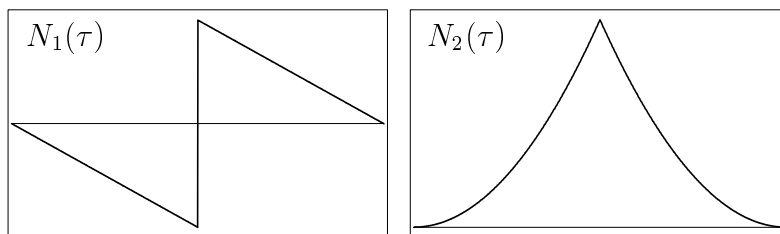
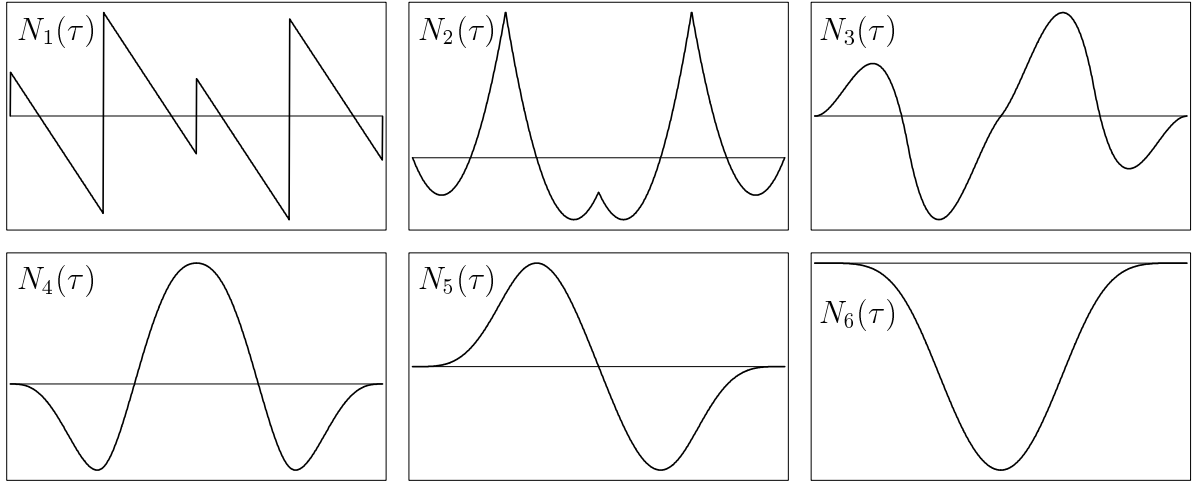


FIG. I.6: Noyaux de Peano pour la formule du point milieu

Grâce au résultat du théorème précédent, on peut facilement estimer l'erreur pour l'intervalle entier $[a, b]$. Pour une division arbitraire (équidistante ou non; $h_j = x_{j+1} - x_j$), notons l'erreur par

$$err = \int_a^b f(x) dx - \sum_{j=0}^{N-1} h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j). \tag{2.7}$$

FIG. I.7: Noyaux de Peano pour la formule de Newton-Cotes avec $s = 5$

Théorème 2.3 Soit $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ k fois continûment différentiable et soit l'ordre de la formule de quadrature égal à p ($p \geq k$). Alors, l'erreur (2.7) admet l'estimation

$$|err| \leq h^k \cdot (b - a) \cdot \int_0^1 |N_k(\tau)| d\tau \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)| \quad (2.8)$$

où $h = \max_j h_j$.

Démonstration. La formule (2.5) donne

$$\begin{aligned} |E(f, x_0, h)| &\leq h^{k+1} \int_0^1 |N_k(\tau)| \cdot |f^{(k)}(x_0 + \tau h)| d\tau \\ &\leq h^{k+1} \int_0^1 |N_k(\tau)| d\tau \cdot \max_{x \in [x_0, x_0+h]} |f^{(k)}(x)|. \end{aligned}$$

Comme l'erreur (2.7) est la somme des erreurs sur les sous-intervalles de la division, on obtient

$$\begin{aligned} |err| &\leq \sum_{j=0}^{N-1} |E(f, x_j, h_j)| \leq \sum_{j=0}^{N-1} \underbrace{h_j^{k+1}}_{\leq h^k \cdot h_j} \cdot \int_0^1 |N_k(\tau)| d\tau \cdot \underbrace{\max_{x \in [x_j, x_{j+1}]} |f^{(k)}(x)|}_{\leq \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)|} \\ &\leq h^k \cdot (b - a) \cdot \int_0^1 |N_k(\tau)| d\tau \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{(k)}(x)| \end{aligned}$$

ce qui montre l'assertion (2.8), car $\sum_{j=0}^{N-1} h_j = b - a$. □

Exemples. Pour la formule du point milieu, on a

$$|err| \leq h^2 \cdot (b - a) \cdot \frac{1}{24} \cdot \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|;$$

pour la formule du trapèze

$$|err| \leq h^2 \cdot (b - a) \cdot \frac{1}{12} \cdot \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|;$$

pour la formule de Simpson

$$|err| \leq h^4 \cdot (b - a) \cdot \frac{1}{2880} \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|;$$

pour la formule de Newton-Cotes ($s = 5$)

$$|err| \leq h^6 \cdot (b - a) \cdot \frac{1}{1935360} \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{(6)}(x)|.$$

Le calcul de $\int_0^1 |N_p(\tau)| d\tau$ pour ces formules n'est pas difficile. Considérons par exemple la formule de Newton-Cotes ($s = 5$). On constate que $N_6(\tau)$ ne change pas de signe sur $[0, 1]$ (voir fig. I.7) et on utilise la propriété (d) du théorème 2.2. Ceci donne

$$\int_0^1 |N_6(\tau)| d\tau = \left| \int_0^1 N_6(\tau) d\tau \right| = \frac{1}{6!} \left| \frac{1}{7} - \left(\frac{32}{90} \left(\frac{1}{4} \right)^6 + \frac{12}{90} \left(\frac{1}{2} \right)^6 + \frac{32}{90} \left(\frac{3}{4} \right)^6 + \frac{7}{90} 1^6 \right) \right| = \frac{1}{1935360}.$$

I.3 Formules d'un ordre supérieur

Aber Gauss hat in den Göttinger Commentarien gezeigt, dass man durch schickliche Wahl der Abscissen, für welche die Ordinaten berechnet werden, den Grad der Näherung auf das Doppelte treiben kann ; ... Die grosse Einfachheit und Eleganz der Gaussischen Resultate, lässt einen einfachen Weg vermuten. (Jacobi 1826, *Crelle J.* 1, p. 302)

Si l'on fixe les nœuds c_1, \dots, c_s (distincts), il existe une formule de quadrature (b_i, c_i) unique, ayant un ordre $p \geq s$. On obtient les poids b_i soit par la résolution du système linéaire (1.6), soit par la formule de l'exercice 1.

Question. Y a-t-il un choix des c_i permettant d'avoir un ordre supérieur?

Théorème 3.1 Soit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ une formule de quadrature d'ordre $p \geq s$ et soit

$$M(t) = (t - c_1) \cdot \dots \cdot (t - c_s). \quad (3.1)$$

Alors, l'ordre est $\geq s + m$ si et seulement si

$$\int_0^1 M(t)g(t) dt = 0 \quad \text{pour tout polynôme } g(t) \text{ de degré } \leq m - 1. \quad (3.2)$$

Démonstration. Soit $f(t)$ un polynôme de degré $\leq s + m - 1$. L'idée, due à Jacobi (1826), est de diviser $f(t)$ par $M(t)$ et d'écrire $f(t)$ sous la forme

$$f(t) = M(t)g(t) + r(t)$$

où $\deg r \leq s - 1$ et $\deg g \leq m - 1$. Alors, l'intégrale exacte et l'approximation numérique satisfont

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(t) dt &= \int_0^1 M(t)g(t) dt + \int_0^1 r(t) dt \\ \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) &= \sum_{i=1}^s b_i \underbrace{M(c_i)}_{=0} g(c_i) + \sum_{i=1}^s b_i r(c_i). \end{aligned}$$

Comme la formule de quadrature est exacte pour $r(t)$ (l'ordre est $\geq s$ par hypothèse), elle est exacte pour $f(t)$ si et seulement si $\int_0^1 M(t)g(t) dt = 0$. \square

Exemple 3.2 Pour qu'une formule de quadrature à $s = 3$ étages ait un ordre ≥ 4 , il faut que

$$0 = \int_0^1 (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) dt = \frac{1}{4} - (c_1 + c_2 + c_3)\frac{1}{3} + (c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3)\frac{1}{2} - c_1c_2c_3,$$

ce qui est équivalent à

$$c_3 = \frac{1/4 - (c_1 + c_2)/3 + c_1c_2/2}{1/3 - (c_1 + c_2)/2 + c_1c_2}.$$

Exemple 3.3 Continuons l'étude de formules de quadrature à $s = 3$ étages et essayons de déterminer les c_1, c_2, c_3 pour que l'ordre soit $p = 6$. Par le théorème 3.1, il faut que

$$\begin{aligned} c_1c_2c_3 - \frac{1}{2}(c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3) + \frac{1}{3}(c_1 + c_2 + c_3) &= \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2}c_1c_2c_3 - \frac{1}{3}(c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3) + \frac{1}{4}(c_1 + c_2 + c_3) &= \frac{1}{5} \\ \frac{1}{3}c_1c_2c_3 - \frac{1}{4}(c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3) + \frac{1}{5}(c_1 + c_2 + c_3) &= \frac{1}{6} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Ce système est non linéaire en c_1, c_2, c_3 et paraît difficile à résoudre. Par contre, il est linéaire en $\sigma_1 = c_1 + c_2 + c_3, \sigma_2 = c_1c_2 + c_1c_3 + c_2c_3$ et $\sigma_3 = c_1c_2c_3$, qui sont les coefficients du polynôme

$$M(t) = (t - c_1)(t - c_2)(t - c_3) = t^3 - \sigma_1t^2 + \sigma_2t - \sigma_3.$$

En résolvant le système (3.3) pour $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, on obtient $\sigma_1 = 3/2, \sigma_2 = 3/5$ et $\sigma_3 = 1/20$, et donc

$$M(t) = t^3 - \frac{3}{2}t^2 + \frac{3}{5}t - \frac{1}{20} = \left(t - \frac{1}{2}\right)\left(t - \frac{5 - \sqrt{15}}{10}\right)\left(t - \frac{5 + \sqrt{15}}{10}\right).$$

Par chance, le polynôme $M(t)$ ne possède que des racines réelles. Elles sont toutes dans l'intervalle $(0, 1)$, ce que nous convient. Avec les poids b_i , obtenues par le système linéaire (1.6), nous avons donc trouvé une formule de quadrature d'ordre $p = 6$ avec seulement $s = 3$ étages:

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{5}{18}g\left(\frac{5 - \sqrt{15}}{10}\right) + \frac{8}{18}g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{18}g\left(\frac{5 + \sqrt{15}}{10}\right).$$

Théorème 3.4 Si p est l'ordre d'une formule de quadrature à s étages, alors

$$p \leq 2s. \quad (3.4)$$

Démonstration. Supposons, par l'absurde, que l'ordre satisfasse $p \geq 2s + 1$. Alors, l'intégrale dans (3.2) est nulle pour tout polynôme $g(t)$ de degré $\leq s$. Ceci contredit le fait que

$$\int_0^1 M(t)M(t) dt = \int_0^1 (t - c_1)^2 \cdot \dots \cdot (t - c_s)^2 dt > 0. \quad \square$$

I.4 Polynômes orthogonaux de Legendre

Pour construire une formule de quadrature d'ordre $2s$ avec $s = 4, 5, \dots$, on peut en principe faire le même calcul que dans l'exemple 3.3. Toutefois, l'approche avec les polynômes de Legendre simplifie les calculs, fournit des formules simples pour $M(t)$ et donne beaucoup de compréhension pour les formules de quadrature d'un ordre optimal.

Pour rendre les formules plus simples (et symétriques), nous faisons le changement de variable $\tau = 2t - 1$ qui transforme l'intervalle $[0, 1]$ pour t en l'intervalle $[-1, 1]$ pour τ .

Problème. Trouver, pour chaque entier positif k , un polynôme $P_k(\tau)$ de degré k tel que

$$\int_{-1}^1 P_k(\tau)g(\tau) d\tau = 0 \quad \text{si } \deg g \leq k - 1. \quad (4.1)$$

On sait que les fonctions X_n et Y_n , introduites dans l'analyse par Legendre, sont d'un très-grand secours dans plusieurs théories importantes, en particulier dans la théorie de l'attraction des sphéroïdes et dans celle de la figure des planètes ; ...

(O. Bonnet, *J.d.math.* vol. 17, 1852, p. 265)

Ces polynômes ont été introduits en 1785 par Legendre et sont d'une importance dépassant largement les formules de quadrature (voir citation). On les appelle *polynômes orthogonaux* car $\langle P_k, P_j \rangle = 0$ pour $k \neq j$, où

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(\tau)g(\tau) d\tau$$

est un produit scalaire sur l'espace vectoriel des polynômes à coefficients réels. Le polynôme $P_s(2t - 1)$ jouera le rôle de $M(t)$ dans les théorème 3.1 pour les formules de quadrature d'ordre $p = 2s$.

Théorème 4.1 (formule de Rodrigues) *Le polynômes $P_k(\tau)$, défini par*

$$P_k(\tau) = \frac{1}{2^k \cdot k!} \frac{d^k}{d\tau^k} \left((\tau^2 - 1)^k \right), \quad (4.2)$$

satisfait la condition (4.1). La constante (de normalisation) est choisie pour avoir $P_k(1) = 1$.

Démonstration. Soit $g(\tau)$ un polynôme de degré $\leq k - 1$. Il suffit de montrer que le polynôme, défini par (4.2), satisfait $\langle P_k, g \rangle = 0$. Plusieurs intégrations par parties donnent

$$\begin{aligned} \langle P_k, g \rangle &= C_k \int_{-1}^1 \frac{d^k}{d\tau^k} \left((\tau^2 - 1)^k \right) \cdot g(\tau) d\tau \\ &= C_k \underbrace{\frac{d^{k-1}}{d\tau^{k-1}} \left((\tau^2 - 1)^k \right) \cdot g(\tau) \Big|_{-1}^1}_{=0} - C_k \int_{-1}^1 \frac{d^{k-1}}{d\tau^{k-1}} \left((\tau^2 - 1)^k \right) \cdot g'(\tau) d\tau \\ &= \dots = (-1)^k \cdot C_k \int_{-1}^1 (\tau^2 - 1)^k \cdot g^{(k)}(\tau) d\tau = 0, \end{aligned}$$

car $g^{(k)}(\tau) = 0$, ce qui démontre l'affirmation (4.1).

En considérant la série de Taylor de $f(\tau) = (\tau - 1)^k g(\tau)$ autour de $\tau = 1$, on voit que $f^{(k)}(1)/k! = g(1)$. Ceci nous permet d'évaluer la dérivée dans (4.2) au point $\tau = 1$. \square

Les premiers de ces polynômes sont

$$\begin{aligned} P_0(\tau) &= 1, & P_1(\tau) &= \tau, & P_2(\tau) &= \frac{3}{2}\tau^2 - \frac{1}{2}, & P_3(\tau) &= \frac{5}{2}\tau^3 - \frac{3}{2}\tau \\ P_4(\tau) &= \frac{35}{8}\tau^4 - \frac{30}{8}\tau^2 + \frac{3}{8}, & P_5(\tau) &= \frac{63}{8}\tau^5 - \frac{70}{8}\tau^3 + \frac{15}{8}\tau. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ils sont dessinés dans la fig. I.8 et sont alternativement des fonctions paires et impaires :

$$\begin{aligned} P_k(\tau) &= P_k(-\tau) & \text{si } k \text{ est pair} \\ P_k(\tau) &= -P_k(-\tau) & \text{si } k \text{ est impair.} \end{aligned} \quad (4.4)$$

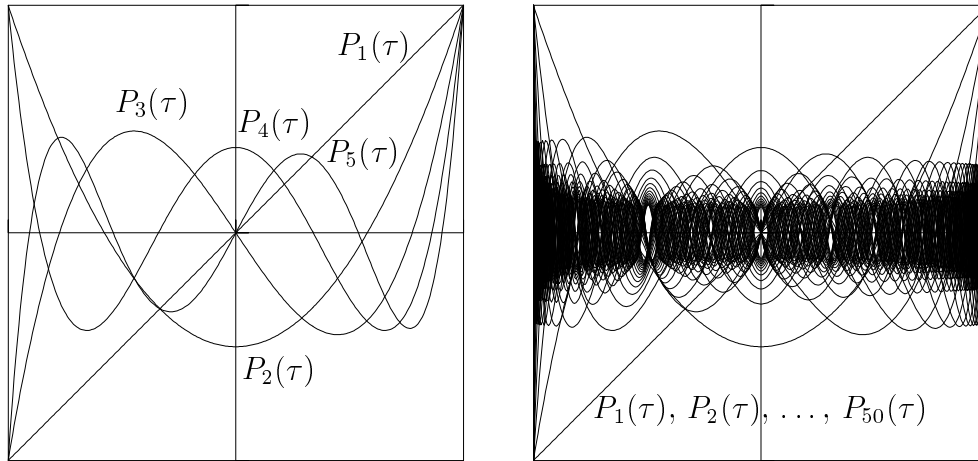
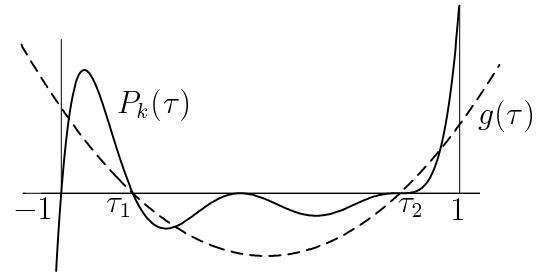


FIG. I.8: Polynômes de Legendre

Théorème 4.2 *Toutes les racines de $P_k(\tau)$ sont réelles, simples et dans l'intervalle ouvert $(-1, 1)$.*

Démonstration. Notons par τ_1, \dots, τ_r les racines de $P_k(\tau)$ qui sont réelles, dans $(-1, 1)$ et où $P_k(\tau)$ change de signe. Le but est de montrer $r = k$. Supposons, par l'absurde, que $r < k$. Avec le polynôme $g(\tau) = (\tau - \tau_1) \cdot \dots \cdot (\tau - \tau_r)$ de degré $r < k$, on a

$$0 \neq \int_{-1}^1 \underbrace{P_k(\tau) g(\tau)}_{\substack{\text{ne change pas} \\ \text{de signe sur } (-1, 1)}} d\tau = \langle P_k, g \rangle = 0,$$



d'où la contradiction. □

Théorème 4.3 (formule de récurrence) *Les polynômes de Legendre satisfont pour $k \geq 1$*

$$(k+1)P_{k+1}(\tau) = (2k+1)\tau P_k(\tau) - kP_{k-1}(\tau). \quad (4.5)$$

Démonstration. Si on multiplie $P_k(\tau)$ par τ , on obtient un polynôme de degré $k+1$ qui possède les mêmes puissances de τ que $P_{k+1}(\tau)$. On peut donc soustraire, avec un facteur a bien choisi, pour faire disparaître le terme τ^{k+1} . Le prochain terme, τ^{k-1} , est éliminé par un multiple de $P_{k-1}(\tau)$; le terme suivant τ^{k-3} par un multiple de $P_{k-3}(\tau)$ etc. Donc on peut écrire

$$\tau P_k(\tau) = a \cdot P_{k+1}(\tau) + b \cdot P_{k-1}(\tau) + c \cdot P_{k-3}(\tau) + d \cdot P_{k-5}(\tau) + \dots \quad (4.6)$$

Grande surprise : tous les coefficients c, d, \dots sont nuls ! Pour voir cela, multiplions l'équation (4.6) par $P_{k-3}(\tau)$ et intégrons le tout de -1 à 1 . Par orthogonalité, tous les termes vont s'annuler, p. ex.,

$$\int_{-1}^1 \tau P_k(\tau) \cdot P_{k-3}(\tau) d\tau = \int_{-1}^1 P_k(\tau) \cdot \underbrace{\tau \cdot P_{k-3}(\tau)}_{g(\tau)} d\tau = 0,$$

sauf le terme $\int_{-1}^1 (P_{k-3}(\tau))^2 d\tau > 0$, et c doit être zéro. La même chose s'applique à d, e etc.

En comparant dans (4.6) le coefficient de τ^{k+1} avec le terme dominant de (4.2), on trouve

$$a = \frac{k+1}{2k+1} \quad \text{et en posant } t = 1, \text{ on trouve} \quad b = 1 - a = \frac{k}{2k+1}. \quad \square$$

I.5 Formules de quadrature de Gauss

Dans ce paragraphe, nous construisons des formules de quadrature ayant un ordre $p = 2s$. Avec

$$M(t) = C \cdot P_s(2t - 1), \quad (5.1)$$

où $P_s(\tau)$ est le polynôme de Legendre de degré s , nous avons

$$\int_0^1 P_s(2t - 1)g(2t - 1) dt = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_s(\tau)g(\tau) d\tau = 0 \quad \text{si } \deg g \leq s - 1.$$

Toutes les racines de $P_s(2t - 1)$ sont réelles et situées dans l'intervalle ouvert $(0, 1)$ (théorème 4.2). Alors, le théorème 3.1 nous donne le résultat suivant.

Théorème 5.1 (Gauss 1814) *Pour chaque entier positif s , il existe une formule de quadrature unique à s étages d'ordre $p = 2s$. Elle est donnée par:*

c_1, \dots, c_s sont les racines de $P_s(2t - 1)$;

b_1, \dots, b_s sont donnés par (1.6). □

Pour de petites valeurs de s , les *formules de Gauss* sont faciles à obtenir: il suffit de calculer les racines de (4.3) et de résoudre le système (1.6) tout en exploitant la symétrie de la formule. Pour $s \leq 5$, on obtient ainsi:

$$s = 1 : \quad \int_0^1 g(t) dt \approx g\left(\frac{1}{2}\right) \quad (\text{formule du point milieu})$$

$$s = 2 : \quad \int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{2}g\left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right) + \frac{1}{2}g\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}\right)$$

$$s = 3 : \quad \int_0^1 g(t) dt \approx \frac{5}{18}g\left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}\right) + \frac{8}{18}g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{5}{18}g\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}\right)$$

$$s = 4 : \quad \int_0^1 g(t) dt \approx \mu g\left(\frac{1}{2} - \delta\right) + \mu' g\left(\frac{1}{2} - \delta'\right) + \mu' g\left(\frac{1}{2} + \delta'\right) + \mu g\left(\frac{1}{2} + \delta\right)$$

$$s = 5 : \quad \int_0^1 g(t) dt \approx \nu g\left(\frac{1}{2} - \epsilon\right) + \nu' g\left(\frac{1}{2} - \epsilon'\right) + \frac{64}{225}g\left(\frac{1}{2}\right) + \nu' g\left(\frac{1}{2} + \epsilon'\right) + \nu g\left(\frac{1}{2} + \epsilon\right)$$

$$\delta = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15 + 2\sqrt{30}}{35}}, \quad \delta' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15 - 2\sqrt{30}}{35}}, \quad \mu = \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{30}}{72}, \quad \mu' = \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{30}}{72},$$

$$\epsilon = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{35 + 2\sqrt{70}}{63}}, \quad \epsilon' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{35 - 2\sqrt{70}}{63}}, \quad \nu = \frac{322 - 13\sqrt{70}}{1800}, \quad \nu' = \frac{322 + 13\sqrt{70}}{1800}.$$

Expérience numérique. Après avoir trouvé de formules optimales, nous sommes intéressés refaire les calculs pour les intégrales $\int_0^3 \cos(x) \exp(\sin(x)) dx$ et $\int_0^2 \cos(x) dx$ de la figure I.4. Les résultats correspondants peuvent être admirés en figure I.9 ; ils montrent une claire amélioration.

Calcul des coefficients pour s grand

Si s est grand (disons $s \geq 10$), le calcul exact des racines de $P_s(\tau)$ n'est pas toujours possible et la résolution exacte du système (1.6) peut poser des problèmes. Décrivons alors leur calcul pratique.

Calcul de nœuds. En utilisant la formule de récurrence (4.5), on peut facilement calculer la valeur de $P_s(\tau)$ pour un τ donné. Le calcul des racines $\gamma_1, \dots, \gamma_s$ du polynôme $P_s(\tau)$ peut alors être fait par bisection (voir exercice 12), et on obtient les nœuds de la formule de Gauss à l'aide de $c_i = (1 + \gamma_i)/2$.

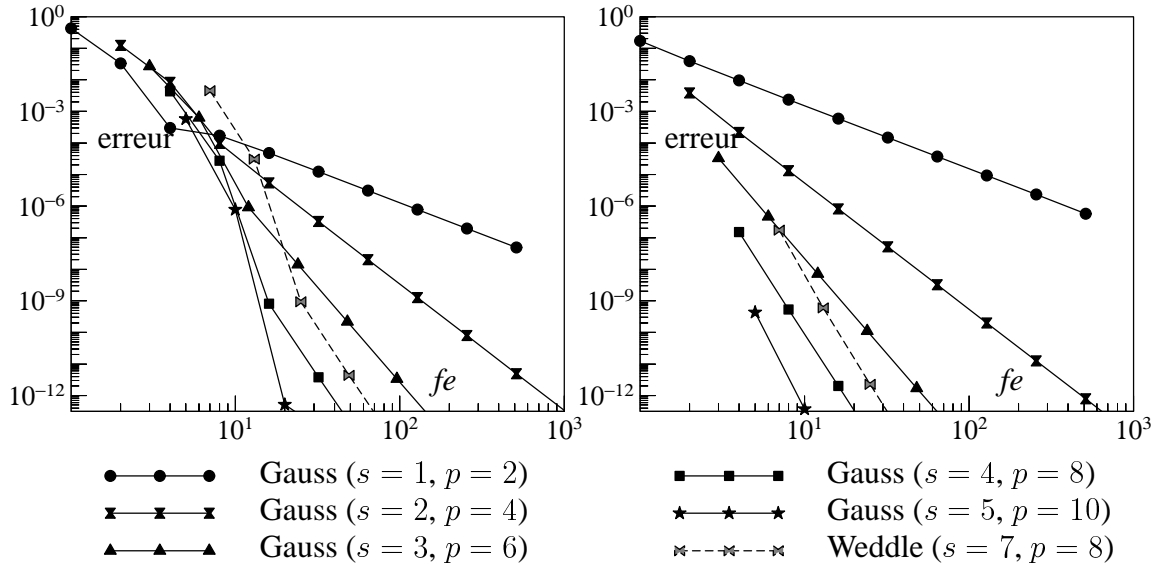


FIG. I.9: L'erreur en fonction du travail fe pour les formules de Gauss (en traitillés sont répétés les résultats pour Weddle de la figure I.4)

Calcul de poids. Au lieu de résoudre le système (1.6), on peut aussi utiliser la formule explicite

$$b_i = \frac{1}{(1 - \gamma_i^2)(P'_s(\gamma_i))^2} = \frac{1 - \gamma_i^2}{s^2(P_{s-1}(\gamma_i))^2}, \quad (5.2)$$

qui est donnée sans démonstration (voir M. Abramowitz & I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, page 887). La deuxième identité de (5.2) est une conséquence de l'exercice 11.

Formules de Lobatto

Un avantage de la formule de Simpson est le fait que $c_1 = 0$ et $c_s = 1$. Le nœud pour $c_s = 1$ coïncide avec le nœud pour $c_1 = 0$ du *pas suivant*. En mettant ces valeurs ensemble, on peut ainsi faire une petite économie.

Problème. Trouver des formules de quadrature d'ordre maximal à condition que $c_1 = 0$ et $c_s = 1$. La réponse, due à R. Lobatto (1852), et redécouverte par R. Radau (1880), est : on pose

$$M(t) = P_s(2t - 1) - P_{s-2}(2t - 1), \quad (5.3)$$

et on prend pour c_1, \dots, c_s les racines de ce polynôme. Comme $M(t)$ est orthogonal à tout polynôme de degré $s - 3$, nous obtenons une formule de quadrature d'ordre $2s - 2$. À cause de $P_s(1) = 1$ et de $P_s(-1) = (-1)^s$, on aura toujours $M(0) = M(1) = 0$. Les racines restants de $M(t)$ sont réelles, simples et à l'intérieur de $(0, 1)$. Pour prouver ceci, on adapte la démonstration du théorème 4.2. Nous avons alors :

Théorème 5.2 Pour chaque entier $s \geq 2$ il existe une formule de quadrature à s nœuds d'ordre $2s - 2$ satisfaisant $c_1 = 0$ et $c_s = 1$. \square

Des cas particuliers sont la formule du trapèze ($s = 2$) et la formule de Simpson ($s = 3$). Pour $s = 4$ et $s = 5$, on obtient

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{12}g(0) + \frac{5}{12}g\left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{5}}{10}\right) + \frac{5}{12}g\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{10}\right) + \frac{1}{12}g(1) \quad (\text{ordre } 6)$$

$$\int_0^1 g(t) dt \approx \frac{1}{20}g(0) + \frac{49}{180}g\left(\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{21}}{14}\right) + \frac{16}{45}g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{49}{180}g\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{21}}{14}\right) + \frac{1}{20}g(1) \quad (\text{ordre } 8).$$

Une comparaison des formules de Gauss et de Lobatto (du même ordre) montre une légère supériorité des formules de Gauss.

I.6 Un programme adaptatif – TEGRAL

Posons-nous le problème d'écrire un programme

FUNCTION TEGRAL (FCN, A, B, TOL)

qui, pour une fonction $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ donnée, calcule la valeur de $\int_a^b f(x) dx$ à une précision relative de TOL. Si l'on fixe la formule de quadrature (par exemple la formule de Gauss d'ordre 30 avec $s = 15$), il faut trouver une division $\Delta = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b\}$ de l'intervalle (a, b) afin que l'approximation numérique I_Δ satisfasse

$$|I_\Delta - \int_a^b f(x) dx| \leq \text{TOL} \cdot \int_a^b |f(x)| dx. \quad (6.1)$$

Pour une fonction f ne changeant pas de signe sur (a, b) , la condition (6.1) signifie que l'erreur relative est bornée par TOL. On a mis la valeur absolue sous l'intégrale de droite pour éviter des ennuis dans le cas où $\int_a^b f(x) dx$ est très petit ou nul.

Pour écrire un tel programme, on est confronté aux deux problèmes suivants:

- choix de la division pour que (6.1) soit satisfait;
- estimation de l'erreur $I_\Delta - \int_a^b f(x) dx$.

Détermination de la division

Pour un sous-intervalle $(x_0, x_0 + h)$ de (a, b) , on sait calculer les valeurs

$$res(x_0, x_0 + h) = h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h), \quad (6.2)$$

$$resabs(x_0, x_0 + h) = h \sum_{i=1}^s b_i |f(x_0 + c_i h)|. \quad (6.3)$$

Supposons, pour le moment, qu'on connaisse aussi une estimation de l'erreur

$$err(x_0, x_0 + h) \approx res(x_0, x_0 + h) - \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx. \quad (6.4)$$

L'algorithme pour trouver une division convenable est le suivant:

- i) on calcule $res(a, b)$, $resabs(a, b)$ et $err(a, b)$. Si

$$|err(a, b)| \leq \text{TOL} \cdot resabs(a, b),$$

on accepte $res(a, b)$ comme approximation de $\int_a^b f(x) dx$ et on arrête le calcul; sinon

- ii) on subdivise (a, b) en deux sous-intervalles $I_1 = (a, (a+b)/2)$ et $I_2 = ((a+b)/2, b)$ et on calcule $res(I_1)$, $resabs(I_1)$, $err(I_1)$ et $res(I_2)$, $resabs(I_2)$, $err(I_2)$. On pose $N = 2$ et on regarde si

$$\sum_{j=1}^N |err(I_j)| \leq \text{TOL} \cdot \left(\sum_{j=1}^N resabs(I_j) \right). \quad (6.5)$$

Si (6.5) est vérifié, on accepte $res(I_1) + res(I_2)$ comme approximation de $\int_a^b f(x) dx$; sinon

- iii) on pose $N := N + 1$ et on subdivise l'intervalle où l'erreur est maximale (disons I_k) en deux sous-intervalles équidistants qu'on denote par I_k et I_{N+1} . Ensuite, on calcule res , $resabs$ et err pour ces deux intervalles. Si (6.5) est vérifié, on arrête le calcul et on accepte

$$\sum_{j=1}^N res(I_j) \approx \int_a^b f(x) dx \quad (6.6)$$

comme approximation de l'intégrale; sinon on répète la partie (iii) de cet algorithme.

Estimation de l'erreur (6.4)

Malheureusement, les formules pour l'erreur, obtenues dans le paragraphe I.2, ne sont pas très utiles pour un programme général, car on ne connaît que très rarement la $p^{\text{ème}}$ dérivée de la fonction $f(x)$ (dans notre situation $p = 30$).

L'idée est d'appliquer une deuxième formule de quadrature $(\hat{b}_i, \hat{c}_i)_{i=1}^s$ et d'utiliser la différence de deux approximations numériques comme estimation de l'erreur du moins bon résultat. Pour que le travail supplémentaire soit négligeable, on suppose $\hat{s} \leq s$ et on reprend les mêmes évaluations de f , c.-à-d., on suppose $\hat{c}_i = c_i$ pour tous i . Une telle formule de quadrature s'appelle *formule emboîtée*, si pour au moins un indice i on a $\hat{b}_i \neq b_i$.

Remarque. Si $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ est une formule de quadrature d'ordre $p \geq s$, l'ordre d'une formule emboîtée est $\hat{p} \leq s - 1$. Ce résultat découle du fait que, pour une formule de quadrature d'ordre $\geq s$, les poids b_i sont uniquement déterminés par ses nœuds c_i .

Pour la formule de Gauss ($s = 15$, $p = 30$), on obtient une formule emboîtée $(\hat{b}_i, c_i)_{i=1}^s$ d'ordre 14 en enlevant le point milieu $c_8 = 1/2$ (voir fig. I.10), c.-à-d., on pose $\hat{b}_8 = 0$. L'expression calculable

$$\text{ERR1} := h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) - h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i f(x_0 + c_i h) \approx C_1 h^{15} \quad (6.7)$$

est une approximation de l'erreur de la formule emboîtée, car

$$\text{ERR1} = \underbrace{\left(h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) - \int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx \right)}_{= Ch^{31} + \mathcal{O}(h^{32})} + \underbrace{\left(\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx - h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i f(x_0 + c_i h) \right)}_{= Ch^{15} + \mathcal{O}(h^{16})}.$$

Pour le programme TEGRAL, on considère encore une deuxième formule emboîtée qui a pour nœuds $\{c_2, c_4, c_6, c_{10}, c_{12}, c_{14}\}$ et un ordre 6 (voir la fig. I.10). On dénote les poids de cette formule de quadrature par $\hat{\hat{b}}_i$ et on définit

$$\text{ERR2} := h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) - h \sum_{i=1}^s \hat{\hat{b}}_i f(x_0 + c_i h) \approx C_2 h^7. \quad (6.8)$$

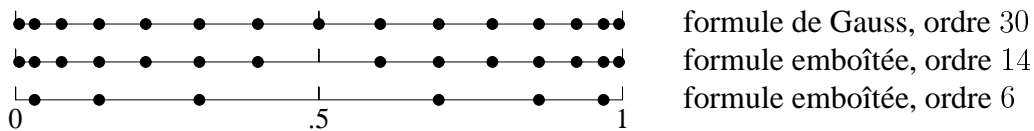


FIG. I.10: Formule de Gauss et ses formules emboîtées

Il y a plusieurs possibilités pour définir $err(x_0, x_0 + h)$:

- $err(x_0, x_0 + h) := \text{ERR1}$; cette estimation est trop pessimiste. En général, la formule de Gauss donne un résultat largement meilleur que la formule emboîtée d'ordre 14.
- dans le programme TEGRAL, on a choisi l'approximation

$$err(x_0, x_0 + h) := \text{ERR1} \cdot \left(\frac{\text{ERR1}}{\text{ERR2}} \right)^2, \quad \left(\approx h^{15} \cdot \left(\frac{h^{15}}{h^7} \right)^2 \approx h^{31} \right)$$

ce qui donne de bons résultats.

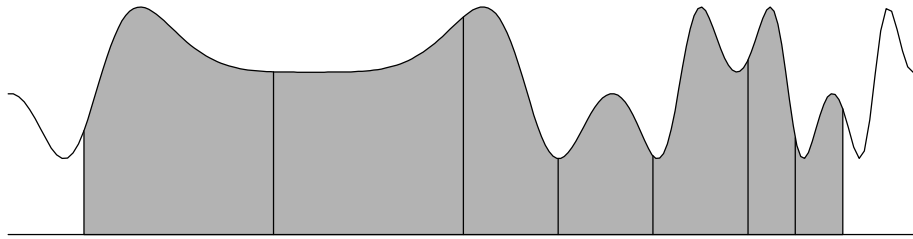


FIG. I.11: Division choisie par TEGRAL pour $f(x) = 2 + \sin(3 \cos(0.002(x-40)^2))$ sur $(10, 110)$

Exemples

- 1) Si l'on applique le programme TEGRAL avec $TOL = 10^{-10}$ à la fonction de la fig. I.1, on obtient le résultat avec une erreur de $2.0 \cdot 10^{-14}$. La division choisie est donnée dans la fig. I.11.
- 2) Appliquons le même programme à la fonction

$$f(x) = \sqrt{x} \cdot \log x \quad \text{sur} \quad (0, 1), \tag{6.9}$$

qui a une singularité au point 0 dans la dérivée. Les divisions successives de l'intervalle par l'algorithme sont présentées dans la fig. I.12. On voit que l'intervalle où l'erreur est maximale est toujours celui qui est tout à gauche. Les erreurs sont données dans le tableau I.2. La convergence est très lente et on se demande s'il n'y a pas de possibilité d'accélérer la convergence de la suite $\{S_N\}$.

TAB. I.2: Résultat de TEGRAL pour (6.9)

N	S_N	$err_N = S_N - \int_0^1 f(x) dx$	err_N/err_{N-1}
1	-0.4446200164956040	$-0.176 \cdot 10^{-03}$	—
2	-0.4445133092592463	$-0.689 \cdot 10^{-04}$	0.392
3	-0.4444711927155809	$-0.267 \cdot 10^{-04}$	0.388
4	-0.4444547502264998	$-0.103 \cdot 10^{-04}$	0.385
5	-0.4444483881989292	$-0.394 \cdot 10^{-05}$	0.383
6	-0.4444459448772270	$-0.150 \cdot 10^{-05}$	0.380
.
21	-0.44444444444449657	$-0.521 \cdot 10^{-12}$	0.366
22	-0.44444444444446350	$-0.191 \cdot 10^{-12}$	0.366

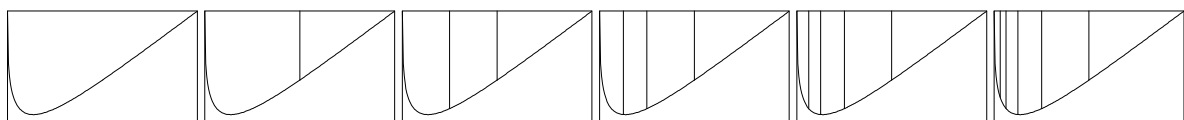


FIG. I.12: Division choisie par TEGRAL pour (6.9)

I.7 L'epsilon-algorithme

Etant donnée une suite $\{S_0, S_1, S_2, \dots\}$ qui converge lentement vers la valeur S . Le but est de trouver une autre suite avec la même limite, mais qui converge plus rapidement.

Souvent, on peut observer que la suite satisfait

$$S_{n+1} - S \approx \rho \cdot (S_n - S), \quad (7.1)$$

ou de façon équivalente

$$S_n \approx S + C \cdot \rho^n. \quad (7.2)$$

Par exemple, la suite S_n du tableau I.2 satisfait approximativement (7.1) avec $\rho = 0.366$. Un autre exemple fréquent est donné par la méthode des approximations successives $S_{n+1} = g(S_n)$ pour calculer un point fixe de $g(x)$, c.-à-d. un S satisfaisant $S = g(S)$. Si g est différentiable,

$$S_{n+1} - S = g(S_n) - g(S) \approx g'(S) \cdot (S_n - S).$$

Ceci est (7.1) avec $\rho = g'(S)$.

Le procédé Δ^2 d'Aitken (1926)

L'idée est de remplacer " \approx " par " $=$ " dans (7.2) et de calculer ρ , C et S de trois formules consécutives. Avec la notation

$$\Delta S_n := S_{n+1} - S_n \quad (\text{différence finie}), \quad (7.3)$$

on obtient alors

$$\Delta S_n = C\rho^n(\rho - 1), \quad \Delta S_{n+1} = C\rho^{n+1}(\rho - 1), \quad \Delta^2 S_n = C\rho^n(\rho - 1)^2,$$

où $\Delta^2 S_n = \Delta(\Delta S_n) = \Delta S_{n+1} - \Delta S_n = S_{n+2} - 2S_{n+1} + S_n$ est la deuxième différence finie. On en déduit que

$$S = S_{n+1} - C\rho^{n+1} = S_{n+1} - \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta^2 S_n}. \quad (7.4)$$

Si (7.2) n'est pas satisfait exactement, la valeur de S dans (7.4) va dépendre de n . On obtient ainsi une autre suite $\{S'_n\}$ définie par (procédé Δ^2 d'Aitken)

$$S'_n = S_{n+1} - \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta^2 S_n}, \quad (7.5)$$

qui, en général, converge plus rapidement vers S que la suite originale $\{S_n\}$.

Exemple. Pour la suite $\{S_n\}$ du tableau I.2, le résultat est donné dans le tableau I.3.

TAB. I.3: Accélération de la convergence pour $\{S_n\}$ du tableau I.2

n	S_n	S'_n	S''_n
1	-0.4446200164956040	-0.4444437305042874	-0.4444444444444444
2	-0.4445133092592463	-0.4444442199284397	-0.4444444444444444
3	-0.4444711927155809	-0.4444443729666139	-0.4444444444444444
4	-0.4444547502264998	-0.4444444214607878	-0.4444444444444444
5	-0.4444483881989292	-0.4444444369930052	-0.4444444444444444
6	-0.4444459448772270	-0.4444444420118825	-0.4444444444444444

L'epsilon-algorithme

Pour généraliser l'idée d'Aitken, on considère une suite $\{S_n\}$ pour laquelle on suppose, au lieu de (7.2),

$$S_n \approx S + C_1 \cdot \rho_1^n + C_2 \cdot \rho_2^n. \quad (7.6)$$

Cette fois, on a 5 paramètres à déterminer. Alors, on prend 5 formules consécutives de (7.6), on suppose égalité, et on calcule $S, C_1, \rho_1, C_2, \rho_2$. La valeur de S ainsi obtenue est dénotée par S''_n . Shanks (1955) a fait ce calcul et il a trouvé la formule (nous ajoutons une formule semblable pour S'_n)

$$S'_n = \frac{\det \begin{pmatrix} S_n & S_{n+1} \\ S_{n+1} & S_{n+2} \end{pmatrix}}{\Delta^2 S_n}, \quad S''_n = \frac{\det \begin{pmatrix} S_n & S_{n+1} & S_{n+2} \\ S_{n+1} & S_{n+2} & S_{n+3} \\ S_{n+2} & S_{n+3} & S_{n+4} \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} \Delta^2 S_n & \Delta^2 S_{n+1} \\ \Delta^2 S_{n+1} & \Delta^2 S_{n+2} \end{pmatrix}}$$

(sans démonstration). Mais, pour un calcul numérique, ces formules ne sont pas très pratiques. Wynn (1956) a trouvé une formule beaucoup plus simple:

Théorème 7.1 (ϵ -algorithme) *Etant donnée la suite $\{S_0, S_1, S_2, \dots\}$. Si l'on définit $\epsilon_k^{(n)}$ par*

$$\begin{aligned} \epsilon_{-1}^{(n)} &= 0, & \epsilon_0^{(n)} &= S_n, \\ \epsilon_{k+1}^{(n)} &= \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + \frac{1}{\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}}, & k \geq 0, n \geq 0, \end{aligned} \quad (7.7)$$

alors, $\epsilon_2^{(n)} = S'_n, \epsilon_4^{(n)} = S''_n, \epsilon_6^{(n)} = S'''_n, \dots$

La démonstration de $\epsilon_2^{(n)} = S'_n$ se fait par un simple calcul de $\epsilon_1^{(n)}$ et de $\epsilon_2^{(n)}$:

$$\begin{aligned} \epsilon_1^{(n)} &= 0 + \frac{1}{S_{n+1} - S_n} = \frac{1}{\Delta S_n}, \\ \epsilon_2^{(n)} &= S_{n+1} + \frac{1}{\frac{1}{\Delta S_{n+1}} - \frac{1}{\Delta S_n}} = S_{n+1} + \frac{\Delta S_n \cdot \Delta S_{n+1}}{\Delta S_n - \Delta S_{n+1}} = S'_n. \end{aligned}$$

Le cas général est moins évident et est donné sans démonstration. Tous les détails (démonstration et autres propriétés) sont donnés dans un livre de Brezinski².

Exemple. Pour la suite

$$S_n = \sum_{i=1}^n \frac{(-1)^{i+1}}{i}, \quad (7.8)$$

qui converge vers $\log(2)$, les erreurs de $\epsilon_k^{(n)}$, $k = 0, 2, 4, 6, \dots$ sont données dans la fig. I.13. L'amélioration de la convergence par l' ϵ -algorithme se voit clairement.

²C. Brezinski (1977): *Accélération de la Convergence en Analyse Numérique*. Lecture Notes in Mathematics, Nr. 584, Springer-Verlag. [MA 00.04/3 584]

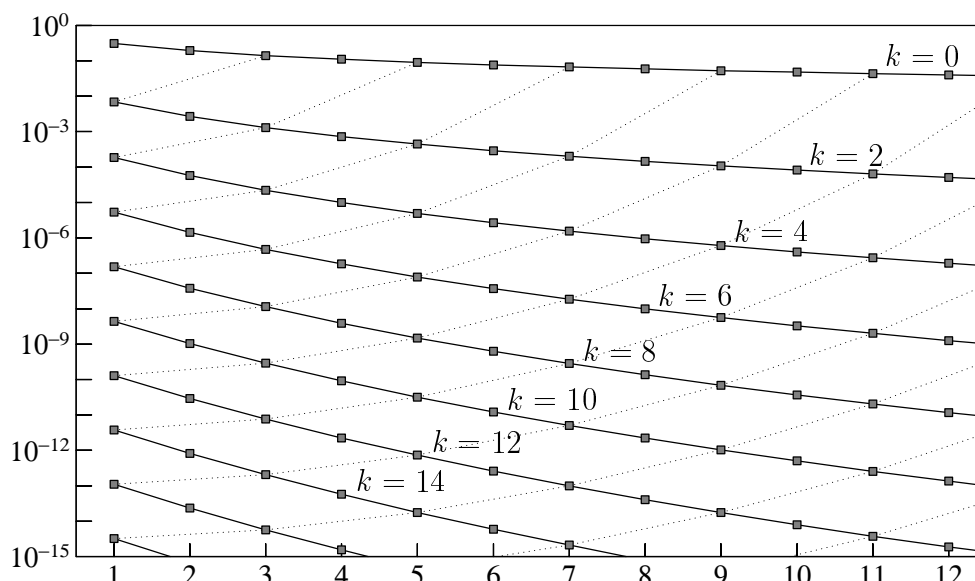


FIG. I.13: Erreur de $\epsilon_k^{(n)}$ en fonction de n pour la suite (7.8); les lignes pointillées indiquent que le même nombre des S_j est utilisé.

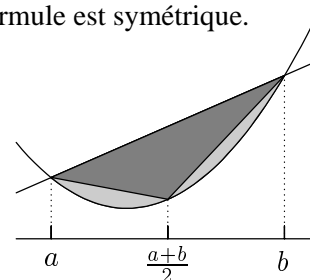
I.8 Exercices

1. Soit $(b_i, c_i)_{i=1}^s$ une formule de quadrature d'ordre $\geq s$. Montrer que

$$b_i = \int_0^1 \ell_i(x) dx \quad \text{où} \quad \ell_i(x) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{(x - c_j)}{(c_i - c_j)}.$$

2. Si les nœuds d'une formule de quadrature satisfont $c_i = 1 - c_{s+1-i}$ (pour tous i) et si la formule a un ordre $p \geq s$, alors on a nécessairement $b_i = b_{s+1-i}$, c'est-à-dire la formule est symétrique.
3. Soient une parabole et une droite se coupant comme sur le petit dessin. Utiliser la règle de Simpson pour montrer que (Archimède, 283–212 av. J.-C.)

$$\text{aire(parabole)} = \frac{4}{3} \text{aire(triangle)}.$$



4. Calculer les formules de Newton-Cotes pour

$$(c_i) = (0, 1/3, 2/3, 1), \quad (c_i) = (0, 1/4, 2/4, 3/4, 1)$$

et déterminer l'ordre de ces formules de quadrature.

Indication. Les calculs se simplifient en utilisant l'exercice 2.

5. Calculer la constante d'erreur pour la formule de Simpson et de Newton. Expliquer pourquoi, malgré le fait que la méthode de Newton possède une constante d'erreur plus petite, la méthode de Simpson est meilleure si on compare l'erreur avec le travail fe (voir la fig. I.4).
6. Calculer les noyaux de Peano $N_k(\tau)$ ($k = 1, 2$) pour la règle du trapèze et les dessiner. Remarquer une relation avec les polynômes de Bernoulli et la formule d'Euler-Maclaurin.³
7. Montrer que, pour une formule de quadrature symétrique, les noyaux de Peano satisfont

$$N_k(1 - \tau) = (-1)^k N_k(\tau).$$

³Hairer & Wanner, *Analysis by Its History*, Undergraduate Texts in Mathematics, Springer, 2nd printing 1997.

8. Calculer les noyaux de Peano $N_k(\tau)$ ($k = 1, 2, 3, 4$) pour la formule de Simpson. Les dessiner. Est-ce que $N_4(\tau)$ change de signe sur l'intervalle $[0, 1]$?
9. Soit p l'ordre d'une formule de quadrature et supposons que le noyau de Peano $N_p(\tau)$ ne change pas de signe sur $[0, 1]$. Montrer qu'avec un $\xi \in (x_0, x_0 + h)$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx - h \sum_{i=1}^s b_i f(x_0 + c_i h) = \frac{h^{p+1}}{p!} \left(\frac{1}{p+1} - \sum_{i=1}^s b_i c_i^p \right) f^{(p)}(\xi).$$

10. (Formule de Radau). Déterminer c_2, b_1, b_2 dans la formule de quadrature

$$\int_0^1 g(t) dt \approx b_1 g(0) + b_2 g(c_2)$$

afin que son ordre soit maximal.

Résultat. $c_2 = 2/3, b_1 = 1/4, b_2 = 3/4$ et $p = 3$.

11. Pour les *polynômes de Legendre* démontrer la formule

$$(1 - \tau^2)P_k'(\tau) = -k\tau P_k(\tau) + kP_{k-1}(\tau). \quad (8.1)$$

Indication. Écrire le polynôme $(1 - \tau^2)P_k'(\tau) + k\tau P_k(\tau)$ sous forme d'une combinaison linéaire de $P_{k+1}(\tau), P_{k-1}(\tau), \dots$ comme dans la démonstration du théorème 4.3.

12. Calculer les racines du polynôme de Legendre $P_{15}(\tau)$ en utilisant la *méthode de bisection*.

- (a) Localiser les racines en calculant $P_{15}(i/n)$ pour $i = 0, 1, \dots, n$ et avec un n grand;
 (b) Si $[a, b]$ est un intervalle avec $P_n(a) \cdot P_n(b) < 0$ alors

```

10   CENTR=(A+B)/2.D0
      PC=P(N,CENTR)
      IF (CENTR.EQ.A.OR.CENTR.EQ.B) GOTO 40
      IF (PA*PC.LT.0.D0) THEN
          B=CENTR
          PB=PC
      ELSE
          A=CENTR
          PA=PC
      END IF
      GOTO 10
40   CONTINUE

```

Pour écrire la *FUNCTION* $P(N, X)$ qui calcule la valeur de la fonction $P_k(\tau)$, utiliser la formule de récurrence (4.5) et $P_0(\tau) = 1, P_1(\tau) = \tau$.

13. Calculer la constante d'erreur C_s pour la formule de Gauss avec s nœuds d'ordre $2s$.

Indication. C_s est l'erreur de la formule quand elle est appliquée à un polynôme de degré $2s$ de la forme $t^{2s}/(2s)! + \dots$. Essayer $K \cdot (P_s(2t-1))^2$, et utiliser la formule de récurrence de l'exercice 11 pour évaluer $\int_{-1}^1 P_s(\tau)^2 d\tau$. Le résultat est

$$C_s = \frac{(s!)^4}{(2s+1)(2s!)^3}.$$

14. Montrer que pour les formules de quadrature de Gauss (ordre $p = 2s$) le noyau de Peano $N_{2s}(\tau)$ ne change pas de signe.

Indication. Faire une démonstration par l'absurde et utiliser le théorème de Rolle.

15. Soient $c_1^{(s)}, c_2^{(s)}, \dots, c_s^{(s)}$ les nœuds de la formule de quadrature de Gauss d'ordre $2s$ et $c_1^{(s+1)}, c_2^{(s+1)}, \dots, c_{s+1}^{(s+1)}$ ceux de la formule d'ordre $2s + 2$. Montrer qu'on a alors

$$0 < c_1^{(s+1)} < c_1^{(s)} < c_2^{(s+1)} < c_2^{(s)} < \dots < c_s^{(s)} < c_{s+1}^{(s+1)} < 1.$$

Indication. Procéder par récurrence en utilisant le fait que si $P_s(\tau) = 0$, alors $P_{s-1}(\tau)$ et $P_{s+1}(\tau)$ sont de signe opposé (voir formule (4.6)).

16. (Formules de Radau). Montrer qu'il existe une unique formule de quadrature d'ordre $2s - 1$ qui satisfait $c_s = 1$.

Indication. Utiliser $M(t) = \text{Const} \cdot (P_s(x) - P_{s-1}(x))$.

17. Considérons une formule de quadrature d'ordre $p \geq 1$ satisfaisant $0 \leq c_i \leq 1$. Montrer que, pour toute fonction $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ intégrable au sens de Riemann, on a

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \sum_{j=0}^N h_j \sum_{i=1}^s b_i f(x_j + c_i h_j) \right| \longrightarrow 0$$

lorsque $h = \max_j h_j$ tend vers zéro.

Indication. Pour un i fixé, l'expression $\sum_{j=0}^N h_j f(x_j + c_i h_j)$ est une somme de Riemann.

18. Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, donne par

$$f(x) = a_0 + \sum_{k=1}^m (a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx)), \quad a_k, b_k \in \mathbb{R}.$$

- (a) Quelle est la valeur exacte de $\int_0^{2\pi} f(x) dx$?
 (b) Appliquer la règle du trapèze à $\int_0^{2\pi} f(x) dx$ avec $h = 2\pi/N$. A partir de quelle valeur de N , le résultat est exacte ?
 (c) Appliquer une formule de quadrature d'ordre plus élevé (par exemple celle de Gauss d'ordre 6, voir exemple 3.3) et répondez à la même question que sous (b).
 (d) Quelle formule de quadrature proposez-vous pour l'intégration numérique d'une fonction périodique ?
19. Considérons la suite $\{x_n\}$ donnée par $x_{n+1} = x_n + 1 - x_n^2/2$, $x_0 = 0$.
 (a) Quelle est sa limite ?
 (b) Appliquer l'algorithme Δ^2 d'Aitken pour accélérer la convergence.
 (c) En utilisant x_0, x_1, \dots, x_8 comparer l'erreur des suites obtenues avec ou sans Δ^2 d'Aitken.
20. Considérons une suite $\{S_n\}$ qui satisfait

$$(S_{n+1} - S) = \rho_n (S_n - S) \quad \text{avec} \quad \rho_n \longrightarrow \rho \quad \text{et} \quad \rho \neq 1.$$

a) Montrer que la suite $\{S'_n\}$, donnée par le procédé Δ^2 d'Aitken converge plus vite vers S que la suite originale, c.-à-d.,

$$\frac{S'_n - S}{S_n - S} \longrightarrow 0 \quad \text{pour} \quad n \longrightarrow \infty.$$

b) Donner une suite divergente $\{S_n\}$ pour laquelle la suite $\{S'_n\}$ converge.

Indication. Nous savons que $\Delta S_n = (\rho_n - 1)(S_n - S)$, trouver une formule similaire pour $\Delta^2 S_n$.