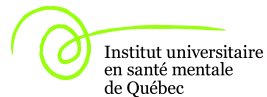




Chapitre 6 : Dérivation et intégration numériques

Ibrahima Dione (Université Laval)

4 avril 2017



① Dérivation numérique

- 1.2 Approximation de la dérivée première $f'(x_i)$
- 1.3 Approximation de la dérivée seconde $f''(x_i)$
- 1.4 Extrapolation de Richardson

② Intégration numérique

- 2.2 Formules de Newton-Cotes simples et composées
 - Méthode des trapèzes
 - Formule de Simpson 1/3
 - Formule de Simpson 3/8
- 2.3 Quadratures de Gauss-Legendre
 - Quadrature de Gauss-Legendre à 1 point
 - Quadrature de Gauss-Legendre à 2 points
 - Quadratures de Gauss-Legendre à n points

Au chapitre précédent, on cherchait à évaluer la fonction $f(x)$ connue seulement aux points de collocation ou d'interpolation $(x_i, f(x_i)), i = 0, 1, \dots, n$. Dans le présent chapitre, l'objectif est de chercher une approximation

- ① des dérivées

$$f'(x_i), f''(x_i), f'''(x_i) \text{ et } f^{(4)}(x_i), i = 0, 1, \dots, n, \quad (0.1)$$

- ② et de l'intégrale

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx, \quad (0.2)$$

utilisant seulement les points connus de cette fonction $(x_i, f(x_i)), i = 0, 1, 2, \dots, n$.

Note:

- ① On parle ainsi de **dérivation et d'intégration numérique**.
- ② Bien qu'en théorie on soit en mesure d'estimer les dérivées de tout ordre, en pratique on dépasse rarement l'ordre 4. Cela s'explique par le fait que **la différentiation numérique est un procédé numériquement instable**.

- ❶ La méthode du développement de Taylor par exemple, permet d'écrire la fonction $f(x)$ par

1. 2. 3. 4. 5. 6. 7. 8. 9. 10. 11. 12. 13. 14. 15. 16. 17. 18. 19. 20. 21. 22. 23. 24. 25. 26. 27. 28. 29. 30. 31. 32. 33. 34. 35. 36. 37. 38. 39. 40. 41. 42. 43. 44. 45. 46. 47. 48. 49. 50. 51. 52. 53. 54. 55. 56. 57. 58. 59. 60. 61. 62. 63. 64. 65. 66. 67. 68. 69. 70. 71. 72. 73. 74. 75. 76. 77. 78. 79. 80. 81. 82. 83. 84. 85. 86. 87. 88. 89. 90. 91. 92. 93. 94. 95. 96. 97. 98. 99. 100. 101. 102. 103. 104. 105. 106. 107. 108. 109. 110. 111. 112. 113. 114. 115. 116. 117. 118. 119. 120. 121. 122. 123. 124. 125. 126. 127. 128. 129. 130. 131. 132. 133. 134. 135. 136. 137. 138. 139. 140. 141. 142. 143. 144. 145. 146. 147. 148. 149. 150. 151. 152. 153. 154. 155. 156. 157. 158. 159. 160. 161. 162. 163. 164. 165. 166. 167. 168. 169. 170. 171. 172. 173. 174. 175. 176. 177. 178. 179. 180. 181. 182. 183. 184. 185. 186. 187. 188. 189. 190. 191. 192. 193. 194. 195. 196. 197. 198. 199. 200. 201. 202. 203. 204. 205. 206. 207. 208. 209. 210. 211. 212. 213. 214. 215. 216. 217. 218. 219. 220. 221. 222. 223. 224. 225. 226. 227. 228. 229. 230. 231. 232. 233. 234. 235. 236. 237. 238. 239. 240. 241. 242. 243. 244. 245. 246. 247. 248. 249. 250. 251. 252. 253. 254. 255. 256. 257. 258. 259. 260. 261. 262. 263. 264. 265. 266. 267. 268. 269. 270. 271. 272. 273. 274. 275. 276. 277. 278. 279. 280. 281. 282. 283. 284. 285. 286. 287. 288. 289. 290. 291. 292. 293. 294. 295. 296. 297. 298. 299. 300. 301. 302. 303. 304. 305. 306. 307. 308. 309. 310. 311. 312. 313. 314. 315. 316. 317. 318. 319. 320. 321. 322. 323. 324. 325. 326. 327. 328. 329. 330. 331. 332. 333. 334. 335. 336. 337. 338. 339. 340. 341. 342. 343. 344. 345. 346. 347. 348. 349. 350. 351. 352. 353. 354. 355. 356. 357. 358. 359. 360. 361. 362. 363. 364. 365. 366. 367. 368. 369. 370. 371. 372. 373. 374. 375. 376. 377. 378. 379. 380. 381. 382. 383. 384. 385. 386. 387. 388. 389. 390. 391. 392. 393. 394. 395. 396. 397. 398. 399. 400. 401. 402. 403. 404. 405. 406. 407. 408. 409. 410. 411. 412. 413. 414. 415. 416. 417. 418. 419. 420. 421. 422. 423. 424. 425. 426. 427. 428. 429. 430. 431. 432. 433. 434. 435. 436. 437. 438. 439. 440. 441. 442. 443. 444. 445. 446. 447. 448. 449. 450. 451. 452. 453. 454. 455. 456. 457. 458. 459. 460. 461. 462. 463. 464. 465. 466. 467. 468. 469. 470. 471. 472. 473. 474. 475. 476. 477. 478. 479. 480. 481. 482. 483. 484. 485. 486. 487. 488. 489. 490. 491. 492. 493. 494. 495. 496. 497. 498. 499. 500. 501. 502. 503. 504. 505. 506. 507. 508. 509. 510. 511. 512. 513. 514. 515. 516. 517. 518. 519. 520. 521. 522. 523. 524. 525. 526. 527. 528. 529. 530. 531. 532. 533. 534. 535. 536. 537. 538. 539. 540. 541. 542. 543. 544. 545. 546. 547. 548. 549. 550. 551. 552. 553. 554. 555. 556. 557. 558. 559. 560. 561. 562. 563. 564. 565. 566. 567. 568. 569. 570. 571. 572. 573. 574. 575. 576. 577. 578. 579. 580. 581. 582. 583. 584. 585. 586. 587. 588. 589. 590. 591. 592. 593. 594. 595. 596. 597. 598. 599. 600. 601. 602. 603. 604. 605. 606. 607. 608. 609. 610. 611. 612. 613. 614. 615. 616. 617. 618. 619. 620. 621. 622. 623. 624. 625. 626. 627. 628. 629. 630. 631. 632. 633. 634. 635. 636. 637. 638. 639. 640. 641. 642. 643. 644. 645. 646. 647. 648. 649. 650. 651. 652. 653. 654. 655. 656. 657. 658. 659. 660. 661. 662. 663. 664. 665. 666. 667. 668. 669. 670. 671. 672. 673. 674. 675. 676. 677. 678. 679. 680. 681. 682. 683. 684. 685. 686. 687. 688. 689. 690. 691. 692. 693. 694. 695. 696. 697. 698. 699. 700. 701. 702. 703. 704. 705. 706. 707. 708. 709. 710. 711. 712. 713. 714. 715. 716. 717. 718. 719. 720. 721. 722. 723. 724. 725. 726. 727. 728. 729. 730. 731. 732. 733. 734. 735. 736. 737. 738. 739. 740. 741. 742. 743. 744. 745. 746. 747. 748. 749. 750. 751. 752. 753. 754. 755. 756. 757. 758. 759. 760. 761. 762. 763. 764. 765. 766. 767. 768. 769. 770. 771. 772. 773. 774. 775. 776. 777. 778. 779. 780. 781. 782. 783. 784. 785. 786. 787. 788. 789. 790. 791. 792. 793. 794. 795. 796. 797. 798. 799. 800. 801. 802. 803. 804. 805. 806. 807. 808. 809. 810. 811. 812. 813. 814. 815. 816. 817. 818. 819. 820. 821. 822. 823. 824. 825. 826. 827. 828. 829. 830. 831. 832. 833. 834. 835. 836. 837. 838. 839. 840. 84

1000

Approximation de la dérivée première $f'(x_i)$

Avec deux points de collocation $(x_0, f(x_0))$ et $(x_1, f(x_1))$, on a le polynôme de Newton $p_1(x)$ qui les interpolant et reprenant la relation (1.2), on a

$$f(x) = \underbrace{f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0)}_{p_1(x)} + \underbrace{\frac{f^{(2)}(\zeta(x))}{2!}(x - x_0)(x - x_1)}_{E_1(x)}, \quad (1.3)$$

pour un certain $\zeta(x)$ compris dans l'intervalle $[x_0, x_1]$.

En dérivant l'expression (1.3), on obtient ainsi la dérivée de $f(x)$ en tout $x \in [x_0, x_1]$

$$f'(x) = f[x_0, x_1] + E_1'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + E_1'(x), \quad (1.4)$$

où

$$E_1'(x) = \frac{f^{(3)}(\zeta(x))}{2!} \zeta'(x)(x - x_0)(x - x_1) + \frac{f^{(2)}(\zeta(x))}{2!}(x - x_0) + \frac{f^{(2)}(\zeta(x))}{2!}(x - x_1). \quad (1.5)$$

En prenant $x = x_0$ dans (1.4), en simplifiant la dérivée du terme d'erreur $E_1'(x_0)$ dans (1.5) et en posant $h = x_1 - x_0$, on obtient la dérivée $f'(x_0)$ à partir de la dérivée (1.4)

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} - \frac{hf^{(2)}(\zeta_0)}{2!}, \text{ pour } \zeta_0 \in [x_0 \quad x_1]. \quad (1.6)$$

Remarque(s) : La relation (1.6) est appelé **la différence avant d'ordre 1 en x_0** . On l'appelle ainsi car pour évaluer la dérivée en $x = x_0$, on cherche de l'information vers l'avant (en $x = x_1$).

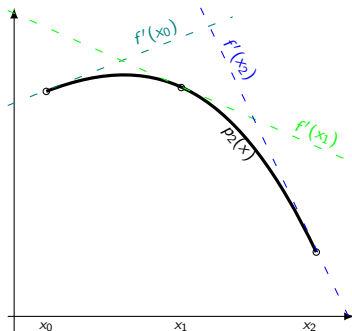
Et en remplaçant x par x_1 dans (1.4), et en simplifiant la dérivée du terme d'erreur $E_1'(x_1)$ dans (1.5), on a la dérivée $f'(x_1)$ définie par

$$f'(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + \frac{hf^{(2)}(\zeta_1)}{2!}, \text{ pour } \zeta_1 \in [x_0 \quad x_1]. \quad (1.7)$$

Remarque(s) : La relation (1.7) est nommée **la différence arrière d'ordre 1 en x_1** car on cherche l'information à l'arrière, pour l'évaluation de la dérivée en x_1 .

Avec trois points de collocations $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ et $(x_2, f(x_2))$, on approxime $f(x)$ par un polynôme de Newton $p_2(x)$ de degré 2 dont la dérivée fournit le résultat suivant :

$$f'(x) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](2x - (x_0 + x_1)) + E'_2(x),$$



Interprétation géométrique des formules
aux différences d'ordre 2

Formules de différences d'ordre 2 pour $f'(x)$

$$f'(x_0) = \frac{-f(x_2) + 4f(x_1) - 3f(x_0)}{2h} + \frac{h^2 f'''(\zeta_0)}{3}$$

Différence avant d'ordre 2

$$f'(x_1) = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} - \frac{h^2 f'''(\zeta_1)}{6}$$

Différence centrée d'ordre 2

$$f'(x_2) = \frac{3f(x_2) - 4f(x_1) + f(x_0)}{2h} + \frac{h^2 f'''(\zeta_2)}{3}$$

Différence arrière d'ordre 2

Remarque(s) : Toutes ces formules aux différences sont d'ordre 2. Les mentions avant, centrée et arrière renvoient au point où l'on calcule la dérivée et aux points utilisés pour la calculer :

- ① Ainsi, la différence avant est évaluée en x_0 sur la base des valeurs situées vers l'avant, soit en x_1 et en x_2 .
- ② La différence arrière fixe la dérivée en $x = x_2$ avec l'appui des valeurs de f en x_0 et x_1 .
- ③ La différence centrée, fait intervenir des valeurs situées de part et d'autre de x_1 .

Note: La figure ci-dessus illustre les différentes possibilités où on détermine un polynôme de degré 2 dont la pente en x_0 , en x_1 et en x_2 donne respectivement les différences avant, centrée et arrière.

- ④ On peut aussi convenir de toujours évaluer la dérivée en x . Dans ce cas, on utilise les valeurs de $f(x + h)$ et de $f(x + 2h)$ pour la différence avant et les valeurs de $f(x + h)$ et de $f(x - h)$ pour la différence centrée. Les tableaux suivants résument la situation.

Formules de différences d'ordre 2 pour $f'(x)$

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h)+4f(x+h)-3f(x)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

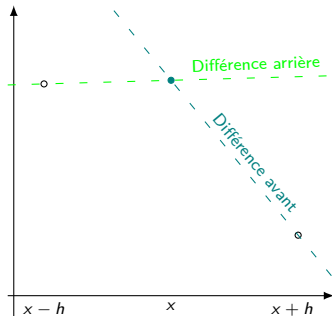
Différence avant d'ordre 2

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Différence centrée d'ordre 2

$$f'(x) = \frac{3f(x)-4f(x-h)+f(x-2h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Différence arrière d'ordre 2



Interprétation géométrique des formules
aux différences d'ordre 1

Formules de différences finies d'ordre 1 pour $f'(x)$

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Différence avant d'ordre 1

$$f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Différence arrière d'ordre 1

Remarque(s) : La figure ci-dessus illustre les deux possibilités de la différence d'ordre 1. On estime la dérivée par la pente du segment de droite joignant ces points.

Exemple 1

À traiter en classe !

Approximation de la dérivée seconde $f''(x_i)$ Formules de différences finies pour $f''(x)$

$$f''(x) = \frac{f(x-2h) - 2f(x-h) + f(x)}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

Différence arrière d'ordre 1

$$f''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

Différence avant d'ordre 1

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Différence centrée d'ordre 2

$$f''(x) = \frac{-f(x+2h) + 16f(x+h) - 30f(x) + 16f(x-h) - f(x-2h)}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4)$$

Différence centrée d'ordre 4

Formule de différences finies pour $f^{(4)}(x)$

$$f^{(4)}(x) = \frac{f(x+2h) - 4f(x+h) + 6f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{h^4} + \mathcal{O}(h^2)$$

Différence centrée d'ordre 2

Extrapolation de Richardson

La technique d'Extrapolation de Richardson permet d'augmenter la précision d'une approximation. Considérons l'approximation $Q_{app}(h)$ d'ordre n , de la quantité exacte Q_{exa}

$$Q_{exa} = Q_{app}(h) + c_n h^n + c_{n+1} h^{n+1} + c_{n+2} h^{n+2} + \dots = Q_{app}(h) + \mathcal{O}(h^n) \quad (1.8)$$

Note: Généralement, plus h est petit, plus l'approximation (1.8) est précise.

La méthode d'extrapolation de Richardson consiste à obtenir, à partir de l'approximation (1.8) d'ordre n , la nouvelle approximation d'ordre au moins $(n+1)$ suivante

$$Q_{exa} = \frac{2^n Q_{app}(\frac{h}{2}) - Q_{app}(h)}{2^n - 1} + \mathcal{O}(h^{n+1}) \quad (1.9)$$

Remarque(s) :

- ① L'expression de droite de la relation (1.9) est donc une approximation d'ordre au moins $(n+1)$ de Q_{exa} .
- ② L'extrapolation de Richardson permet donc de gagner au moins un ordre de convergence.
- ③ On a une approximation d'ordre $(n+2)$ si $c_{n+1} = 0$.

Exemple 2

On a vu qu'en utilisant une différence avant d'ordre 1 pour calculer la dérivée de e^x en $x = 0$ on obtient

$$f'(0) \simeq \frac{e^{0+h} - e^0}{h} = \frac{e^{0,1} - 1}{0,1} = 1,05170918 = Q_{app}(0,1)$$

pour $h = 0,1$ et

$$f'(0) \simeq \frac{e^{0,05} - 1}{0,05} = 1,0254219 = Q_{app}(0,05)$$

pour $h = 0,05$. On peut maintenant faire le calcul à l'aide de l'équation (1.9) avec $n = 1$

$$f'(0) \simeq \frac{2^1 Q_{app}(0,05) - Q_{app}(0,1)}{2^1 - 1} = (2)(1,0254219) - 1,05170918 = 0,99913462$$

qui est une approximation d'ordre 2 et donc plus précise de $f'(0)$. Si l'on utilise une différence centrée d'ordre 2 avec $h = 0,05$

$$f'(0) \simeq \frac{e^{0,05} - e^{-0,05}}{2(0,05)} = 1,0004167 \text{ et avec } h = 0,025, \text{ on a } f'(0) \simeq \frac{e^{0,025} - e^{-0,025}}{2(0,025)} = 1,00010418$$

Dans ce cas, l'extrapolation de Richardson permet de gagner 2 ordres de précision puisque seules les puissances paires de h apparaissent dans le terme d'erreur. Plus précisément, on a

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!}h^2 + \frac{f^{(5)}(x)}{5!}h^4 + \mathcal{O}(h^6)$$

La différence centrée étant d'ordre 2, l'extrapolation de Richardson avec $n = 2$ donne une approximation d'ordre 4

$$f'(0) \simeq \frac{2^2 Q_{app}(0,025) - Q_{app}(0,05)}{2^2 - 1} = \frac{(4)(1,00010418) - 1,0004167}{3} = 1,000000007$$

Intégration numérique

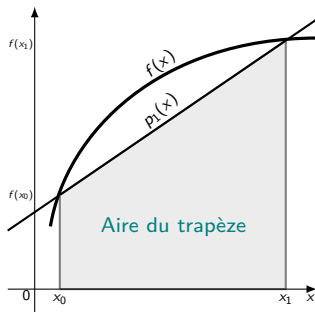
L'intégration numérique est basée principalement sur la relation

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} p_n(x) dx + \int_{x_0}^{x_n} E_n(x) dx \quad (2.1)$$

où $p_n(x)$ est un polynôme d'interpolation et $E_n(x)$ est l'erreur qui y est associée.

Remarque(s) : En principe, plus n est élevé, plus grande est la précision liée à la valeur de l'intégrale recherchée. En pratique cependant, on emploie rarement des valeurs de n supérieures à 4.

Méthode des trapèzes



Méthode du trapèze

On souhaite évaluer, si $f(x)$ est une fonction connue seulement en deux points $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ ou encore une fonction n'ayant pas de primitive, l'intégrale

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx$$

L'idée qui vient à l'esprit est de remplacer $f(x)$ par le polynôme $p_1(x)$ de degré 1 passant par ces points. La valeur approximative de l'intégrale correspond à l'aire sous la courbe du polynôme qui forme un trapèze et donne son nom à la méthode :

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \simeq \underbrace{\frac{(x_1 - x_0)}{2} (f(x_0) + f(x_1))}_{\text{Aire du trapèze}} \quad (2.2)$$

Remarque(s) : L'approximation est grossière et l'on peut d'ores et déjà soupçonner que le résultat sera peu précis.

En choisissant $p_1(x)$ comme étant un polynôme d'interpolation de Newton et en reprennant la relation (2.1), on a

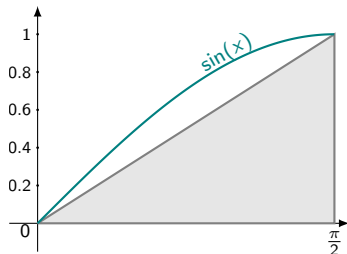
$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx + \int_{x_0}^{x_1} E_1(x) dx \\ &= \frac{(x_1 - x_0)}{2} (f(x_0) + f(x_1)) + \int_{x_0}^{x_1} \frac{f''(\zeta(x))}{2!} (x - x_0)(x - x_1) dx \quad (2.3)\end{aligned}$$

Remarque(s) :

- ① Le premier terme de droite de la relation (2.3) n'est rien d'autre que l'aire du trapèze décrit par la formule (2.2) (et représentée par la figure ci-dessus).
- ② Tandis que le deuxième terme de la relation (2.3) est l'erreur commise dont après simplification, la méthode du trapèze se résume donc à l'égalité suivante

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_1)) - \frac{f''(\eta)}{12} h^3, \text{ pour } \eta \in [x_0 \quad x_1]$$

- ③ La méthode du trapèze demeure peu précise.

Méthode du trapèze avec $f(x) = \sin(x)$

Exemple 3

Il s'agit d'évaluer numériquement cette intégrale, dont la valeur exacte est 1.

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) dx$$

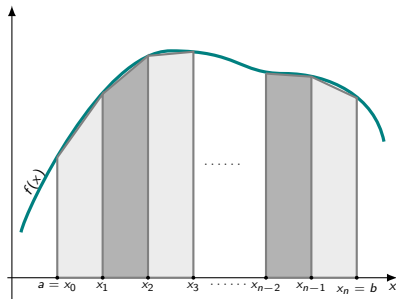
La méthode du trapèze donne

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin(x) dx = \frac{\frac{\pi}{2}}{2} \left(\sin(0) + \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right) = 0,785$$

qui est une piètre approximation de 1.

Remarque(s) : Ce résultat peu impressionnant vient du fait que l'on approche la fonction $\sin(x)$ dans l'intervalle $[0, \frac{\pi}{2}]$ au moyen d'un polynôme de degré 1. Cette approximation est assez médiocre, comme en témoigne la figure à coté.

Méthode des trapèzes composée



Méthode des trapèzes composée

Une meilleure stratégie consiste à décomposer l'intervalle où l'on doit faire l'intégration, soit l'intervalle $[a, b]$, en n sous-intervalles de longueur

$$h = x_{i+1} - x_i = \frac{b - a}{n} \quad (2.4)$$

Les différents points engendrés sont notés x_i pour $i = 0, 1, 2, \dots, n$ et dans chaque sous-intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, on peut utiliser la méthode du trapèze pour finalement obtenir l'approximation

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2 \left[f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{n-1}) \right] + f(x_n) \right) \quad (2.5)$$

qui est la **formule des trapèzes composée**. Qu'en est-il du terme d'erreur ? Dans chacun des n sous-intervalles $[x_i, x_{i+1}]$, on commet une erreur liée à la méthode du trapèze. l'erreur totale commise est

$$- \frac{b - a}{12} f''(\eta) h^2, \text{ pour } \eta \in [a, b] \quad (2.6)$$

la **méthode des trapèzes composée** est d'ordre 2.

Remarque(s) :

- ① La méthode du trapèze avec un seul intervalle est également connue sous le nom de **méthode des trapèzes simple**.
- ② La méthode des trapèzes composée est d'ordre 2. La méthode des trapèzes simple, bien que d'ordre 3, est rarement utilisée, car elle est trop imprécise.
- ③ La méthode des trapèzes composée donne un résultat exact si $f(x)$ est un polynôme de degré inférieur ou égal à 1. Cela s'explique par la présence de la dérivée seconde de $f(x)$ dans le terme d'erreur : celle-ci s'annule dans le cas de polynômes de degré 1.

Définition 2.1

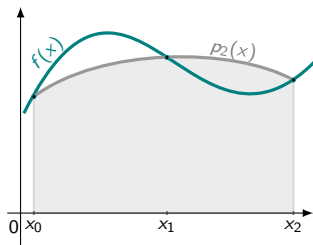
Les formules d'intégration numérique sont également appelées **formules de quadrature**.

Définition 2.2

Le **degré d'exactitude** ou encore le **degré de précision** d'une formule de quadrature est le plus grand entier n pour lequel la formule de quadrature est exacte pour tout polynôme de degré inférieur ou égal à n .

Note: Le degré d'exactitude de la formule des trapèzes est 1.

Formule de Simpson 1/3



Méthode de Simpson 1/3

En utilisant un polynôme de degré 2 dont la courbe passe par les points $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ et $(x_2, f(x_2))$. Ce polynôme est donné par la formule de Newton

$$p_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

Par ce polynôme, on a l'intégrale de $f(x)$

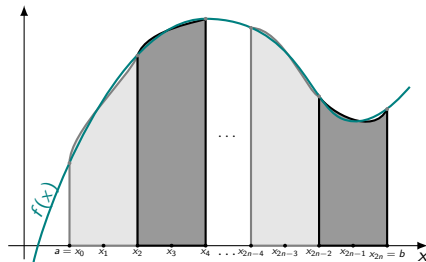
$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx + \int_{x_0}^{x_2} E_2(x) dx$$

La méthode de Simpson 1/3 simple est

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) - \frac{f^{(4)}(\eta)}{90} h^5 \quad (2.7)$$

où $\eta \in [x_0, x_2]$. Cette terminologie est due au facteur de $\frac{1}{3}$ qui multiplie h .

Remarque(s) : La valeur de h exprime toujours la distance entre les points x_i , et équivaut ici à la moitié de intervalle.



Méthode de Simpson 1/3 composée

On peut encore une fois améliorer la précision de la formule de Simpson 1/3 en la composant. Puisque la méthode simple requiert deux intervalles, on divise l'intervalle d'intégration $[a, b]$ en $2n$ sous-intervalles et d'utiliser la méthode de Simpson 1/3 simple dans chaque paire de sous-intervalle.

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx$$

$$\simeq \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{3} (f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2}))$$

Remarque(s) : Le terme d'erreur de la méthode de Simpson 1/3 composée est

$$-\frac{(b-a)}{180} f^{(4)}(\eta) h^4, \text{ pour un certain } \eta \in [a, b] \quad (2.8)$$

ce qui en fait une **méthode d'ordre 4**. De plus, en raison de la présence de la dérivée quatrième de $f(x)$, cette méthode est exacte dans le cas des polynômes de degré 3. **Le degré d'exactitude de cette méthode est donc 3.**

Formule de Simpson 3/8

- ① Si l'on utilise un polynôme de degré 3 dans l'intervalle $[x_0, x_3]$ et passant par les points $((x_i, f(x_i)), i = 0, 1, 2, 3)$, on obtient la **formule de Simpson 3/8** simple suivante

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \frac{3h}{8} (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)) - \frac{3f^{(4)}(\eta)}{80} h^5 \quad (2.9)$$

pour un certain $\eta \in [x_0, x_3]$.

- ② On peut également composer cette méthode en divisant l'intervalle d'intégration $[a, b]$ en $3n$ sous-intervalles de longueur

$$h = \frac{b - a}{3n}$$

et en utilisant la formule de Simpson 3/8 simple dans chaque triplet de sous-intervalle, on obtient

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_3} f(x) dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{3i}}^{x_{3i+3}} f(x) dx = \frac{3h}{8} \sum_{i=0}^{n-1} (f(x_{3i}) + 3f(x_{3i+1}) + 3f(x_{3i+2}) + f(x_{3i+3})) \\ &\quad - \frac{(b-a)f^{(4)}(\eta)}{80} h^4 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Remarque(s) : La méthode de Simpson 3/8 composée a le même ordre de convergence (soit 4) et le même degré d'exactitude (soit 3) que la méthode de Simpson 1/3 composée. Pour cette raison, on lui préfère souvent la méthode de Simpson 1/3.

Quadratures de Gauss-Legendre

La méthode du trapèze étudiée préalablement par exemple, a un degré d'exactitude égale à 1 (car étant exacte pour les polynômes de degré inférieur ou égal à 1) et requiert l'évaluation de la fonction $f(x)$ aux extrémités de l'intervalle

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{(b-a)}{2} (f(a) + f(b))$$

Question: Peut-on optimiser ce schéma d'intégration numérique en choisissant plus judicieusement les points où est évaluée la fonction $f(x)$?

La réponse à cette question est la base de [la méthode de quadratures de Gauss-Legendre](#), c'est à dire choisir judicieusement les points où évaluer la fonction $f(x)$ ainsi que les coefficients appropriés afin que le schéma d'intégration ait un degré d'exactitude supérieur aux méthodes d'intégration étudiées jusque là, en particulier celles de Newton-Cotes.

Pour effectuer l'intégrale $\int_a^b f(x)dx$ par la méthode de quadratures de Gauss-Legendre, on s'amène à l'intervalle $[-1, 1]$ par le changement de variable suivant

$$x = \frac{(b-a)t + (a+b)}{2} \quad \text{et} \quad dx = \frac{(b-a)}{2} dt \quad (2.11)$$

qui envoie $[-1, 1]$ sur l'intervalle $[a, b]$ et remplacer cette intégrale par la suivante

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 \underbrace{f\left(\frac{(b-a)t + (a+b)}{2}\right)}_{g(t)} \frac{(b-a)}{2} dt = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^1 g(t)dt \quad (2.12)$$

Définition 2.3

La quadrature de Gauss-Legendre à n points consiste à choisir t_i et w_i t.q. la quadrature

$$\int_{-1}^1 g(t)dt \simeq \sum_{i=1}^n w_i g(t_i) \quad (2.13)$$

ait un degré d'exactitude le plus élevé possible. Les t_i sont appelés **points d'intégration**, tandis que les coefficients w_i sont **les poids d'intégration**.

Quadrature de Gauss-Legendre à 1 point et à 2 points

- ❶ La quadrature de Gauss-Legendre à 1 point s'écrit

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \simeq 2g(0) \quad (2.14)$$

et est exacte pour tout polynôme de **degré inférieur ou égale à 1**.

Remarque(s) : La quadrature de Gauss-Legendre à 1 point a le même degré d'exactitude (soit 1) que la méthode du trapèze, qui est une formule à 2 points. La quadrature de Gauss-Legendre à 1 point est également connue sous le nom de **formule du point milieu**.

- ❷ La formule de Gauss-Legendre à 2 points s'écrit donc

$$\int_{-1}^1 g(t) dt \simeq g\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + g\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right) \quad (2.15)$$

et est exacte pour tout polynôme de **degré inférieur ou égale à 3**.

Remarque(s) : Pour un même nombre de points d'intégration, la quadrature de Gauss-Legendre à 2 points a un degré d'exactitude de 3 par comparaison avec 1 pour la méthode du trapèze. **Pour un même effort de calcul, on a ainsi une plus grande précision.**

Quadratures de Gauss-Legendre à n points

Il est possible de déterminer des quadratures de Gauss-Legendre avec un grand nombre de points. On détermine les $2n$ coefficients w_i et t_i en résolvant un système non linéaire de $2n$ équations que l'on obtient en prenant $p(t) = t^k$ pour $k = 0, 1, 2, \dots, (2n - 1)$. Le tableau ci-dessous résume les principales quadratures de Gauss-Legendre. En résumé, on a le résultat général suivant.

Théorème 2.1

La quadrature de Gauss-Legendre à n points (2.13) est exacte dans le cas des polynômes de degré $(2n - 1)$. Le degré d'exactitude de cette quadrature est donc $(2n - 1)$ et le terme d'erreur est donné par

$$\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} g^{(2n)}(\zeta), \quad \text{où } \zeta \in [-1, 1] \quad (2.16)$$

Exemple 4

À traiter en classe !

| Quadratures de Gauss-Legendre | | | |
|-------------------------------|---|---|-----------------------|
| n | Points
d'intégration
(t_i) | Poids
d'intégration
(w_i) | Degré
d'exactitude |
| 1 | 0 | 2 | 1 |
| 2 | $-\frac{\sqrt{3}}{3}$

$+\frac{\sqrt{3}}{3}$ | 1

1 | 3 |
| 3 | $-\frac{\sqrt{15}}{5}$

0

$+\frac{\sqrt{15}}{5}$ | $\frac{5}{9}$

$\frac{8}{9}$

$\frac{5}{9}$ | 5 |
| 4 | $-\frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}$

$-\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}$

$+\frac{\sqrt{525-70\sqrt{30}}}{35}$

$+\frac{\sqrt{525+70\sqrt{30}}}{35}$ | $\frac{18-\sqrt{30}}{36}$

$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$

$\frac{18+\sqrt{30}}{36}$

$\frac{18-\sqrt{30}}{36}$ | 7 |

À Retenir !

Je dois pouvoir répondre aux questions ^a suivantes :

- ① Je comprends comment construire une formule aux différences.
- ② Je sais appliquer les formules aux différences pour approximer les dérivées d'une fonction.
- ③ Je suis conscient des instabilités numériques qui peuvent apparaître dans les formules.
- ④ Je connais la différence entre les formules avant, arrière et centrée.
- ⑤ Je sais utiliser l'extrapolation de Richardson pour augmenter l'ordre d'une formule aux différences.
- ⑥ Je comprends et sais construire une quadrature de type Newton-Cotes.
- ⑦ Je sais exploiter le terme d'erreur pour déterminer approximativement le nombre de sous intervalles d'une formule composée.
- ⑧ Je comprends le concept de degré de précision.
- ⑨ Je sais utiliser les formules de Newton-Cotes et de Gauss-Legendre.
- ⑩ Je connais la précision des formules de Gauss-Legendre.
- ⑪ Basé sur le même principe que Gauss-Legendre je pourrais construire une formule de quadrature.

a. André Fortin : *Analyse numérique pour ingénieurs*, Presses Internationales Polytechnique 2016.