Programmation Numérique

Polytech Lille — IS 3 — Cours 3

30 janvier 2024

Intégration numérique

Étant donnés $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $a, b \in \mathbb{R}$, on cherche à calculer l'intégrale définie (un réel)

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{1}$$

En général, aucune primitive F de f n'est connue

- parce qu'il n'existe aucune formule finie pour F ou
- parce que f n'est connue que par une boîte noire ou par son graphe donné sous la forme d'une suite de points

En algorithmique numérique, on utilise des formules approchées appelées *formules de quadrature*

Erreurs de méthode vs erreurs d'arrondi

En algorithmique numérique, on distingue

- les erreurs d'arrondis
- des erreurs de méthode, qui sont les erreurs faites par l'algorithme employé pour mener le calcul, en supposant qu'il n'y a aucune erreur d'arrondi.

Remarques

- l'erreur d'une formule de quadrature = l'erreur de (la) méthode
- l'erreur d'une formule de quadrature = la relation entre précision du résultat et travail fourni
- l'ordre de la formule résume cette relation par un entier

Deux familles de méthodes

Les formules de Newton-Cotes (trapèzes, Simpson, ...)

- elles s'appliquent même dans le cas où f n'est connue que par son graphe, donné sous la forme d'une suite de points

Les formules de quadrature de Gauss (et autres)

- elles ne s'appliquent que si f est donné par une formule ou au moins un algorithme qui permet de l'évaluer
- elles sont plus efficaces que les méthodes de Newton-Cotes : elles ont un ordre plus élevé

Première formule de Newton-Cotes : les trapèzes

Soient deux points appartenant au graphe $y = f(x)$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0 + h \\ y_1 \end{pmatrix}.$$

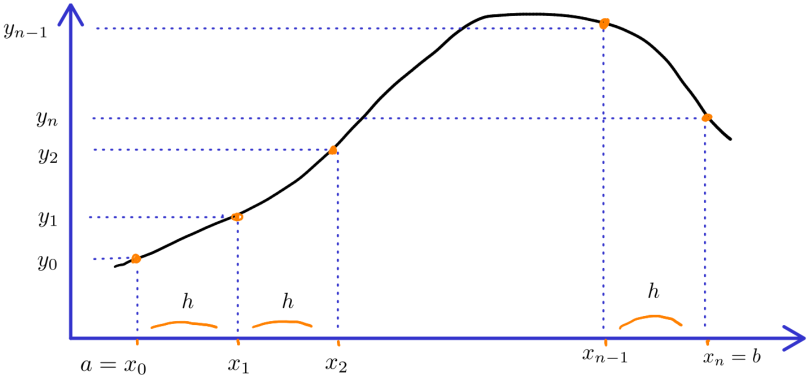
où $h = x_1 - x_0$ est la longueur du pas.

La formule du trapèze

$$\underbrace{\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,\mathrm{d}x}_{\text{intégrale recherchée}} \quad \simeq \quad \underbrace{h\left(\frac{y_0}{2} + \frac{y_1}{2}\right)}_{\text{aire du trapèze}} \; .$$

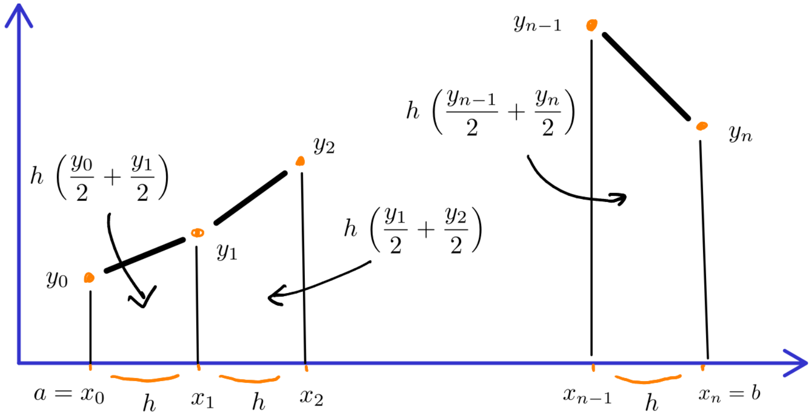
La formule des trapèzes composite

Soit $n > 0$ un nombre de pas



La formule des trapèzes composite

Soit $n > 0$ un nombre de pas



La formule des trapèzes composite

Soit $n > 0$ un nombre de pas

Notons

- $h = (b-a)/n$ la longueur d'un pas,
- $x_i = a + i\,h$ (abscisses équidistantes !) et
- $y_i = f(x_i)$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}$$

La formule des trapèzes composite

$$\underbrace{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x}_{\text{intégrale recherchée}} \simeq \underbrace{h\left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \cdots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2}\right)}_{\text{somme des aires des } n \text{ trapèzes}}.$$

Un autre point de vue sur les trapèzes

Soient deux points appartenant au graphe $y = f(x)$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_0 + h \\ y_1 \end{pmatrix},$$

p le polynôme d'interpolation défini par ces points

$$p(z) \quad = \quad \frac{1}{h}\left((x_0 + h - z)\, y_0 + (z - x_0)\, y_1\right).$$

On a :

$$\text{aire du trapèze} \quad = \quad \int_{x_0}^{x_0+h} p(z)\,\mathrm{d}z \quad = \quad h\left(\frac{y_0}{2} + \frac{y_1}{2}\right).$$

Idée

$$\underbrace{\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)\,\mathrm{d}x}_{\text{intégrale recherchée}} \quad \simeq \quad \underbrace{\int_{x_0}^{x_0+h} p(z)\,\mathrm{d}z}_{\text{intégrale du polynôme d'interpolation}}$$

La formule de Simpson

Soient trois points équidistants appartenant au graphe $y = f(x)$

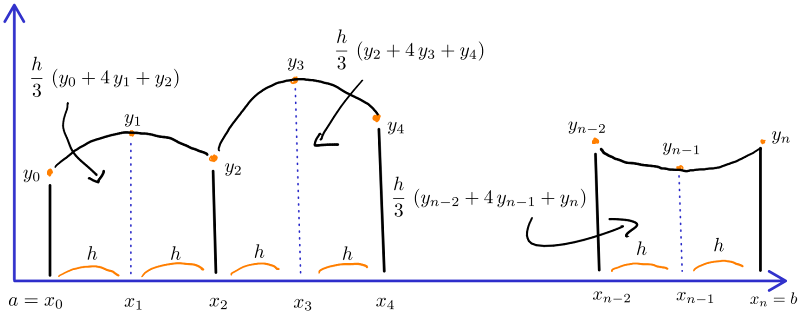
$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_0 + h \\ y_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_0 + 2\,h \\ y_2 \end{pmatrix}.$$

La formule de Simpson

$$\underbrace{\int_{x_0}^{x_0+2\,h} f(x)\,\mathrm{d}x}_{\text{intégrale recherchée}} \quad \simeq \quad \underbrace{\frac{h}{3}\,(y_0 + 4\,y_1 + y_2)}_{\text{intégrale de la parabole d'interpolation}}$$

La formule de Simpson composite

Soit $n > 0$ un nombre pair de pas.



La formule de Simpson composite

Soit $n > 0$ un nombre pair de pas.

Notons

- $h = (b-a)/n$ la longueur d'un pas,
- $x_i = a + i\,h$ (abscisses équidistantes !) et
- $y_i = f(x_i)$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \ldots, \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}$$

La formule de Simpson composite

$$\underbrace{\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x}_{\text{intégrale recherchée}} \simeq \underbrace{\frac{h}{3}\left(y_0 + 4\,y_1 + 2\,y_2 + 4\,y_3 + \cdots + 4\,y_{n-1} + y_n\right)}_{\text{somme des intégrales des } \frac{n}{2} \text{ paraboles}}$$

Les formules de Newton-Cotes

$$\begin{aligned} s &= \text{le nombre d'étages} \\ &= \text{de points utilisés pour le polynôme d'interpolation} \end{aligned}$$

s	ordre	poids b_i							nom
2	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$						trapèzes
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

Ordre des formules de Newton-Cotes

Def Une formule est **d'ordre p** si elle est exacte pour tout polynôme de degré strictement inférieur à p

Thm L'ordre d'une formule de Newton-Cotes à s étages est le plus petit entier pair supérieur ou égal à s

Thm Si une formule de quadrature est d'ordre p alors l'erreur de méthode est « en h^p »

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Premier calcul

- nombre de pas n_0, longueur du pas $h_0 = (b-a)/n_0$
- $erreur_0 = h_0^p$

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Premier calcul

- nombre de pas n_0, longueur du pas $h_0 = (b - a)/n_0$
- $erreur_0 = h_0^p$

Deuxième calcul

- nombre de pas $n_1 = 10\, n_0$, longueur du pas $h_1 = h_0/10$
- $erreur_1 = h_1^p$

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Premier calcul

- nombre de pas n_0, longueur du pas $h_0 = (b-a)/n_0$
- $erreur_0 = h_0^p$

Deuxième calcul

- nombre de pas $n_1 = 10\, n_0$, longueur du pas $h_1 = h_0/10$
- $erreur_1 = h_1^p$

On a gagné p décimales

$$erreur_1 = h_1^p = \frac{h_0^p}{10^p} = \frac{erreur_0}{10^p}.$$

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Premier calcul

- nombre de pas n_0, longueur du pas $h_0 = (b-a)/n_0$
- $erreur_0 = h_0^p$

Deuxième calcul

- nombre de pas $n_1 = 10\,n_0$, longueur du pas $h_1 = h_0/10$
- $erreur_1 = h_1^p$

On a gagné p décimales

$$erreur_1 = h_1^p = \frac{h_0^p}{10^p} = \frac{erreur_0}{10^p}.$$

Plus l'ordre est élevé mieux c'est

Thm Si une formule est d'ordre p alors l'erreur est « en h^p »

Hyp On approxime une intégrale avec une formule d'ordre p

Premier calcul

- nombre de pas n_0, longueur du pas $h_0 = (b-a)/n_0$
- $erreur_0 = h_0^p$

Deuxième calcul

- nombre de pas $n_1 = 2\, n_0$, longueur du pas $h_1 = h_0/2$
- $erreur_1 = h_1^p$

La mantisse du résultat a gagné p bits exacts

$$erreur_1 \quad = \quad h_1^p \quad = \quad \frac{h_0^p}{2^p} \quad = \quad \frac{erreur_0}{2^p}.$$

Les formules de quadrature de Gauss

Thm *Parce que les abscisses sont équidistantes*, l'ordre p d'une formule de Newton-Cotes à s étages est le plus petit entier pair supérieur ou égal à s

Gauss (1800) : si on choisit bien l'emplacement des abscisses (plus équidistantes) on peut obtenir des formules d'ordre $p = 2\,s$

Exemple de formule de quadrature de Gauss

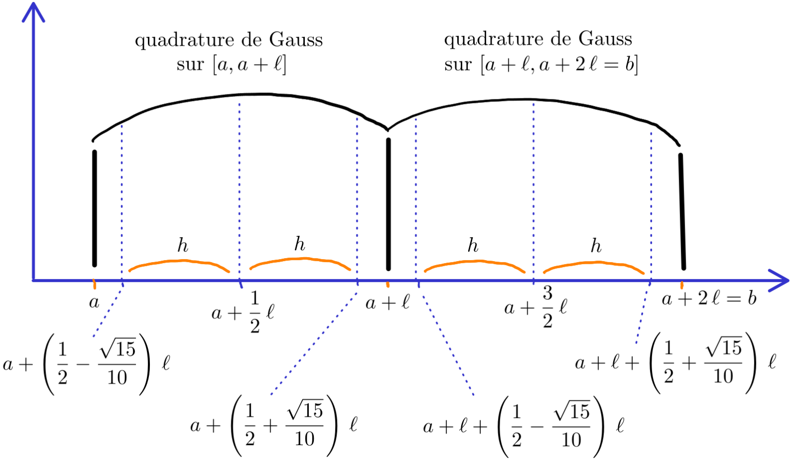
$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \quad \simeq \quad (b-a)\sum_{i=0}^{2} d_i\, f(a + c_i\,(b-a)) \quad \text{avec}$$

$$\begin{aligned} (d_0, d_1, d_2) &= \left(\tfrac{5}{18},\ \tfrac{8}{18},\ \tfrac{5}{18}\right), \\ (c_0, c_1, c_2) &= \left(\tfrac{1}{2} - \tfrac{\sqrt{15}}{10},\ \tfrac{1}{2},\ \tfrac{1}{2} + \tfrac{\sqrt{15}}{10}\right) \end{aligned}$$

contrôle l'emplacement des $s = 3$ abscisses

Utilisation d'une formule de quadrature de Gauss

On divise l'intervalle $[a, b]$ en sous-intervalles de longueur ℓ et on applique la formule de quadrature de Gauss sur chaque sous-intervalle



Algorithme à pas adaptatif

- utiliser simultanément deux formules de quadrature F_1 et F_2 d'ordres différents $p_1 > p_2$, comparer les résultats obtenus et, connaissant leur ordre, déduire une estimation de l'erreur
- si, sur un sous-intervalle, l'erreur est supérieure à un $\varepsilon > 0$ fixé par l'utilisateur, diviser la longueur ℓ par deux, sur ce sous-intervalle (pas adaptatif)
- pour limiter le nombre d'évaluations de f, on peut s'arranger pour que les abscisses utilisées pour F_2 soient un sous-ensemble de celles utilisées pour F_1 (on dit que F_2 est une formule emboîtée)
- on rencontre des quadratures de Gauss-Kronrod à $s = 30$ étages (Kronrod (1960) a perfectionné le système des formules emboîtées)

Intégrales non définies

Thm Supposons $x = \varphi(t)$ avec $\varphi(\alpha) = a$ et $\varphi(\beta) = b$. Alors

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_\alpha^\beta f'(\varphi(t))\,\varphi'(t)\,\mathrm{d}t$$

Intégrales non définies

Thm Supposons $x = \varphi(t)$ avec $\varphi(\alpha) = a$ et $\varphi(\beta) = b$. Alors

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \quad = \quad \int_\alpha^\beta f'(\varphi(t))\,\varphi'(t)\,\mathrm{d}t$$

L'intégrale de Gauss

$$\int_0^\infty e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad = \quad \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

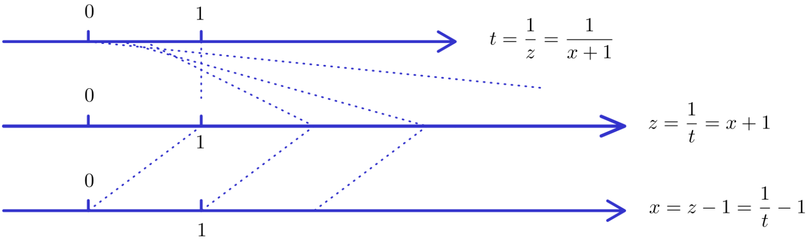
Intégrales non définies

Thm Supposons $x = \varphi(t)$ avec $\varphi(\alpha) = a$ et $\varphi(\beta) = b$. Alors

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \quad = \quad \int_\alpha^\beta f'(\varphi(t))\,\varphi'(t)\,\mathrm{d}t$$

L'intégrale de Gauss

$$\int_0^\infty e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad = \quad \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$



Intégrales non définies

Thm Supposons $x = \varphi(t)$ avec $\varphi(\alpha) = a$ et $\varphi(\beta) = b$. Alors

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \quad = \quad \int_\alpha^\beta f'(\varphi(t))\,\varphi'(t)\,\mathrm{d}t$$

L'intégrale de Gauss

$$\int_0^\infty e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad = \quad \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

En particulier, pour $\varphi(t) = \frac{1-t}{t}$, $\varphi'(t) = -\frac{1}{t^2}$, $\alpha = 0$, $\beta = 1$ on a

$$\int_0^\infty e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad = \quad \int_0^1 e^{-\left(\frac{1-t}{t}\right)^2}\,\frac{1}{t^2}\,\mathrm{d}t$$

qui peut s'approximer avec la quadrature de Gauss à $s = 3$ étages *parce qu'aucune abscisse n'atteint les bords de l'intervalle d'intégration.*