

1 Introduction

En analyse numérique, l'intégration numérique est l'ensemble des algorithmes utilisés pour calculer la valeur numérique d'une intégrale définie. Elle est souvent nécessaire lorsque le calcul analytique de l'intégrale est impossible ou trop complexe, ou lorsque la fonction à intégrer n'est connue qu'en certains points (données expérimentales par exemple).

Le principe général des méthodes de quadrature est d'approximer l'intégrale d'une fonction $f(x)$ sur un intervalle $[\alpha, \beta]$ par une somme pondérée des valeurs de la fonction en certains points x_i , appelés nœuds, multipliées par des coefficients w_i , appelés poids. Mathématiquement, on cherche à approcher :

$$I(f) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx \approx I_c(f) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

où x_i sont les nœuds et w_i sont les poids de la méthode de quadrature. L'objectif est de choisir les nœuds et les poids de manière à minimiser l'erreur d'approximation $E(f) = I(f) - I_c(f)$.

2 Méthodes de Newton-Cotes

2.1 Définition et formule générale

Définition 2.1 (Méthodes de Newton-Cotes). Les méthodes de Newton-Cotes sont une famille de méthodes de quadrature où les nœuds x_i sont équirépartis sur l'intervalle d'intégration $[\alpha, \beta]$. Plus précisément, on utilise le polynôme d'interpolation de Lagrange d'ordre K , associé à $K + 1$ points d'appui équidistants x_i sur $[\alpha, \beta]$. On définit les points x_i par :

$$x_i = \alpha + ih, \quad i = 0, \dots, K$$

où $h = \frac{\beta - \alpha}{K}$ est le pas de discrétisation.

La formule de quadrature de Newton-Cotes s'écrit alors :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^K \omega_i^{(K)} f(x_i)$$

où les poids $\omega_i^{(K)}$ sont donnés par :

$$\omega_i^{(K)} = \int_{\alpha}^{\beta} \mathcal{L}_i^{(K)}(x)dx$$

et $\mathcal{L}_i^{(K)}(x)$ est le i -ème polynôme de base de Lagrange d'ordre K associé aux points x_0, x_1, \dots, x_K . On a l'expression explicite pour les poids :

$$\omega_i^{(K)} = \int_{\alpha}^{\beta} \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^K \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$

2.2 Cas particuliers

Les méthodes de Newton-Cotes portent des noms spécifiques pour les petites valeurs de K .

2.2.1 Formule des trapèzes ($K = 1$)

Pour $K = 1$, on a la formule des trapèzes. Les points sont $x_0 = \alpha$ et $x_1 = \beta$. Les poids sont :

$$\omega_0^{(1)} = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \frac{1}{x_0 - x_1} \int_{\alpha}^{\beta} (x - \beta) dx = \frac{1}{\alpha - \beta} \left[\frac{x^2}{2} - \beta x \right]_{\alpha}^{\beta} = \frac{1}{\alpha - \beta} \left(\left(\frac{\beta^2}{2} - \beta^2 \right) - \left(\frac{\alpha^2}{2} - \beta \alpha \right) \right) = \frac{\beta - \alpha}{2}$$

$$\omega_1^{(1)} = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \frac{1}{x_1 - x_0} \int_{\alpha}^{\beta} (x - \alpha) dx = \frac{1}{\beta - \alpha} \left[\frac{x^2}{2} - \alpha x \right]_{\alpha}^{\beta} = \frac{1}{\beta - \alpha} \left(\left(\frac{\beta^2}{2} - \alpha\beta \right) - \left(\frac{\alpha^2}{2} - \alpha^2 \right) \right) = \frac{\beta - \alpha}{2}$$

Ainsi, la formule des trapèzes est :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \frac{\beta - \alpha}{2} [f(\alpha) + f(\beta)]$$

2.2.2 Formule de Simpson ($K = 2$)

Pour $K = 2$, on a la formule de Simpson. Les points sont $x_0 = \alpha$, $x_1 = \frac{\alpha + \beta}{2}$, $x_2 = \beta$. La formule de Simpson est :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \frac{\beta - \alpha}{6} \left[f(\alpha) + 4f\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) + f(\beta) \right]$$

2.2.3 Formule de Boole-Villarceau ($K = 4$)

Pour $K = 4$, on a la formule de Boole-Villarceau :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \frac{\beta - \alpha}{90} [7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)]$$

où $x_i = \alpha + i \frac{\beta - \alpha}{4}$ pour $i = 0, \dots, 4$.

2.2.4 Formule de Hardy ($K = 6$)

Pour $K = 6$, on a la formule de Hardy :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \frac{\beta - \alpha}{840} [41f(x_0) + 216f(x_1) + 27f(x_2) + 272f(x_3) + 27f(x_4) + 216f(x_5) + 41f(x_6)]$$

où $x_i = \alpha + i \frac{\beta - \alpha}{6}$ pour $i = 0, \dots, 6$.

2.3 Sensibilité aux erreurs d'arrondi

Pour K élevé ($K \geq 8$), les poids $\omega_i^{(K)}$ peuvent prendre des valeurs négatives. Ceci rend les formules sensibles aux erreurs d'arrondi, car des erreurs sur les valeurs de $f(x_i)$ peuvent être amplifiées par des poids de signes opposés. Il est donc généralement déconseillé d'utiliser les formules de Newton-Cotes d'ordre élevé en pratique.

3 Théorème de Peano et estimation de l'erreur

Theorem 3.1 (Théorème de Peano). Soit $I_c(f) = \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$ une formule de quadrature d'ordre p , c'est-à-dire exacte pour les polynômes de degré inférieur ou égal à p . Alors, pour toute fonction $f \in C^{p+1}[\alpha, \beta]$, l'erreur d'intégration $E(f) = I(f) - I_c(f)$ peut s'écrire :

$$E(f) = \int_{\alpha}^{\beta} K(t) f^{(p+1)}(t) dt$$

où le noyau de Peano $K(t)$ est donné par :

$$K(t) = \frac{1}{p!} E_x[(x - t)_+^p] = \frac{1}{p!} \left[\int_{\alpha}^{\beta} (x - t)_+^p dx - \sum_{i=0}^n \omega_i (x_i - t)_+^p \right]$$

avec $(x - t)_+ = \max(0, x - t)$.

Remark 3.2. Lorsque le noyau de Peano $K(t)$ est de signe constant sur $[\alpha, \beta]$, il existe $\xi \in [\alpha, \beta]$ tel que :

$$E(f) = f^{(p+1)}(\xi) \int_{\alpha}^{\beta} K(t) dt$$

De plus, on a la relation :

$$\int_{\alpha}^{\beta} K(t) dt = E\left(\frac{x^{p+1}}{(p+1)!}\right) = I\left(\frac{x^{p+1}}{(p+1)!}\right) - I_c\left(\frac{x^{p+1}}{(p+1)!}\right)$$

Dans le cas des méthodes de Newton-Cotes d'ordre K , le noyau de Peano est de signe constant si K est pair, et de signe non constant si K est impair.

4 Formules de Gauss-Legendre

4.1 Construction de la formule de quadrature

Les formules de Gauss-Legendre sont des méthodes de quadrature où les nœuds x_i ne sont pas fixés à l'avance, mais sont choisis de manière à maximiser l'ordre de la méthode. On cherche à construire une formule de quadrature à n points :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i)$$

qui soit exacte pour les polynômes de degré le plus élevé possible. On a $2n$ degrés de liberté (n nœuds et n poids). On peut donc espérer atteindre l'ordre $2n - 1$. Il existe un choix optimal des nœuds x_i qui permet d'atteindre cet ordre.

Les nœuds des formules de Gauss-Legendre sur l'intervalle $[-1, 1]$ sont les racines du polynôme de Legendre $P_n(x)$ de degré n . Les polynômes de Legendre sont orthogonaux sur $[-1, 1]$ par rapport au produit scalaire :

$$\langle P, Q \rangle = \int_{-1}^1 P(x) Q(x) dx$$

et peuvent être définis par la relation de récurrence :

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x$$

$$L_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} [(2n+1)xL_n(x) - nL_{n-1}(x)], \quad n \geq 1$$

4.2 Exemples

4.2.1 Formule de Gauss-Legendre à 2 points

On cherche une formule à 2 points :

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2)$$

On impose l'exactitude pour les polynômes de degré 0, 1, 2, 3.

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 1dx &= 2 = \omega_1 + \omega_2 \\ \int_{-1}^1 xdx &= 0 = \omega_1 x_1 + \omega_2 x_2 \\ \int_{-1}^1 x^2 dx &= \frac{2}{3} = \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 \\ \int_{-1}^1 x^3 dx &= 0 = \omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3\end{aligned}$$

De la première équation, $\omega_2 = 2 - \omega_1$. De la deuxième, si $x_1 \neq x_2$, $\omega_1 x_1 = -\omega_2 x_2 = -(2 - \omega_1)x_2 = \omega_1 x_2 - 2x_2$, donc $\omega_1(x_1 - x_2) = -2x_2$, et $\omega_1 = \frac{-2x_2}{x_1 - x_2} = \frac{2x_2}{x_2 - x_1}$. Si on prend $x_1 = -x_2$, alors de la deuxième équation, $0 = \omega_1 x_1 + \omega_2(-x_1) = (\omega_1 - \omega_2)x_1$. Si $x_1 \neq 0$, alors $\omega_1 = \omega_2$. Avec $\omega_1 + \omega_2 = 2$, on obtient $\omega_1 = \omega_2 = 1$. La troisième équation devient $\frac{2}{3} = x_1^2 + x_2^2 = 2x_1^2$ si $x_2 = -x_1$. Donc $x_1^2 = \frac{1}{3}$, et $x_1 = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}$. Prenons $x_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ et $x_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Vérifions la quatrième équation : $\omega_1 x_1^3 + \omega_2 x_2^3 = 1 \cdot (-\frac{1}{\sqrt{3}})^3 + 1 \cdot (\frac{1}{\sqrt{3}})^3 = -\frac{1}{3\sqrt{3}} + \frac{1}{3\sqrt{3}} = 0$.

Ainsi, la formule de Gauss-Legendre à 2 points est :

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Elle est exacte pour les polynômes de degré $3 = 2 \times 2 - 1$.

4.2.2 Formule de Gauss-Legendre à 3 points

On cherche une formule à 3 points :

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \omega_1 f(x_1) + \omega_2 f(x_2) + \omega_3 f(x_3)$$

On impose l'exactitude pour les polynômes de degré 0, 1, 2, 3, 4, 5. Les nœuds x_1, x_2, x_3 sont les racines du polynôme de Legendre $L_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$. Les racines sont $x = 0$ et $5x^2 - 3 = 0$, donc $x = \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$. Prenons $x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $x_2 = 0$, $x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Par symétrie, on peut s'attendre à $\omega_1 = \omega_3$.

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 1dx &= 2 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 2\omega_1 + \omega_2 \\ \int_{-1}^1 x^2 dx &= \frac{2}{3} = \omega_1 x_1^2 + \omega_2 x_2^2 + \omega_3 x_3^2 = \omega_1 \frac{3}{5} + 0 + \omega_3 \frac{3}{5} = 2\omega_1 \frac{3}{5}\end{aligned}$$

De la deuxième équation, $2\omega_1 \frac{3}{5} = \frac{2}{3}$, donc $\omega_1 = \frac{5}{9}$. Alors $\omega_3 = \omega_1 = \frac{5}{9}$. Et de la première équation, $\omega_2 = 2 - 2\omega_1 = 2 - 2\frac{5}{9} = 2 - \frac{10}{9} = \frac{18-10}{9} = \frac{8}{9}$.

Ainsi, la formule de Gauss-Legendre à 3 points est :

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

Elle est exacte pour les polynômes de degré $5 = 2 \times 3 - 1$.

4.3 Propriété d'exactitude

Proposition 4.1. La formule de quadrature de Gauss-Legendre à n points est exacte pour les polynômes de degré inférieur ou égal à $2n - 1$. De plus, c'est la formule de quadrature à n points qui a l'ordre le plus élevé possible.

5 Visualisation des méthodes de quadrature

Pour illustrer les méthodes de quadrature, considérons l'intégrale de la fonction $f(x) = \sin(x)$ sur l'intervalle $[0, \pi]$. Nous allons visualiser l'approximation de cette intégrale en utilisant la méthode des trapèzes et la méthode de Simpson.

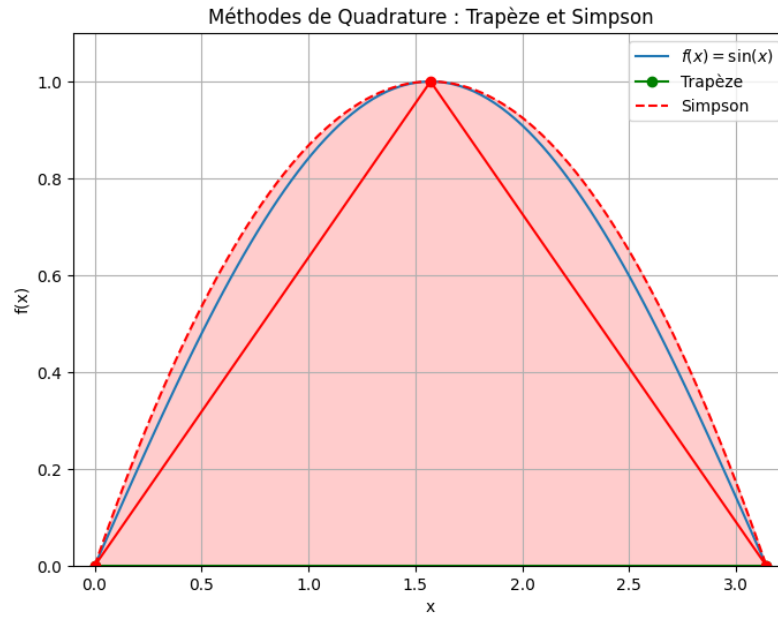


Figure 1: Visualisation des méthodes du trapèze et de Simpson pour l'intégration numérique de $f(x) = \sin(x)$ sur $[0, \pi]$.