T.D. d'Informatique PC^*

Autour de la méthode de Newton-Cotes d'intégration numérique

11 décembre 2003

Le but de ce TD est de décrire quelques méthodes élémentaires d'intégration numérique. Il va s'agir de calculer des intégrales de la forme

$$I = \int_a^b f(t)dt$$

où l'intervalle $[a,b]$ est un intervalle réel compact et où la fonction f en question est continue à valeur réelle. Nous allons examiner quelques méthodes élémentaires en nous acheminant vers la *méthode de Romberg*. Cette méthode est assez générale et très efficace. Elle est couramment utilisée dans les logiciels de calcul formel. Il existe cependant des méthodes plus élaborées à l'aide de familles de polynômes orthogonaux comme les polynômes de Legendre, Tchebichev, Laguerre ou Hermite.

1. Méthodes de quadrature élémentaires

Soit f une fonction continue d'un intervalle réel $[a,b] \subset \mathbb{R}$ à valeur dans $\mathbb{R}$. Le principe de la méthode est le suivant : choisissons une subdivision de l'intervalle $[a,b]$ en n points :

$$\alpha_0 = a < \alpha_1 < \ldots < \alpha_{n-1} = b,$$

alors l'intégrale de f sur $[a,b]$ s'écrit :

$$\int_a^b f(t)dt = \sum_{i=0}^{n-2} \int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(t)dt.$$

Il s'agit d'approximer chaque intégrale $\int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(t)dt$ par une combinaison barycentrique de valeurs de f, de la forme suivante :

$$\int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} f(t)dt \sim (\alpha_{i+1} - \alpha_i) \sum_{j=0}^{l_i} \omega_{i,j} f(\zeta_{i,j}),$$

où les $\zeta_{i,j}$ appartiennent à $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$ et $\sum_{j=0}^{l_i} \omega_{i,j} = 1$.

1.2. Le cas le plus simple : les sommes de Riemann

Ici, nous traitons le cas $l_i = l = 0$. Autrement dit, les combinaisons barycentriques sont constantes.

(1) Dans ce cas, la méthode correspond à une approximation bien connue de l'intégrale, laquelle ? Écrivez une procédure riemann qui prend en paramètre la fonction f, les bornes a et b de l'intervalle et la longueur n de la subdivision et qui calcule l'approximation de l'intégrale I associée. On se contentera d'une subdivision à pas fixe.

(2) Vérifiez sur des exemples que la suite riemann(f,a,b,n) converge vers I. Testez sur des exemples quelle est la vitesse de convergence.

1.3. La méthode des trapèzes

Cette méthode bien connue d'approximation de l'intégrale I consiste, non pas à approximer I, ou l'aire sous la courbe de f, par des rectangles de hauteur $f(\alpha_i)$ et de base $[\alpha_i, \alpha_{i+1}]$ comme l'on vient de le faire mais par des trapèzes de même base reliant $f(\alpha_i)$ à $f(\alpha_{i+1})$.

(1) Écrivez une procédure trapeze qui prend en paramètre f, les bornes a et b et la longueur n de la subdivision et qui calcule I comme expliqué ci-dessus.

(2) Vérifiez comme précédemment la convergence et testez sa vitesse sur des exemples. Comparez la méthode à celle des sommes de Riemann.

(3) Cette méthode est-elle une méthode de quadrature ?

1.4. La méthode de Newton-Cotes

La méthode de Newton-Cotes d'ordre l (avec l appartenant à $\mathbb{N}$) procède de la manière suivante : étant donné la subdivision précédente $\alpha_0, \ldots, \alpha_{n-1}$, prenons entre chaque α_i et α_{i+1} une autre subdivision $\zeta_{i,j}$ de longueur l. Posons $P_i(X)$ le polynôme d'interpolation associé, c'est-à-dire le polynôme $P_i(X)$ vérifiant $P_i(\zeta_{i,j}) = f(\zeta_{i,j})$. pour tout j. L'intégrale I est alors approximée par :

$$I = \int_a^b f(t)dt \sim \sum_{i=0}^{n-2} \int_{\alpha_i}^{\alpha_{i+1}} P_i(t)dt.$$

(1) Écrivez une procédure NCloc1 prenant en paramètres la fonction f, les bornes a et b de l'intervalle, la longueur l de la subdivision de ζ, et produisant l'intégrale du polynôme d'interpolation : $P(\zeta_i) = f(\zeta_i)$. On se contentera encore d'une subdivision à pas fixe. On pourra utiliser la fonction interp de MAPLE pour créer un tel polynôme d'interpolation.

(2) Pour $l = 2$, que constatez vous ? Pour $l = 3$, la méthode d'approximation obtenue porte le nom de *méthode de Simpson*. Pour $l = 4$, elle porte le nom de *méthode des 3/8*, pour $l = 5$, de *méthode de Boole-Villarceau* et pour $l = 6$ de *Weedle-Hardy*. Voilà pour la terminologie.

(3) Si vous testez cette méthode sur un polynôme de degré $l - 1$ que constatez-vous ?

(4) Testez le résultat de manière « générique » pour différents l. À l'aide de ces observations, est-ce que la méthode de Newton-Cotes est une méthode de quadrature ? Pouvez-vous le prouver mathématiquement ?

(5) Il s'agit maintenant de retrouver ce résultat de manière algorithmique. Fort de votre preuve de la question précédente, écrivez une procédure qui calcule pour un l donné les coefficients $\omega_{i,j}$ qui apparaissent dans la formule de Newton-Cotes. On appellera cette procédure coeffNC.

(6) Vous pouvez alors réecrire votre procédure NCloc1 à l'aide de ces nouveaux coefficients. On appellera cette nouvelle procédure NCloc2.
(7) Écrivez, à l'aide de la fonction NCloc1 une procédure NC1 prenant en paramètres la fonction f, les bornes a et b de l'intervalle, la longueur n de la subdivision en α et la longueur l de la subdivision de ζ, et produisant l'approximation de I de la méthode de Newton-Cotes. Faites de même avec NCloc2, on obtiendra alors NC2. Comparez les deux méthodes. Algorithmiquement, laquelle vous paraît la plus convaincante ? Est-ce visible sur des exemples ?
(8) Testez sur des exemples la convergence pour différents l. Que constatez-vous ?

2. Questions de vitesse de convergence

2.2. Une majoration théorique de l'erreur

Proposition 1 *On conserve ici les notations de la partie précédente. On suppose de plus que la fonction f est $\mathcal{C}^\infty$ sur l'intervalle $[a,b]$. Notons $NC_{n,l}$ l'approximation de $I = \int_a^b f(t)dt$ obtenue par la méthode de Newton-Cotes précédente. Alors pour tout l appartenant à $\mathbb{N}^*$, il existe une constante $0 < K_l < 1$ telle que :*

$$\left|\int_a^b f(t)dt - NC_{n,l}\right| \leq K_l \frac{(b-a)^{l+2} M_{l+1}}{n^{l+1}},$$

où M_l désigne un majorant de la valeur absolue de la fonction dérivée l-ième de f sur l'intervalle $[a,b]$.

Vérifiez sur des exemples la véracité de cette proposition.

2.3. Accélération de Romberg

Le principe de la méthode est le suivant : si T_n désigne l'approximation de I par la méthode des trapèzes, alors de la *formule d'Euler-MacLaurin,* on tire le développement asymptotique suivant en $1/n$, l'entier n tendant vers l'infini :

$$T_n = I + \sum_{k=1}^{N} c_k (\frac{1}{n})^{2k} + O\left((\frac{1}{n})^{2N+2}\right).$$

La méthode de Romberg consiste à appliquer à T_n le *procédé d'extrapolation de Richardson*, *cf.* explications.

Écrivez une procédure romberg prenant en paramètres la fonction f, les bornes a et b, l'entier n correspondant à la taille de la subdivision et le nombre m d'opérations du précédé de Richardson et produisant l'approximation recherchée. Vous pouvez alors tester la convergence. Quelle semble être la vitesse ? Comparez avec les méthodes précédentes.