Méthodes de calcul de valeurs approchées d'une intégrale.

1 Les formules de quadrature de type interpolation : Présentation

On cherche à calculer l'intégrale $I(f) = \int_a^b \mu(x) f(x)\, dx$ où μ est une fonction dite *fonction poids* et f une fonction réelle.

Définition 1.1 On appelle *formule de quadrature à $n+1$ points* : $\sum_{i=0}^{n} A_i^n f(x_i)$ où les A_i^n ne dépendent pas de f et les $x_i \in [a;b]$.

Définition 1.2 On appelle *formule de quadrature de type interpolation* une formule $\int_a^b P_f(x)\mu(x)\, dx$ où P_f est un polynôme interpolateur de f. On note $R(f) = I(f) - \int_a^b P_f(x)\mu(x)\, dx$.

Définition 1.3 Une formule de quadrature est dite *exacte* sur un ensemble V si $\forall f \in V, R(f) = 0$.

Définition 1.4 Une formule de quadrature est dite *convergente sur V* si et seulement si $\forall f \in V \lim\limits_{n \to +\infty} R(f) = 0$.

Théorème 1.1 Une formule de quadrature à $n+1$ points est exacte sur l'expace vectoriel des polynômes de degré au plus n (que l'on notera $\mathscr{P}_n$) ssi elle est du type interpolation à $n+1$ points.

Définition 1.5 On dit qu'une formule de quadrature a un *degré de précision* n si elle est exacte pour tout x^k avec $k \in [\![0;n]\!]$ et non exacte pour x^n.

Théorème 1.2 Supposons que $f \in C^{n+1}$ et que la formule de quadrature soit de précision $n+1$.

Alors on a $R(f) = \dfrac{1}{n!}\displaystyle\int_a^b f^{(n+1)}(t) K_n(t) dt$ où $K_n(t) = R(x \mapsto \max(0, (x-t)^n))$.

K_n est appelé *noyau de Peano.*

Par suite, si K_n est de signe constant, $\exists \xi \in]a;b[$ tq $R(f) = \dfrac{R(x^{n+1})}{n+1} f^{(n+1)}(\xi)$.

Définition 1.6 Une formule de quadrature est dite *stable* si $\forall(\varepsilon_0,\ldots,\varepsilon_n) \in {\mathbb{R}_+^*}^n$ $\exists M \in \mathbb{R}_+$ tel que $|\sum_{i=0}^n A_i^n \varepsilon_i| \leqslant M \max_k |\varepsilon_k|$.

Théorème 1.3 Une formule de quadrature est stable ssi $\exists M \in \mathbb{R}_+$ tel que $|\sum_{i=0}^n A_i^n| \leqslant M$.

Théorème 1.4 Une méthode de quadrature de type interpolation est convergente sur $C[a;b]$ ssi les formules sont stables.

2 Les formules de Newton-Cotes

2.1 Présentation et propriétés

On considère la fonction de poids constante égale à 1.

Définition 2.1 On appelle *formule de Newton-Cotes* la formule de quadrature $I(f) = (b-a)\displaystyle\sum_{j=0}^n B_j^n f(a+jh)$ où $h = \frac{b-a}{n}$ et $B_j^n = \dfrac{1}{b-a}\displaystyle\int_a^b l_j(x)dx$ où $l_j = \dfrac{\prod_{k=0;k\neq j}^n (x-x_k)}{\prod_{k=0;k\neq j}^n (x_j - x_k)}$

Théorème 2.1 $B_j^n = \dfrac{(-1)^{n-j}}{j!(n-j)!n}\displaystyle\int_0^n \prod_{k=0;k\neq j}^n (t-k)dt$. On a alors $B_j^n = B_{n-j}^n$.

Théorème 2.2 Le degré de précision des formules de Newton-Cotes à $(n+1)$ points est n si n est impair, $n+1$ sinon.

Théorème 2.3 Si le nombre de points d'interpolation est $n+1$, dans les formules de Newton-Cotes fermées, avec n pair, l'erreur est en h^{n+3} ; avec n impair, l'erreur est en h^{n+2}

Théorème 2.4 Les formules de Newton-Cotes sont instables.

Définition 2.2 On appelle *méthodes composites de degré q* les méthodes de Newton-Cotes de degré q appliquées à des sous-intervalles de $[a;b]$

Théorème 2.5 On considère une formule composite de degré q à $n+1$ points telle que $f \in C^{q+2}[a;b]$. Alors $\exists c \in \mathbb{R}$ tel que $|R(f)| \leqslant c\dfrac{(b-a)^{q+3}}{n^{q+2}} \max\limits_{x\in[a;b]} |f^{(q+2)}(x)|$ si q pair et

$|R(f)| \leqslant c\dfrac{(b-a)^{q+2}}{n^{q+1}} \max\limits_{x\in[a;b]} |f^{(q+1)}(x)|$ si q impair.

Théorème 2.6 Si q est tel que $B_j^q > 0$ pour tout j alors la formule composite de degré q est stable.

2.2 Exemples

La formule du trapèze Lorsque $n = 1$, on a *la formule du trapèze* :
$\displaystyle\int_a^b f(t)dt \approx \frac{(b-a)}{2}[f(a)+f(b)]$. Considérons p intervalles,
la *formule composite du trapèze* est $\displaystyle h\left[\sum_{k=1}^{p-1} f(a+kh) + \frac{f(a)+f(b)}{2}\right]$.

La formule de Simpson Lorsque $n = 2$, on a *la formule de Simpson* :
$\displaystyle\int_a^b f(t)dt \approx \frac{(b-a)}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]$. La *formule composite de Simpson* est
$\displaystyle\frac{h}{3}\left[f(a)+f(b)+2\sum_{k=1}^{(p-2)/2} f(a+2kh)+4\sum_{k=1}^{(p-2)/2)} f(a+(2k+1)h\right]$.

2.3 La méthode de Romberg

Cette méthode est dérivée des méthodes de Newton-Cotes et permet d'accélérer la convergence.

Soit $\displaystyle T_m(f) = \frac{b-a}{2^m}\left(\frac{f(a)+f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{2^m-1} f(a+k\frac{b-a}{2^m})\right)$.

Définition 2.3 La *méthode d'intégration de Romberg* est décrite par $T_m^0 = T_m$ et
$\displaystyle T_m^n = \frac{4^n T_{m+1}^{n-1} - T_m^{n-1}}{4^n - 1}$.

Théorème 2.7 La convergence de T_m^n vers $I(f)$ lorsque $n \to +\infty$ est surlinéaire (ie. plus rapide que toute suite géométrique).

3 Les formules de Gauss

3.1 Généralités

Théorème 3.1 La formule de quadrature à $(n+1)$ points est exacte sur $\mathscr{P}_{2n+1}$ ssi (1) elle est du type interpolation à $(n+1)$ points et (2) les abscisses d'interpolation sont telles que $v(x) = \prod_{i=0}^n (x-x_i)$ vérifie $\int_a^b x^q v(x)\mu(x)\,dx = 0\ \forall q \in [\![0;n]\!]$ (Condition d'orthogonalité).

Définition 3.1 On appelle *formules de Gauss* des formules de quadrature vérifiant les conditions précédentes.

Théorème 3.2 Si $\mu(x) > 0$ et continue sur $[a;b]$, $\exists! v \in \mathscr{P}_n\ /\ v = \prod_{i=0}^n (x-x_i)$ où $x_j \neq x_i$ *si* $i \neq j$ et $\forall i \in [\![0;n]\!]\ x_i \in [a;b]$ tel que $\int_a^b x^q v(x)\mu(x)\,dx = 0\ \forall q \in [\![0;n]\!]$.

Théorème 3.3 Si la formule de quadrature est exacte sur $\mathscr{P}_{2n+1}$, alors on a
$\forall i \in [\![0; n]\!],\ A_i^n > 0$

Corollaire 3.1 Les formules de quadratures du type Gauss sont stables, donc convergentes.

Corollaire 3.2 Le degré de précision des formules de Gauss à $(n+1)$ points est $2n+1$.

Corollaire 3.3 Pour $f \in C^{2n+2}[a;b]$, $R_n(f) = \dfrac{f^{2n+2}(\alpha)}{(2n+2)!} \displaystyle\int_a^b \mu(x) v^2(x)\, dx$ où $\alpha \in]a;b[$.

3.2 Exemples de polynômes suivant le choix des fonctions de poids

Les polynômes de Legendre

Théorème 3.4 Les polynômes de Legendre ($L_n(x) = \frac{1}{n!2^n} \frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$) vérifient les conditions du théorème 3.1 pour la fonction de poids $\mu(x) = 1$ sur $[-1;1]$. On a alors
$A_k^n = \displaystyle\int_{-1}^1 \left(\frac{L_{n+1}(x)}{(x-x_k)L'_{n+1}(x_k)} \right)^2 dx$

Les polynômes de Tchebichev

Théorème 3.5 Les polynômes de Tchebichev ($T_n(x) = cos(nArc\ cos\ x)$) vérifient les conditions du théorème 3.1 pour la fonction de poids $\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ sur $[-1;1]$.

Théorème 3.6 Soit $f \in C^{2n}([-1;1], \mathbb{R})$.

$$\exists \xi \in [-1;1] \text{ tel que } \int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx = \sum_{i=1}^n \frac{\pi}{n} f(cos\frac{(2i-1)\pi}{2n}) + \frac{2\pi}{2^{2n}(2n)!} f^{2n}(\xi)$$

Les polynômes de Laguerre

Théorème 3.7 Les polynômes de Laguerre ($L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x})$) vérifient les conditions du théorème 3.1 pour la fonction de poids $\mu(x) = e^{-x}$.

Les polynômes d'Hermite

Théorème 3.8 Les polynômes d'Hermite ($H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x^2/2})$) vérifient les conditions du théorème 3.1 pour la fonction de poids $\mu(x) = e^{-x^2/2}$.

4 Méthode de Monte-Carlo

4.1 Principe

Soit $f \in L^1(\mathbb{R}^d)$. On cherche à évaluer $I = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)dx$. Supposons que l'on puisse écrire $I = \int_{\mathbb{R}^d} f_1(x)g(x)dx$ où $f = f_1 g$ et g est la densité sur $\mathbb{R}^d$ d'une loi μ que l'on sait simuler. On considère un vecteur aléatoire $U = (U_1, ..., U_d) \rightsquigarrow \mu$, $X = f_1(U)$ et une suite iid (X_n) de copies de X. On a alors, par la loi des grands nombres $I = E[X]$ et $\overline{X_n}$ converge ps vers I. De plus (théorème central-limite), si $f \in L^2(\mathbb{R}^d, g(x)dx)$ $V(X) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}^d} \frac{[f(x)]^2}{g(x)}dx$

4.2 Remarques

Remarque 4.1 La convergence est en $\sigma/\sqrt{n}$, ce qui est relativement lent. Néanmoins, la méthode ne dépend pas de la régularité de la fonction à intégrer et s'applique aisément à des intégrales multiples.

Théorème 4.1 Si $|f_1(x)| \leqslant A$ ps, $\sigma^2 \leqslant B$ et si $0 \leqslant \beta < \dfrac{B}{A^2}$, on a
$P\left(|\overline{X_n} - I| \leqslant \beta A\right) \geqslant 1 - 2\exp\left(-\dfrac{\beta^2 A^2 n}{4B}\right)$.

Remarque 4.2 Dans la pratique, on cherche f_1 et g de sorte de minimiser la variance.

4.3 Exemple

On cherche à calculer $\pi = 4I$ avec $I = \displaystyle\int_0^1 f(x)dx$ et $f(x) = \sqrt{1 - x^2}$.

Avec la méthode de base, on obtient $\sigma^2 = \displaystyle\int (1 - x^2)dx - I^2 = \frac{2}{3} - I^2 \simeq 0,05$.

En posant $g(x) = \dfrac{1 - \beta x^2}{1 - \beta/3}$ on obtient $\sigma^2 = \dfrac{1}{\beta} - \dfrac{1}{3} - \dfrac{(3 - \beta)(1 - \beta)\ln(\beta)}{2\beta\sqrt{\beta}}$. Une recherche du minimum en β donne $\sigma^2 \simeq 0,0029$.

Remarques

Attention, j'ai choisi de ne pas ou peu parler des :
- formules d'Euler-Maclaurin
- intégrales avec singularités
- intégrales infinies
- intégrales doubles (approximées grâce à des interpolations sur des triangles)
- formules de Newton-Cotes ouvertes (ne tient pas compte des bornes dans les formules de newton-Cotes).
- formules de Gauss-Radeau et Gauss-Lobatto (formules de Gauss dans lesquelles on impose l'utilisation d'une ou des deux bornes.)

Bibliographie

[1] A. Chambert-Loir et S. Fermigier. *Exercices de mathématiques pour l'agrégation*, volume Analyse 2. Masson, 1995.

[2] J.Stoer et R. Burlisch. *Introduction to Numerical Analysis*. Texts in Applied Mathematics, 2 edition, 1992.

[3] Michelle Schatzman. *Analyse numérique*. InterEditions, 1991.

[4] R. Théodor. *Initiation à l'Analyse Numérique*. Masson, 3 edition, 1989.

[5] Paul S. Toulouse. *Thèmes de Probabilités et Statistiques*. Dunod, 1999.