TD 2 : Estimation de la valeur des intégrales par des formules de quadratures

Contexte :

Depuis le lycée, on étudie l'intégrabilité de fonctions $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. Cependant, cela nécessite de connaître la fonction en tout point de l'intégrale d'intégration. Dans certains cas, ces contraintes ne sont pas satisfaites, notamment dans le cas où vous êtes en train de réaliser une expérience scientifique. Ce TD a pour but d'introduire le concept d'estimation d'une intégrale au travers de méthodes de calcul numérique. Trois techniques les plus simples sont présentées avec des détails sur leurs performances.

Objectif :

Estimer l'intégrale avec le plus de précision possible et avec un coût numérique faible.

1 Calculs numériques et intégrations

1.1 Généralités

Une intégrale ne peut être calculée analytiquement lorsque :

— L'expression analytique de la fonction est inconnue (résultats d'expériences,...) ;

— L'intégrale n'a pas d'expression analytique (fonction $\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp^{-t'^2} dt'$ ou $\sin(x^2)$ par exemples)

— Le calcul analytique est long et compliqué ;

— La fonction à intégrer est constituée d'autres fonctions elles-même difficiles à évaluer ;

1.2 Mesures de performances

Nous mesurons la performance des algorithmes en fonction de deux éléments :

—

—

2 Lois de Newton-Cotes

Lors du cours précédent, vous avez vu que nous pouvions interpoler une fonction par un polynôme. Nous allons faire de même pour l'estimation d'intégrales. L'intérêt de cette approche est qu'elle est simple et intuitive. Nous pouvons obtenir une précision suffisante lorsque le pas de discrétisation est très petit.

Polynôme de Lagrange

Le polynôme de Lagrange P de degré n interpole f aux points $x_0, ..., x_n \in [a, b]$, tel que :

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) \qquad \text{où} \quad l_i(x) = \frac{\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x - x_j)}{\prod_{j=0, j\neq i}^{n} (x_i - x_j)} \tag{1}$$

On peut alors noter l'approximation de I :

2.1 Méthode des rectangles à gauche

Il s'agit de la méthode avec le degré le plus bas, car nous prenons un polynôme de degré 0 pour approximer la fonction f sur chacun des n sous-intervalles de l'intervalle $[a, b]$:

2.1.1 Calcul d'aire pour $n = 1$

2.1.2 Calcul d'erreur pour $n = 1$

Afin de calculer, nous utilisons le théorème des accroissements finis :

$$\forall x \in [a,b], \exists\, \xi \in [a,b], \frac{f(x) - f(a)}{(x-a)} = f'(\xi) \Leftrightarrow f(x) = f(a) + (x-a)f'(\xi) \quad (2)$$

Exercice : À partir de la formule du théorème des accroissements finis et de l'expression $\hat{I}_1 = \int_a^b P(x)$, déterminez la formule de l'erreur $\epsilon = |I - \hat{I}_1|$.

Corrigé :

2.1.3 Calcul d'aire pour $n > 1$

Comme vous pouvez le penser, $\hat{I}_1$ n'est pas très représentatif de l'intégrale I. On s'attend avoir une erreur assez grande, surtout quand la mesure de l'intervalle $[a, b]$ augmente.

Nous pouvons traiter ce problèmes de deux manières pour obtenir une forme plus simple du polynôme, numériquement :

Et géométriquement :

2.1.4 Calcul d'erreur pour $n > 1$

L'erreur devient :

2.2 Méthode des points milieux

Même si l'on subdivise l'intervalle $[a, b]$ en beaucoup d'intervalles, nous commettrons une erreur d'estimation si les fonctions étudiées ne sont pas constantes par morceaux. Autrement dit, si la dérivée des fonctions étudiées est non nulle, voire de valeur très grande sur $[a, b]$, l'estimation ne sera pas parfaite. En effet, notre erreur dépend de $f'(\xi)$.

Pour améliorer la précision, nous avons plusieurs techniques : la technique des points milieux et la méthode des trapèzes. L'idée est de considérer à présent des polynômes de degré 1.

2.2.1 Calcul d'aire pour $n = 1$

L'aire sous la courbe de la fonction sera équivalente à l'aire d'un rectangle :

Nous avons :

2.2.2 Calcul d'erreur pour $n = 1$

Pour calculer l'erreur on peut utiliser le théorème des accroissements finis du deuxième ordre :

$$\forall x \in [a,b], \exists \xi \in [a,b], f(x) = f(\frac{a+b}{2}) + (x - \frac{a+b}{2}) f'(\frac{a+b}{2}) + (x - \frac{a+b}{2})^2 \frac{f''(\xi)}{2} \quad (3)$$

Exercice : À partir de la formule du théorème des accroissements finis et de l'expression $\hat{I}_1 = \int_a^b P(x)$, déterminez la formule de l'erreur $\epsilon = |I - \hat{I}_1|$.

Corrigé :

2.3 Méthode des trapèzes

2.3.1 Calcul d'aire pour $n = 1$

L'aire sous la courbe de la fonction sera équivalente à l'aire d'un trapèze :

Exercice : Déterminez l'équation du polynôme de degré 1 caractérisant cette méthode.

Corrigé :

Exercice : Déterminez la valeur de l'intégrale pour la méthode des trapèzes, soit par calcul numérique, soit par géométrie.

Corrigé :

2.3.2 Calcul d'erreur pour $n = 1$

On ne va pas procéder exactement comme précédemment. On va partir de la formule du développement de Taylor :

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(a) + \frac{1}{2}(x - a)^2 f''(\xi) \tag{4}$$

2.3.3 Calcul d'aire pour $n > 1$

Comme pour la technique des rectangles, nous pouvons étudier notre fonction en découpant $[a, b]$ en plusieurs intervalles et en sommant l'aire des trapèzes correspondants.

Cela revient à considérer le polynôme P suivant :

2.3.4 Calcul d'erreur pour $n > 1$

L'erreur devient :

2.4 Méthode de Simpson

2.4.1 Calcul d'aire pour $n = 1$

La méthode Simpson utilise des polynômes du second degré.

Nous vous donnons le polynôme :

$$\begin{aligned} P(x) &= \alpha x^2 + \beta x + \gamma \\ &= 2\frac{f(a) - 2f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{(b-a)^2}(x - \frac{a+b}{2})^2 + \frac{f(b) - f(a)}{(b-a)}(x - \frac{a+b}{2}) + f(\frac{a+b}{2}) \end{aligned} \tag{5}$$

Vous pouvez constater que l'on se rapproche d'une forme "Three points stencil" pour avoir des informations sur le coefficient en x^2 de la fonction.

L'estimée de l'intégrale sera donnée par :

$$\hat{I} = (b-a)\frac{f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)}{6} \tag{6}$$

L'erreur sera de :

$$\epsilon = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \tag{7}$$

Nous avons encore gagné deux degré de précision dans l'erreur (degré 4).

2.4.2 Calcul d'aire pour $n > 1$

Comme pour les deux techniques précédentes, nous pouvons subdiviser notre intervalle en plusieurs sous parties :

$$\hat{I} = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-1} f(a+(2k+1)h) + 2\sum_{k=1}^{\frac{n}{2}-1} f(a+2kh) + f(b)\right) \tag{8}$$

NB : Nous ajoutons ici une petite précision. Afin que cette simplification soit possible, il nous faut considérer $n = 2n$. En effet, nous devons avoir un n intervalle toujours multiple de 2. Cette précision peut se démontrer facilement en considérant le nombre d'intervalles. C'est pourquoi en TP, il vous faudra être prudent si vous implémentez directement la formule du calcul d'aire.

2.4.3 Calcul d'erreur pour $n > 1$

L'erreur sera de :

Nous avons encore gagné deux degré dans l'erreur.

3 Et ensuite ?

Il nous est possible d'améliorer nos valeurs d'estimation pour l'intégrale, en nous basant sur des techniques vues lors du premier cours. En effet, il nous est possible d'utiliser des polynômes de degré supérieurs au travers du polynôme de Lagrange ou de polynômes orthogonaux.

4 Et pour les TP ?

Il vous sera demandé de calculer une aire sous la courbe selon les différentes techniques et de calculer l'erreur approximativement. Deux choix s'offrent donc à vous : soit vous implémentez la formule directement soit vous calculez itérativement chaque valeur des rectangles/trapèzes/courbes puis de les sommer. Nous reverrons ça en temps voulu.

5 Tableau résumé