Objectifs du chapitre:

1. À partir de la connaissance d'une fonction f en certains points, être capable d'obtenir une approximation de $f'(x)$ (ou $f''(x)$) en ces mêmes points.

   Exemple d'application : obtenir une approximation de la vitesse à partir d'une position calculée ponctuellement.

   $\rightarrow$ **Différentiation numérique**

2. Être capable d'obtenir une approximation de

$$\int_a^b f(x)\, dx$$

   Exemple d'application : obtenir une approximation d'une intégrale quand il n'existe pas de primitive simple, comme par exemple

$$\int_0^1 e^{-x^2}\, dx$$

   $\rightarrow$ **Intégration numérique**

> Différentiation numérique

But : Obtenir une approximation de f', f'' à partir de la connaissance de f en certains points.

Première approche: développements de Taylor

Retour sur le chapitre 1: Soit f une fonction régulière, alors en effectuant le développement de Taylor d'ordre 2 de f en un point x , on a

$$f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{f''(\xi_h)}{2} h^2, \ \xi_h \in [x, x+h]$$

Soit encore

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \underbrace{\frac{O(h^2)}{h}}_{O(h)}$$

et donc

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

Autrement dit, à partir de la connaissance de la fonction f en deux points (x et $x+h$), on est capable d'en déduire une approximation de la dérivée en x.

Seconde approche: polynôme d'interpolation de degré n

On a

$$f(x) = p_n(x) + E_n(x), \quad x \in [x_0, x_n]$$

avec

$$E_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j), \quad \xi_x \in [x_0, x_n]$$

On a donc

$$f'(x) = p_n'(x) + E_n'(x)$$

et de manière générale, pour $p \leq n$

$$f^{(p)}(x) = p_n^{(p)}(x) + E_n^{(p)}(x)$$

Remarque(s)

- Comme l'erreur peut osciller fortement avec n grand, on le gardera petit,
- Ne peut s'utiliser que pour $x \in [x_0, x_n]$ et $p \leq n$.

Regardons ce qu'il se passe pour $n = 1$, avec deux points d'interpolations $(x_0, f(x_0))$ et $(x_1, f(x_1))$. On a

$$f(x) = \underbrace{f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0)}_{p_1(x)} + \underbrace{\frac{f''(\xi_x)}{2}(x - x_0)(x - x_1)}_{E_1(x)}, \ \xi_x \in [x_0, x_1]$$

Ainsi, pour tous $x \in [x_0, x_1]$

$$\begin{aligned} f'(x) &= f[x_0, x_1] + E_1'(x) \\ &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + E_1'(x) \end{aligned} \tag{1}$$

Posons $h = x_1 - x_0 > 0 \Rightarrow x_1 = x_0 + h$, l'équation (1) devient alors

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + E_1'(x)$$

avec

$$E_1'(x) = \frac{f'''(\xi_x)}{2}\xi_x'(x - x_0)(x - x_1) + \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - x_0) + \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - x_1).$$

En x_0, on a ainsi

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + E_1'(x_0)$$

avec

$$\begin{aligned} E_1'(x_0) &= \frac{f'''(\xi_{x_0})}{2}\xi_x'(x_0 - x_0)(x_0 - x_1) + \frac{f''(\xi_{x_0})}{2}(x_0 - x_0) + \frac{f''(\xi_{x_0})}{2}(x_0 - x_1). \\ &= \frac{f''(\xi_{x_0})}{2}(x_0 - x_1) = \underbrace{-h\frac{f''(\xi_{x_0})}{2}}_{O(h)},\ \xi_{x_0} \in [x_0, x_1] \end{aligned}$$

On retrouve ainsi une expression semblable à celle obtenue par développement de Taylor en x_0

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - h\frac{f''(\xi_{x_0})}{2}} \\ = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + O(h) \end{aligned} \tag{2}$$

L'équation (2) s'appelle **différence finie avant d'ordre 1**.

En faisant la même chose en x_1, on obtient

$$f'(x_1) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + E_1'(x_1)$$

Avec

$$E_1'(x_1) = h\frac{f''(\xi_{x_1})}{2}, \ \xi_{x_1} \in [x_0, x_1]$$

et donc

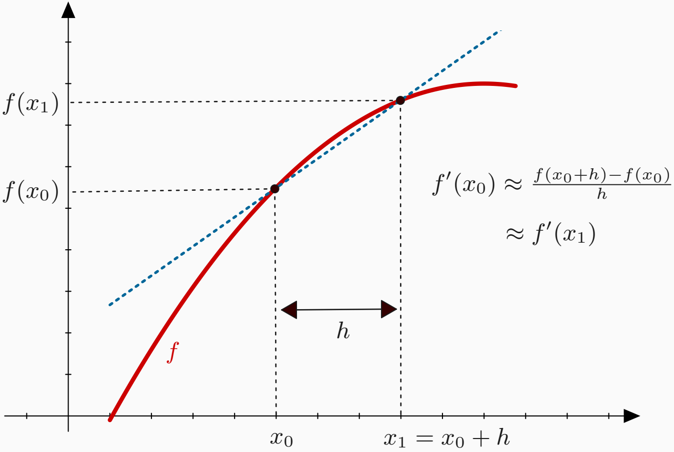
$$\begin{aligned} \boldsymbol{f'(x_1)} &\boldsymbol{= \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + h\frac{f''(\xi_{x_1})}{2}} \\ &= \frac{f(x_1) - f(x_1-h)}{h} + O(h) \end{aligned} \tag{3}$$

L'équation (3) s'appelle **différence finie arrière d'ordre 1**.

Attention !

Bien que la quantité $\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ approxime à la fois la dérivée en x_0 et x_1, il faut bien garder à l'esprit que le terme d'erreur est différent aux deux endroits.

Interprétation géométrique :



Cela revient à approcher la dérivée (en x_0 ou x_1) par la pente de la droite passant par $(x_0, f(x_0))$ et $(x_1, f(x_1))$.

Est-il possible de construire une approximation de f' d'ordre 2 ?

$\rightarrow$ Par développement de Taylor : en considérant des développements faisant intervenir x, $x+h$, $x-h$, $x+2h$, $x-2h$

$\rightarrow$ Par interpolation : en considérant trois points $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$, et donc le polynôme d'interpolation de degré 2.

$$\begin{aligned} f'(x) &= p_2'(x) + E_2'(x) \\ &= f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](2x - (x_0 + x_1)) + E_2'(x) \end{aligned}$$

Et en évaluant cette expression successivement en x_0, x_1, x_2.

Dans les deux cas, on obtient les trois **approximations d'ordre 2** suivantes.

Formules de différences finies d'ordre 2 pour $f'(x)$

$x_0 = x$

$x_1 = x + h$

$x_2 = x + 2h$

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h} + \underbrace{\frac{h^2 f'''(\xi)}{3}}_{O(h^2)}$$

Différence avant d'ordre 2

$x_0 = x - h$

$x_1 = x$

$x_2 = x + h$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \underbrace{\frac{h^2 f'''(\xi)}{3}}_{O(h^2)}$$

Différence centrée d'ordre 2

$x_0 = x - 2h$

$x_1 = x - h$

$x_2 = x$

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \underbrace{\frac{h^2 f'''(\xi)}{3}}_{O(h^2)}$$

Différence arrière d'ordre 2

Toutes ces formules aux différences sont d'ordre 2. Les mentions avant, centrée et arrière renvoient au point où l'on calcule la dérivée et aux points utilisés pour la calculer.

Toutes les formules vues jusqu'à présent concernent f', mais **il est également possible d'approximer f'' via les mêmes approches.**

$$\begin{aligned} f''(x) &= p_2''(x) + E_2''(x) \\ &= 2f[x_0, x_1, x_2] + E_2''(x) = \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} + E_2''(x) \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned} f''(x_0) &\approx \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2} \\ f''(x_1) &\approx \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} = \frac{f(x_1 + h) - 2f(x_1) + f(x_1 - h)}{h^2} \\ f''(x_2) &\approx \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2} = \frac{f(x_2) - 2f(x_2 - h) + f(x_2 - 2h)}{h^2} \end{aligned}$$

Chacune de ces expressions nous donne une formule de différences finies pour f''.
Pour analyser l'ordre d'approximation, il est plus simple de repasser par les développements de Taylor.

Considérons la formule

$$\frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}$$

Et effectuons deux développements de Taylor

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + 4h^2\frac{f''(x)}{2} + O(h^3) \tag{4}$$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2\frac{f''(x)}{2} + O(h^3) \tag{5}$$

Ainsi, en combinant (4) et (5), $f(x+2h) - 2f(x-h) + f(x) = h^2 f''(x) + O(h^3)$

$$\Rightarrow f''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2} + O(h)$$

$\rightarrow$ **Différence finie avant d'ordre 1.**

Considérons à présent

$$\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

Et comme précédemment, effectuons deux développements de Taylor,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2\frac{f''(x)}{2} + h^3\frac{f'''(x)}{6} + O(h^4) \tag{6}$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + h^2\frac{f''(x)}{2} - h^3\frac{f'''(x)}{6} + O(h^4) \tag{7}$$

En additionnant (6) et (7), on a

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + O(h^4)$$

Ainsi,

$$f''(x) = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + O(h^2)$$

$\rightarrow$ **Différence finie centrée d'ordre 2.**

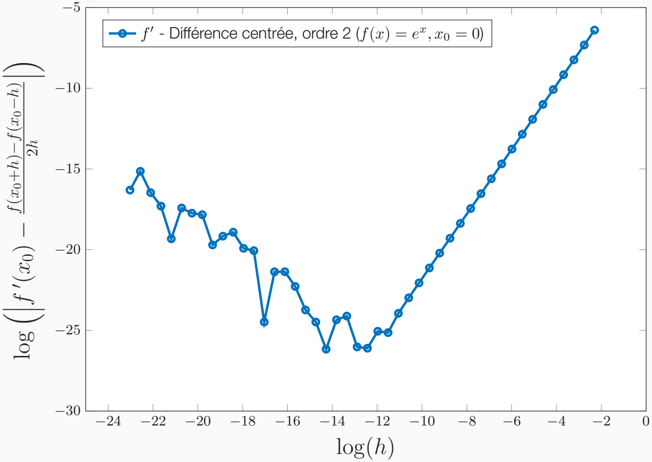
Attention ! (Ordre de la différence centrée)

Si on avait arrêté les développements de $f(x+h)$ et $f(x-h)$ à l'ordre 3, on aurait conclu que l'approximation était d'ordre 1. Cependant, en poussant les développements à l'ordre 4, on se rend compte que **les dérivées troisièmes s'annulent** ! **Morale:** quand les formules sont symétriques, il est prudent de pousser les développements à un ordre supérieur.

Le tableau suivant résume les approximations par différences finies possibles pour f'' ainsi que leur ordre.

Formules de différences finies pour $f''(x)$
$f''(x) = \dfrac{f(x-2h) - 2f(x-h) + f(x)}{h^2} + O(h)$ Différence arrière d'ordre 1
$f''(x) = \dfrac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2} + O(h)$ Différence avant d'ordre 1
$f''(x) = \dfrac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$ Différence centrée d'ordre 2
$f''(x) = \dfrac{-f(x+2h) + 16f(x+h) - 30f(x) + 16f(x-h) - f(x-2h)}{12h^2} + O(h^4)$ Différence centrée d'ordre 4

- Toutes ces formules de différentiation pour f' et f'' sont numériquement «dangereuses» quand $h \to 0$ (soustractions de nombres proches)[1].



Instabilité de la formule aux différences finies centrée pour f'.

[1] voir `script_instabilites_diff_finies.m` pour exemples avec différences finies avant et centrée.

BONUS ! Pas à l'examen

Il est possible d'obtenir une formule beaucoup plus stable numériquement en passant par les nombres complexes. L'idée est de considérer un «pas» complexe ih dans le développement de Taylor.

Par exemple, pour obtenir une approximation de $f'(x_0)$, considérons le développement

$$f(x_0 + ih) = f(x_0) + ihf'(x_0) - h^2\frac{f''(x_0)}{2} - ih^3\frac{f'''(x_0)}{6} + \cdots$$

et prenons la partie imaginaire de chaque bord,

$$\begin{aligned}\operatorname{Im}(f(x_0 + ih)) &= \operatorname{Im}\left(f(x_0) + ihf'(x_0) - h^2\frac{f''(x_0)}{2} - ih^3\frac{f'''(x_0)}{6} + \cdots\right)\\ &= hf'(x_0) + O(h^3)\end{aligned}$$

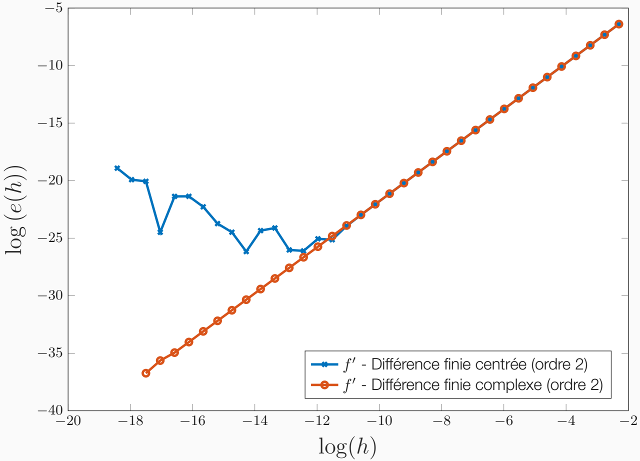
et donc

$$f'(x_0) = \frac{\operatorname{Im}(f(x_0 + ih))}{h} + O(h^2)$$

$\rightarrow$ On obtient une formule d'ordre 2 sans soustraction dangereuse au numérateur.

BONUS ! Pas à l'examen

La formule est beaucoup plus stable numériquement comme le montre le graphique ci-dessous ($f(x) = e^x$, $x_0 = 0$).



Stabilité de la différentiation pour f' en utilisant les nombres complexes.

Il est possible d'augmenter la précision sans diminuer de manière excessive le h

$\rightarrow$ **Extrapolation de Richardson**

Soit Q une quantité que l'on cherche à approcher (quantité exacte). Supposons que l'on dispose déjà d'une approximation Q_h d'ordre n de cette quantité, *i.e*

$$Q = Q_h + O(h^n) = Q_h + \alpha h^n + \beta h^{n+1} + O(h^{n+2}) \tag{8}$$

L'extrapolation de Richardson consiste à obtenir, à partir d'une autre approximation d'ordre n, une approximation d'ordre **au moins** $\boldsymbol{n+1}$. Pour cela, prenons $\frac{h}{2}$ dans (8), alors on a

$$Q = Q_{\frac{h}{2}} + \alpha \frac{h^n}{2^n} + \underbrace{\beta \frac{h^{n+1}}{2^{n+1}} + O(h^{n+2})}_{O(h^{n+1})} \tag{9}$$

En combinant (8) et (9), on a

$$Q = \frac{2^n Q_{\frac{h}{2}} - Q_h}{2^n - 1} + O(h^{n+1})$$

La quantité

$$Q_r = \frac{2^n Q_{\frac{h}{2}} - Q_h}{2^n - 1} \tag{10}$$

est donc une approximation d'ordre $n+1$ de Q. En pratique:

- On calcule donc deux approximations d'ordre n, en h et $\frac{h}{2}$,
- On calcule la quantité (10) afin d'avoir une approximation plus précise [2].

L'extrapolation de Richardson n'est pas magique et **n'empêche pas les instabilités !**

✓ L'extrapolation de Richardson ne s'applique pas qu'aux formules de différences finies, mais à n'importe quelle approximation (mais implique de connaître l'ordre de la méthode fournissant l'approximation).

Toutes les formules aux différences finies concernent la différentiation numérique. Voyons à présent **l'intégration numérique**.

[2] voir `script_richardson_diff_finies.m` pour application numérique aux différences finies.

Intégration numérique

But : obtenir une approximation de

$$\int_a^b f(x)\,dx$$

On appelle une **formule de quadrature** ou formule d'intégration une formule permettant d'approximer l'intégrale d'une fonction. Deux familles:

- Formules de Newton-Cotes,
- Formules de Gauss-Legendre.

De manière générale, l'intégration numérique est basée sur la relation suivante

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b p_n(x) + \int_a^b E_n(x)\,dx$$

Autrement dit, on «remplace» f par son polynôme d'interpolation de degré n.

Définition (Degré de précision)

Une formule de quadrature intégrant exactement tous les polynômes de degré inférieur ou égal à p sera dite **formule de quadrature de degré de précision p**.

Première formule: formule du trapèze.

Considérons un intervalle $[a, b]$ et prenons $n = 1$,

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b p_1(x)\,dx + \int_a^b E_1(x)\,dx \\ &= \int_a^b f(a) + f\,[a, b](x-a)\,dx + \int_a^b E_1(x)\,dx \\ &= (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right) + \int_a^b E_1(x)\,dx\end{aligned}$$

Théorème

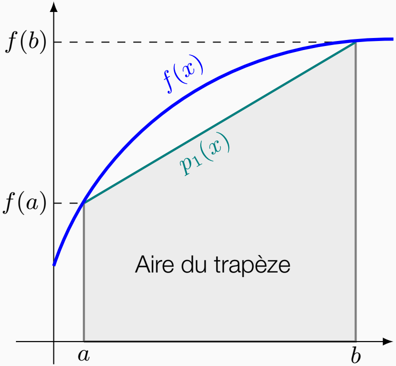
Il existe $\eta \in [a, b]$ tel que

$$\int_a^b E_1(x)\,dx = \int_a^b \frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,dx = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

et donc, il existe $\eta \in [a, b]$ tel que

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right) - \frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$$



Géométriquement, cela revient à approcher l'aire sous la courbe f par l'aire du trapèze formé des sommets $(a, 0)$, $(b, 0)$, $(a, f(a))$, $(b, f(b))$.

Si f est un polynôme de degré 0 ou 1, alors l'erreur sera nulle, car la dérivée dans le terme d'erreur s'annule $\rightarrow$ **le degré de précision de la formule des trapèzes est 1.**

Le terme d'erreur

$$-\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

nous indique que **l'ordre de l'approximation est 3** et que l'erreur est proportionnelle au cube de la longueur de l'intervalle.

$\rightarrow$ plus l'intervalle est grand, plus l'erreur est grande !

✓ Bien que l'approximation soit d'ordre 3, la méthode est relativement peu précise si l'intervalle $[a, b]$ est «grand».

En général, pour être plus précis, on «compose» la formule du trapèze.

Trapèzes composée: diviser l'intervalle $[a, b]$ en n sous-intervalles et appliquer la formule du trapèze sur chaque sous-intervalle.

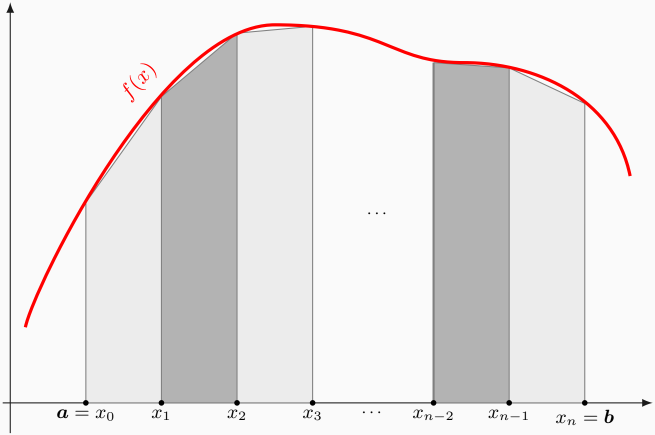


Illustration de la formule des trapèzes composée

Soit $x_0 = a < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$ une discrétisation de l'intervalle $[a, b]$ en n sous-intervalles $[x_i, x_{i+1}]$, sur lesquels on va appliquer la formule du trapèze.

Pour simplifier, on prendra les intervalles $[x_i, x_{i+1}]$ de même longueur, *i.e* $h = h_i = x_{i+1} - x_i = \frac{b-a}{n}$. On a alors

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \\
&\approx \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \left(\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \right) \\
&= \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+1}) + f(x_i) \\
&= \frac{h}{2} (f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n))
\end{aligned}$$

Qu'en est-il du terme d'erreur ?

On a une erreur sur chaque sous intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, de la forme

$$-\frac{f''(\eta_i)}{12}h^3$$

Il est possible de montrer que l'erreur globale sur l'intervalle $[a, b]$ est donnée par

$$-\frac{(b-a)}{12}f''(\gamma)h^2 = -\frac{(x_n - x_0)}{12}f''(\gamma)h^2,\ \gamma \in [a, b]$$

Remarque(s)

- La formule du trapèze composée revient à intégrer une interpolation linéaire par morceaux de la fonction f.
- La formule composée est d'ordre 2, mais le degré de précision est toujours 1.

Si l'on souhaite augmenter la précision, il faut augmenter le nombre de points, cela revient à considérer un polynôme d'interpolation d'un degré plus élevé.

Deuxième formule: formule de Simpson 1/3.
Considérons toujours un intervalle $[a, b]$ et considérons cette fois $n = 2$, et donc $f(x) = p_2(x) + E_2(x)$.
En intégrant sur $[a, b]$, on obtient

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx &= \int_a^b p_2(x)\,dx + \int_a^b E_2(x)\,dx \\ &= \int_a^b f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)\,dx + \int_a^b E_2(x)\,dx\end{aligned}$$

Avec $a = x_0$ et $b = x_2$. En prenant les points d'interpolations x_0, x_1, x_2 équidistants, c-à-d $\boldsymbol{x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h}$, on obtient

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right) + \int_a^b E_2(x)\,dx$$

et donc

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right)$$

Terme d'erreur: on montre que

$$\int_a^b E_2(x)\,dx = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta),\ \eta \in [a,b]$$

Attention !

h exprime toujours la distance entre les abscisses d'interpolation x_i et équivaut donc à la longueur de l'intervalle $[a,b]$ divisée par deux (les points sont équidistants).

- Comme la dérivée quatrième s'annule si f est un polynôme de degré inférieur ou égal à 3, **le degré de précision est 3**,
- Le terme d'erreur est proportionnel à la longueur de l'intervalle divisée par deux à la puissance 5,
- Comme pour la formule du trapèze, on a tout intérêt à diviser l'intervalle $[a,b]$ en sous-intervalles $\rightarrow$ **formule de Simpson 1/3 composée**

On divise l'intervalle $[a, b]$ en $2n$ sous intervalles (n intervalles sur lesquels on applique Simpson 1/3).
On aura au total $2n+1$ points, $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{2n-1} < x_{2n} = b$ et

$$h = \frac{b-a}{2n}$$

On a alors

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)\,dx \\
&\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{3}\left(f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})\right) \\
&= \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots \\
&\quad + 2f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n}))
\end{aligned}$$

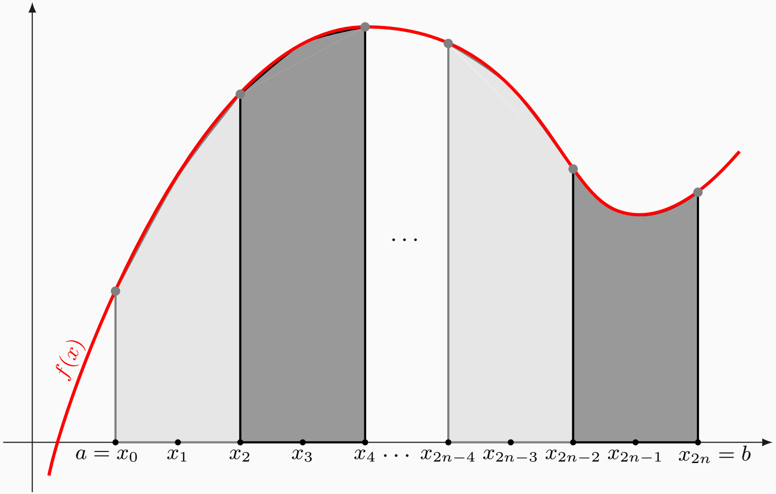


Illustration de la formule de Simpson 1/3 composée

Le terme d'erreur de la méthode de Simpson 1/3 composée est

$$-\frac{(b-a)}{180} f^{(4)}(\eta)h^4, \ \eta \in [a,b]$$

Remarque(s)

- Simpson 1/3 composée revient à intégrer une interpolation quadratique par morceaux de la fonction f,
- La formule est d'ordre 4 et le degré de précision est toujours 3.

On peut continuer à augmenter le degré du polynôme d'interpolation, en considérant $n = 3$ et donc un polynôme de degré 3. Cela nous donne la formule de Simpson 3/8 (sur un intervalle)

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx = \frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)) - 3h^5 \frac{f^{(4)}(\eta)}{80}$$

$\rightarrow$ même ordre et degré de précision que Simpson 1/3.

On pourrait continuer à augmenter le degré du polynôme d'interpolation. Mais l'oscillation du terme d'erreur de l'interpolation aura un effet sur la quadrature.

$\rightarrow$ On se limite en général au trapèze et à Simpson 1/3.

Conclusions Newton-Cotes:

- Pour les méthodes de Newton-Cotes on a intérêt à utiliser les méthodes composées.
- Les méthodes composées **permettent un contrôle de l'erreur mais perdent un ordre.**
- On peut dresser le tableau suivant pour les méthodes **non composées**:

Méthode	nombre de points	Ordre	Précision
Trapèze	2	3	1
Simpson 1/3	3	5	3
Simpson 3/8	4	5	3

On va plutôt considérer une autre approche, cherchant à obtenir, **pour un nombre de points déterminé, un degré de précision maximal.**

On a vu que la formule du trapèze a un degré de précision de 1, et requiert l'évaluation de la fonction f aux extrémités de l'intervalle

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)\left(\frac{f(a)+f(b)}{2}\right)$$

On ne positionnant pas les points aux extrémités de l'intervalle, mais à l'intérieur, est-il possible de gagner en précision ?

$\rightarrow$ C'est le point de départ des **quadratures de Gauss-Legendre**.

De manière générale, une **formule de quadrature de Gauss-Legendre** consiste à trouver n paires de coefficients (w_i, t_i) tels que

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(t_i)$$

Les w_i sont les **poids d'intégration** et les t_i sont les **points d'intégration**.

Le but est donc de déterminer les n poids w_i et les n points t_i.

On a $2n$ inconnues, on a donc besoin de $2n$ équations...

On souhaite un degré de précision p maximal, *i.e* on veut intégrer exactement tous les polynômes de degré $\leq p$. En particulier on doit donc intégrer exactement les monômes

$$1, x, x^2, x^3, \ldots, x^p$$

En prenant $p = 2n - 1$, cela revient à dire que l'on doit intégrer exactement les monômes

$$x^k,\ k = 0, \ldots, 2n - 1$$

On impose donc à notre formule de quadrature d'intégrer exactement les monômes $\boldsymbol{x^k},\ k = 0, \ldots, 2n-1 \rightarrow\ 2n$ équations.

La résolution des $2n$ équations non linéaires

$$\int_a^b x^k\, dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(t_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i t_i^k,\quad k = 0, \ldots, 2n-1 \tag{11}$$

nous donne les poids et points d'intégration.

Inconvénient : Les poids w_i et les points t_i dépendent de l'intervalle $[a, b]$, **si on change d'intervalle, on doit recalculer les poids et les points !**

Solution : Effectuer un changement de variable pour passer de l'intervalle $[-1, 1]$ à un intervalle $[a, b]$ quelconque.

$$x(t) = \frac{(b-a)t + a + b}{2}, \quad dx = \frac{(b-a)}{2} dt, \; t \in [-1, 1]$$

On a alors

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^{1} \underbrace{f\left(\frac{(b-a)t + a + b}{2}\right)}_{g(t)} dt \tag{12}$$

Conclusion : On calcule les poids et les points **une fois pour toute sur l'intervalle $[-1, 1]$**, et l'équation (12) nous permet de calculer l'intégrale sur l'intervalle $[a, b]$.

✓ Pour Gauss-Legendre, les poids/points sont calculés sur $[-1, 1]$, mais pour d'autres formules de quadrature (ex: Gauss-Radau) les poids/points sont calculés «une fois pour toute» sur un autre intervalle.

Voyons donc la résolution des équations (11) sur l'intervalle $[-1, 1]$.

$\bullet\, \boldsymbol{n = 1}$, Gauss-Legendre à 1 point :

On cherche une expression de la forme

$$\int_{-1}^{1} g(t)\, dt \approx w_1 g(t_1)$$

et l'on impose qu'elle soit exacte pour les polynômes de degré $\leq 2n - 1 = 1$

$\rightarrow$ Polynôme de degré 0 : prenons $g(t) = 1$

$$\int_{-1}^{1} 1\, dt = \boldsymbol{2 = w_1}$$

$\rightarrow$ Polynôme de degré 1 : prenons $g(t) = t$

$$\int_{-1}^{1} t\, dt = 0 = w_1 t_1 = 2t_1 \Rightarrow \boldsymbol{t_1 = 0}$$

et donc

$$\int_{-1}^{1} g(t)\, dt = 2g(t_1) = 2g(0)$$

$\bullet\, \boldsymbol{n = 2}$, Gauss-Legendre à 2 points :
On cherche une expression de la forme

$$\int_{-1}^{1} g(t)\, dt \approx w_1 g(t_1) + w_2 g(t_2)$$

et l'on impose qu'elle soit exacte pour les polynômes de degré $\leq 2n - 1 = 3$
Prenons successivement $g(t) = 1, g(t) = t, g(t) = t^2, g(t) = t^3$, on obtient le système

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{-1}^{1} 1\, dt = 2 = w_1 + w_2 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1} t\, dt = 0 = w_1 t_1 + w_2 t_2 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1} t^2\, dt = \frac{2}{3} = w_1 t_1^2 + w_2 t_2^2 \\ \displaystyle\int_{-1}^{1} t^3\, dt = 0 = w_1 t_1^3 + w_2 t_2^3 \end{cases}$$

La résolution de ce système nous donne $\boldsymbol{w_1 = w_2 = 1}$, $\boldsymbol{t_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}}$, $\boldsymbol{t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}}$, et donc

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \approx g\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + g\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Attention !

On n'oubliera pas de se ramener à l'intervalle $[a, b]$. Par exemple cela nous donne pour $n = 1$,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &= \frac{(b-a)}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{(b-a)t + a + b}{2}\right)\,dt \\
&\approx \frac{(b-a)}{2}\left(w_1 f\left(\frac{(b-a)t_1 + a + b}{2}\right)\right) \\
&\approx \frac{(b-a)}{2}\left(2f\left(\frac{a+b}{2}\right)\right)
\end{aligned}$$

Conclusions/Remarques Gauss-Legendre

- La formule de Gauss-Legendre à 1 point a un degré de précision de 1, comme la formule du trapèze, qui nécessite elle, 2 points. En utilisant 2 points, la formule de Gauss-Legendre a un degré de précision de 3.
- La grande précision de ces quadratures fait en sorte qu'on ne les compose que très rarement.
- Il est possible d'établir des formules de quadratures à n points, voir p. 334 de votre manuel pour une table avec les poids et les points jusqu'à $n = 5$. Pour une formule à n points, il est possible d'obtenir la formule d'erreur suivante

$$\frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)((2n)!)^3} g^{(2n)}(\xi), \quad \xi \in [-1, 1]$$

Je dois être capable de :

- Comprendre comment construire une formule aux différences finies,
- Appliquer les formules aux différences finies pour approximer les dérivées d'une fonction,
- Comprendre les limitations/instabilités numériques qui peuvent apparaître dans les formules,
- Connaître la différence entre les formules avant, arrière et centrée,
- Utiliser l'extrapolation de Richardson pour augmenter l'ordre d'une formule aux différences,
- Comprendre et savoir construire une quadrature de type Newton-Cotes,
- Exploiter le terme d'erreur pour déterminer approximativement le nombre de sous intervalles d'une formule composée,
- Comprendre le concept de degré de précision,
- Utiliser les formules de Newton-Cotes et de Gauss-Legendre,
- Connaître la précision des formules de Gauss-Legendre,
- Construire une formule de quadrature, basé sur le même principe que Gauss-Legendre.