INFORMATIQUE APPLIQUÉE AU CALCUL SCIENTIFIQUE

COURS 1-TER

Intégration numérique

1) Rappels sur l'intégrale
2) Sommes de Riemann
3) Méthode des trapèzes
4) Formule de Simpson

François Dubois, 20 octobre 2005, édition 03 août 2006, 14 pages.

IACS 2005-2006

Cours ② du 20 octobre 2005

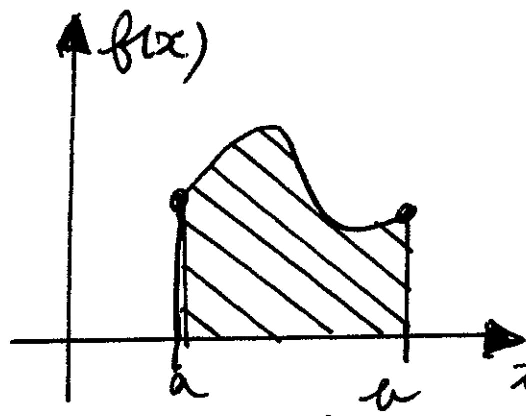
Intégration numérique.

1) Rappels sur l'intégrale

- on désigne par $a<b$ deux nombres réels, par $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ une application bornée de $[a,b]$ à valeurs réelles : $f(x)$ est un nombre réel quel que soit $x \in [a,b]$; il existe une constante $C>0$ telle que pour tout $x \in [a,b]$, $|f(x)|$ est inférieur ou égal à C :

(1.1) $\exists C>0, \ \forall x \in [a,b], \ |f(x)| \leq C$.

- Lorsque $f \geqslant 0$ ($f(x) \geqslant 0$ pour tout $x \in [a,b]$), $\int_a^b f(x)\,dx$ est un nombre réel qui représente <u>l'aire</u> "sous la courbe $y = f(x)$", c'est à dire l'aire de l'ensemble $\{(x,y) \in \mathbb{R}^2, \ a \leqslant x \leqslant b, \ 0 \leqslant y \leqslant f(x)\}$ comme illustré à la figure 1. Nous retenons de ce principe de base la propriété "évidente" :



<u>figure 1.</u> $\int_a^b f(t)\,dt$

(1.2) $\int_a^b f(t)\,dt \geqslant 0, \quad a<b, \ f(t) \geqslant 0 \ \forall t$.

- Une seconde propriété de l'intégrale est l'additivité par rapport au domaine, donné dans ce contexte monodimensionnel par la relation de Chasles. Pour $a<b$ et $a<c<b$, on a

$$(1.3) \quad \int_a^c f(t)\,dt + \int_c^b f(t)\,dt = \int_a^b f(t)\,dt.$$

- Enfin la propriété de linéarité. Rappelons que si f et g sont deux fonctions bornées de $[a,b]$ dans $\mathbb{R}$ et si λ et μ sont deux réels, la fonction $\lambda f+\mu g$ associe à $x\in[a,b]$ le nombre $\lambda f(x)+\mu g(x)$:

$$(1.4) \quad (\lambda f+\mu g)(x) = \lambda f(x) + \mu g(x), \text{ par définition.}$$

La propriété de linéarité de l'intégrale énonce que l'intégrale de a à b de la fonction $\lambda f+\mu g$ est égale à λ fois l'intégrale de f, plus μ fois l'intégrale de g :

$$(1.5) \quad \int_a^b (\lambda f+\mu g)(x)\,dx = \lambda \int_a^b f(t)\,dt + \mu \int_a^b g(t)\,dt.$$

- La définition de l'intégrale, dans le cadre proposé par Riemann est donné dans le cours de mathématiques générales. Nous ne la reprenons pas ici, au bénéfice de quelques remarques. On se donne un entier ≥ 1 n (destiné à tendre vers l'infini) et on divise l'intervalle $[a,b]$ en n intervalles $[x_j, x_{j+1}]$ de pas Δx :

(1.6) $\quad x_j = a + j\,\Delta x \ , \ 0 \le j \le n, \qquad \Delta x = \frac{b-a}{n}.$

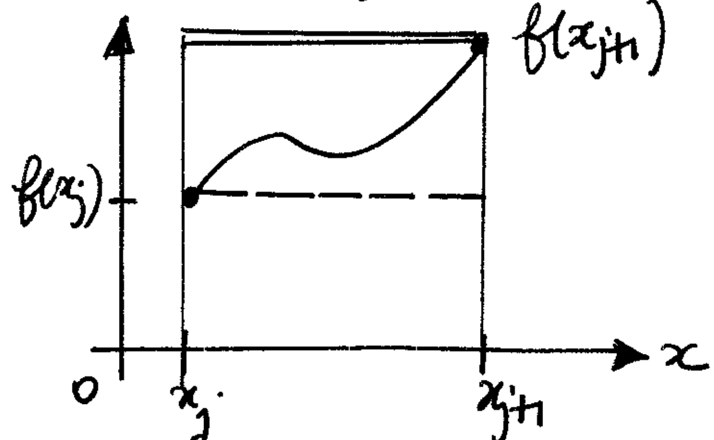
Si f est une fonction <u>constante</u> dans chaque intervalle $]x_j, x_{j+1}[$:

(1.7) $\qquad f(x) = f_{j+1/2} \ , \ x_j < x < x_{j+1}, \ 0 \le j \le n-1$

on se convainc facilement à l'aide de la relation de Chasles (exercice!) que l'intégrale $\int_a^b f(t)\,dt$ se calcule facilement :

(1.8) $\qquad \int_a^b f(t)\,dt = \sum_{j=0}^{n-1} \Delta x \ f_{j+1/2}.$

• Dans le cas général, on approche $f(\cdot)$ par une fonction <u>constante par morceaux.</u> Ayant divisé l'intervalle $[a,b]$ en n sous-intervalles (relation (1.6)), on choisit d'abord d'approcher f par sa valeur "à gauche" $f(x_j)$ dans chaque intervalle $[x_j, x_{j+1}[$ (voir la figure 2). On obtient ainsi une approximation "à gauche" de l'intégrale :



<u>Figure 2</u>. Approximation constante par intervalle.

(1.9) $\quad I_g(n; f) = \sum_{j=0}^{n-1} \Delta x \ f(x_j)$

On peut aussi approcher f par sa valeur "à droite" $f(x_{j+1})$ dans l'intervalle $]x_j, x_{j+1}]$ (voir encore la figure 2). On obtient alors

$$(1.10) \qquad I_d(n;f) = \sum_{j=1}^{n} \Delta x\, f(x_j)$$

Si l'intégrale $\int_a^b f(t)\,dt$ existe alors l'écart $|I_g(n;f) - I_d(n;f)|$ tend vers 0 si $n \to +\infty$ et chacun des nombres $I_g(n;f)$ et $I_d(n;f)$ tend vers $\int_a^b f(t)\,dt$ si n tend vers l'infini :

$$(1.11) \qquad \begin{matrix} I_g(n;f) \\ I_d(n;f) \end{matrix} \rightarrow \int_a^b f(t)\,dt \;, n \to \infty .$$

2) Sommes de Riemann.

- De façon générale, si l'intégrale $\int_a^b f(t)\,dt$ existe, on peut approcher f par une fonction arbitraire constante par morceaux dans l'intervalle $[x_j, x_{j+1}]$ de la forme

$$(2.1) \qquad f_{ap}(x) = f(\xi_j), \quad x_j \leqslant x < x_{j+1}, \quad x_j \leqslant \xi_j \leqslant x_{j+1}$$

où ξ_j est choisi ad libitum dans l'intervalle $[x_j, x_{j+1}]$. On pose alors

$$(2.2) \qquad I(a,b,\xi;f) = \int_a^b f_{ap}(t)\,dt = \sum_{j=0}^{n-1} \Delta x\, f(\xi_j) .$$

- Une somme telle que $I(a,b,\xi;f)$ est appelée <u>somme de Riemann</u>. Elle fournit une approximation de l'intégrale de f :

$$(2.3) \qquad \sum_{j=0}^{n-1} \Delta x\, f(\xi_j) \longrightarrow \int_a^b f(t)\,dt \text{ si } n \to \infty$$

Dans le cas où $\xi_j = x_j$ pour tout j, on a bien entendu $I(a,b,\xi;f) = I_g(n;f)$, alors que pour $\xi_j = x_{j+1}$ si $0 \leq j \leq n-1$, on a clairement $I(a,b,\xi;f) = I_d(n,f)$ [exercice!].

- Nous en savons assez pour élaborer une <u>méthode numérique</u> d'approximation de l'intégrale. Il suffit, par exemple de calculer l'intégrale approchée $I_g(n;f)$ pour des valeurs de n de plus en plus grandes. Nous appliquons les principes précédents avec $a = 1$, $b = 2$ et

$$(2.4) \qquad f(t) = \frac{1}{t}, \quad 1 \leq t \leq 2.$$

Il s'agit donc de calculer $\log 2 = \int_1^2 \frac{dt}{t}$. Nous avons donc

$$(2.5) \quad \log 2 \simeq \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{1+\frac{j}{n}}$$

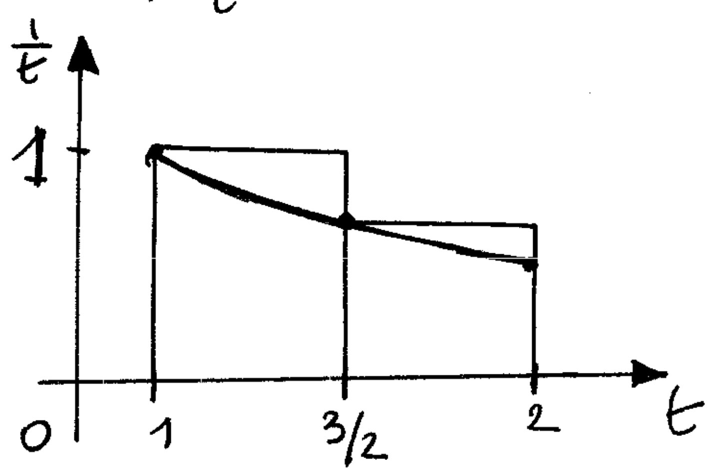


Figure 3 $\log 2 \simeq I_g(2, \frac{1}{t})$.

- Pour $n = 1$, $I_g(1; \frac{1}{t}) = 1$ alors que pour $n = 2$, $I_g(2, \frac{1}{t}) = \frac{1}{2} \times 1 + \frac{1}{2} \times \frac{2}{3} = \frac{5}{6} \simeq 0{,}8333\ldots$ ainsi qu'illustré à la figure 3. Pour les valeurs de n suivantes, nous utilisons un petit programme effectué sous octave et constatons qu'il est possible de calculer 6 chiffres significatifs de $\log 2$ en utilisant environ 500 000 points (Table 1).

n	Sommes de Riemann	Méthode des trapèzes	Formule de Simpson
1	1	0,75	0,6944
2	0,8333	0,7083	0,69325
5	0,7456	0,6956	0,69315023
10	0,7187	0,69377	0,69314737
20	0,70580	0,693303	47192
50	0,6981	0,693172	471808
100	0,6956	3153	1805794
200	0,694398	3148	0,693147180561171
500	364	31474	5599
1000	339	314724	0,693147180559969
2000	0,69327	0,69314719	59882
5000	19	1830	0,693147180559534
10000	172	1811	
20000	159	18071	
50000	0,6931521	0,6931471 8058	
100000	496	180564	
200000	48	1805602	
500000	47	18054662	
1000000	0,6931 4743	0,693147180 57585	

Table 1. Calcul de $\log 2 \simeq 0{,}693147180559945$ à l'aide de trois méthodes numériques.

3) Méthode des trapèzes.

- En préliminaire, nous montrons, sans utiliser les méthodes de Leibniz du calcul différentiel (en restant aux approches traditionnelles d'Archimède, 250 avant JC) que

(3.1) $$\int_a^b t\,dt = \frac{1}{2}(b-a)(b+a).$$

Nous avons d'abord le résultat préliminaire

(3.2) $$0+1+2+\cdots+(n-2)+(n-1) \equiv \sum_{j=0}^{n-1} j = \frac{n(n-1)}{2}.$$

- La preuve de (3.2) s'effectue par récurrence. La propriété est vraie pour $n=0$. Si elle est vraie à l'ordre n, nous montrons qu'elle est encore vraie à l'ordre $n+1$. Or

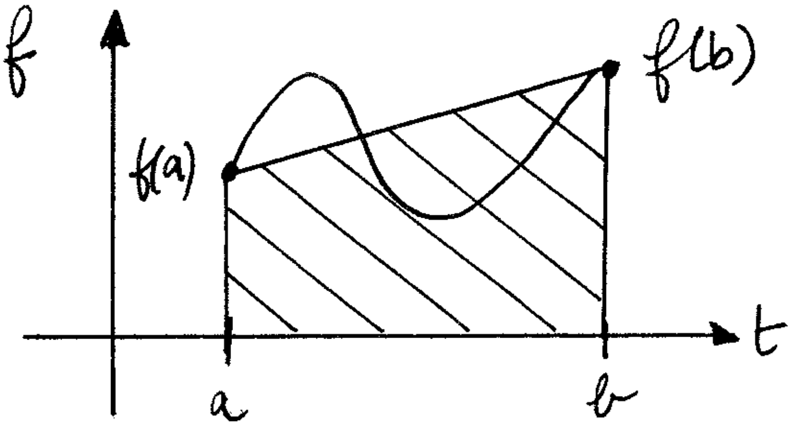
$$\sum_{j=0}^{n} j = \sum_{j=0}^{n-1} + n = \frac{n(n-1)}{2} + n \quad \text{par hyp. de récurrence}$$

$$= \frac{1}{2}(n^2 - n + 2n) = \frac{n(n+1)}{2},$$ ce qui montre la propriété. $\square$

- Nous calculons ensuite les sommes $I_g(n; t)$ qui approchent $\int_0^1 t\,dt$. Nous avons

$$I_g(n,t) = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{n}\frac{j}{n} = \frac{1}{n^2}\sum_{j=0}^{n-1} j = \frac{n(n-1)}{2n^2} \longrightarrow \frac{1}{2}$$

si n tend vers l'infini. Jointe à la propriété de convergence (1.11), cette limite établit la relation (3.1) pour $a=0, b=1$. Le cas général est un exercice. $\square$



<u>Figure 4</u>. Formule des trapèzes pour approcher $\int_a^b f(t)\,dt$. On remplace $f(\cdot)$ par son interpolé affine sur l'intervalle $[a,b]$, puis on calcule exactement l'intégrale de la fonction affine interpolante.

- La formule des trapèzes est illustrée figure 4. Elle s'écrit

(3.3) $$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big).$$

On remplace l'"aire sous la courbe f" par l'aire du trapèze de la figure 4. Celle-ci vaut : "petite base plus grande base, divisés par deux, multiplié par la hauteur", c'est à dire le membre de droite de (3.3).

- L'approche heuristique qui précède est suffisante pour retenir la relation (3.3). Afin de justifier mathématiquement l'approche qui conduit à la relation (3.3), on remplace dans l'intervalle $[a,b]$ la fonction $f(\cdot)$ par une fonction $\varphi(\cdot)$ <u>affine</u> telle que

(3.4) $$\varphi(a) = f(a), \quad \varphi(b) = f(b).$$

Le graphe de la fonction φ est le segment de droite qui joint les points $(a, f(a))$ et $(b, f(b))$ (voir la figure 4). La pente de la fonction φ vaut bien sûr, compte tenu de (3.4) : $\varphi'(t) = \dfrac{f(b)-f(a)}{b-a}$.
On a donc

$$(3.5) \qquad \varphi(t) = f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(t-a), \quad a \leq t \leq b.$$

- on remplace ensuite l'intégrale de f par l'intégrale de φ, appelée "interpolée affine de f sur l'intervalle $[a,b]$" :

$$(3.6) \qquad \int_a^b f(t)\,dt \simeq \int_a^b \varphi(t)\,dt.$$

Mais l'intégrale de φ est facile à calculer :

$$\int_a^b \varphi(t)\,dt = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(t-a)\right] dt$$

$$= (b-a)\left(f(a) - \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\,a\right) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\int_a^b t\,dt$$

vu la linéarité de l'intégrale. Compte tenu de la relation (3.1), nous en déduisons maintenant :

$$\int_a^b \varphi(t)\,dt = (b-a)\,f(a) - a\big(f(b)-f(a)\big) + \frac{1}{2}(b+a)\big(f(b)-f(a)\big)$$

$$= f(a)\left[b-a+a-\frac{1}{2}(a+b)\right] + f(b)\left[-a+\frac{1}{2}(b+a)\right]$$

$$= \frac{b-a}{2}\big(f(a)+f(b)\big),$$

ce qui permet de calculer le membre de droite de (3.6) et justifie complètement l'approximation (3.3).

- on peut <u>ensuite</u> utiliser la propriété d'additivité par rapport au domaine pour donner une nouvelle formule approchée pour $\int_a^b f(t)\,dt$ paramétrée par un entier $n \geq 1$. Nous posons

$$(3.7) \quad a = x_0 < x_1 < \cdots < x_j = a + j\frac{b-a}{n} < \cdots < x_n = b$$

et nous avons

$$\int_a^b f(t)\,dt = \sum_{j=0}^{n-1} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(t)\,dt$$

$$\simeq \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_j)\left(f(x_j) + f(x_{j+1})\right)$$

en utilisant la formule des trapèzes (3.3) dans l'intervalle $[x_j, x_{j+1}]$. Donc

$$\int_a^b f(t)\,dt \simeq \frac{1}{2}\,\frac{b-a}{n}\left(f(a) + f(x_1) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{n-1}) + f(b)\right)$$

$$= \frac{b-a}{n}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(b)\right).$$

- Nous retenons cette version "pratique" de la formule des trapèzes :

$$(3.8) \quad \int_a^b f(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{n}\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + \frac{1}{2}f(b)\right)$$

qui donne une nouvelle méthode pour approcher l'intégrale. Nous utilisons la relation (3.8) pour l'exemple vu plus haut ($a = 1$, $b = 2$, $f(t) = 1/t$; $\int_a^b f(t)\,dt = \log 2$). Pour $n = 1$, la formule des trapèzes (3.2) nous propose $\log 2 \simeq 3/4$ puis est précise avec dix chiffres significatifs si on pousse le calcul jusqu'à $n = 100\,000$ environ (Table 1, colonne du milieu).

4) Formule de Simpson*

- afin de simplifier les calculs, nous utilisons la formule de changement de variables dans une intégrale. Soit $\varphi : [\alpha, \beta] \to [a,b]$ une fonction dérivable de l'argument θ☒ et $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ une fonction intégrable. Nous avons (voir la preuve dans le cours de "mathématiques générales") :

(4.1) $$\int_a^b f(t)\, dt = \int_\alpha^\beta f(\varphi(\theta))\, \varphi'(\theta)\, d\theta .$$

En pratique, on pose $t = \varphi(\theta)$. Si $\theta = \alpha$ alors $t = a$ et pour $\theta = \beta$ alors $t = b$. Dans le changement des bornes, a devient donc α et b devient β. On a par ailleurs $dt = \varphi'(\theta)\, d\theta$, ce qui montre la cohérence de la relation (4.1).

- Nous admettons aussi que

(4.2) $$\int_0^1 t^2\, dt = \frac{1}{3},$$

ce qui constitue un excellent exercice que savait déjà faire Archimède...

- Afin d'approcher $\int_a^b f(t),\, dt$, nous nous ramenons au cas particulier $a=0$, $b=1$ en posant

(4.3) $$t = (1-\theta)a + \theta b, \quad 0 \leq \theta \leq b,$$

soit $\varphi(\theta) = a + (b-a)\theta$ avec les notations précédentes. La relation (4.1) prend ici la forme

---

* Thomas Simpson, 1710-1761, autodidacte.

☒ telle que $\varphi(\alpha) = a$, $\varphi(\beta) = b$

(4.4) $\quad \int_a^b f(t)\,dt = (b-a)\int_0^1 f((1-\theta)a+\theta b)\,d\theta$.

On se propose donc de donner une formule de quadrature pour une intégrale de la forme $\int_0^1 \varphi(\theta)\,d\theta$.

- Nous suivons la même idée que pour la méthode des trapèzes. Nous introduisons une fonction $g(\cdot)$ polynomiale de degré 2, id est de la forme

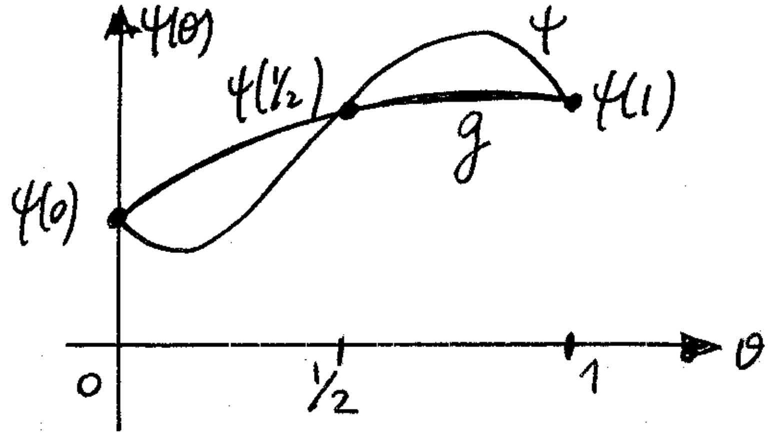


Figure 5. Interpolation parabolique de la fonction φ.

(4.5) $\quad g(\theta) = \alpha + \beta\theta + \frac{\gamma}{2}\theta^2$

de sorte que les fonctions g et φ coïncident aux "points de quadrature" $\theta = 0, \frac{1}{2}, 1$:

(4.6) $\quad g(0) = \varphi(0), \quad g(\tfrac{1}{2}) = \varphi(\tfrac{1}{2}), \quad g(1) = \varphi(1)$.

Puis nous intégrons le polynome (4.5). Si $g(\theta)$ est polynomiale de degré ≤ 2 (on dit que g appartient à l'espace P_2 et on écrit $g \in P_2$), nous avons

(4.7) $\quad \alpha = g(0)$

(4.8) $\quad \beta = g'(0) = -3g(0) + 4g(\tfrac{1}{2}) - g(1)$

(4.9) $\quad \gamma = g''(0) = 4\big(g(0) - 2g(\tfrac{1}{2}) + g(1)\big)$.

- La preuve des relations (4.7) à (4.9) consiste simplement à rapprocher les valeurs des coefficients de (4.5) et les relations (4.6). Nous avons le système liné-airé suivant, d'inconnues α, β, γ :

$$(4.10)\begin{cases} \alpha = g(0) \\ \alpha + \frac{\beta}{2} + \frac{\gamma}{2}\frac{1}{4} = g(\frac{1}{2}) \\ \alpha + \beta + \frac{\gamma}{2} = g(1) \end{cases}$$

on tire α de la première équation et on le substitue dans les deux autres. Il vient :

$$(4.11)\begin{cases} \beta + \frac{\gamma}{4} = 2\left(g(\frac{1}{2}) - g(0)\right) \\ \beta + \frac{\gamma}{2} = g(1) - g(0) \end{cases}$$

on retranche la première équation de la seconde. On obtient ainsi

$$\frac{\gamma}{4} = g(0) - 2g(\tfrac{1}{2}) + g(1)$$

ce qui démontre la relation (4.9). Puis on reporte cette expression dans la première equation de (4.11). Il vient :

$$\beta = 2g(\tfrac{1}{2}) - 2g(0) - \left(g(0) - 2g(\tfrac{1}{2}) + g(1)\right) = -3g(0) + 4g(\tfrac{1}{2}) - g(1)$$

ce qui constitue exactement (4.8). Par ailleurs, la relation (4.7) est immédiate. $\square$

- On a ensuite :

$$\int_0^1 g(\theta)\,d\theta = \alpha\int_0^1 d\theta + \beta\int_0^1 \theta\,d\theta + \frac{\gamma}{2}\int_0^1 \theta^2 d\theta = \alpha + \frac{\beta}{2} + \frac{\gamma}{6}$$

en vertu des relations (3.1) et (4.2). Compte tenu de (4.7) à (4.9), il vient ensuite :

$$\int_0^1 g(\theta)\,d\theta = g(0)+\frac{1}{2}\left(-3g(0)+4g\left(\tfrac{1}{2}\right)-g(1)\right)+\frac{2}{3}\left(g(0)-2g\left(\tfrac{1}{2}\right)+g(1)\right)$$
$$= \left(1-\frac{3}{2}+\frac{2}{3}\right)g(0) + \left(2-\frac{4}{3}\right)g\left(\tfrac{1}{2}\right) + \left(-\frac{1}{2}+\frac{2}{3}\right)g(1)$$
$$= \frac{6-9+4}{6}\,g(0) + \frac{6-4}{3}\,g\left(\tfrac{1}{2}\right) + \frac{-3+4}{6}\,g(1)$$
$$= \frac{1}{6}\,g(0) + \frac{2}{3}\,g\left(\tfrac{1}{2}\right) + \frac{2}{3}\,g(1).$$

Nous venons de démontrer que

$$(4.10)\qquad \int_0^1 g(\theta)\,d\theta = \frac{1}{6}g(0)+\frac{2}{3}g\left(\tfrac{1}{2}\right)+\frac{2}{3}g(1)\ ,\ \forall g \in \mathbb{P}_2 .$$

- Compte tenu de (4.4) et (4.6), cette relation prend la forme générale, dite "formule de Simpson" :

$$(4.11)\qquad \int_a^b f(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right) .$$

On utilise cette relation en recoupant l'intervalle $[a,b]$ en n morceaux "égaux" :

$$\int_a^b f(t)\,dt = \sum_{j=0}^{n-1}\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(t)\,dt \simeq \sum_{j=0}^{n-1}\frac{b-a}{6n}\left(f(x_j)+4f\left(\frac{x_j+x_{j+1}}{2}\right)+f(x_{j+1})\right)$$

$$(4.12)\qquad \int_a^b f(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{n}\left[\frac{f(a)}{6}+\frac{1}{3}\sum_{j=1}^{n-1} f(x_j)+\frac{f(b)}{6}+\frac{2}{3}\sum_{j=1}^{n-1} f\left(\frac{x_j+x_{j+1}}{2}\right)\right]$$

- Avec l'exemple de $\log 2$, on obtient 13 chiffres significatifs corrects avec $n \simeq 500$. Puis les erreurs d'arrondis s'accumulent et le résultat ne s'améliore plus. On note que six chiffres significatifs sont obtenus avec seulement $n = 10$, au lieu de $n = 500\,000$ avec les sommes de Riemann !

D, 23 oct 05.