1 Interpolation et intégration

1.1 Interpolation

Le but de cette section est d'interpoler précisément une fonction

$$f: \begin{array}{ll} [a,b] & \mapsto \mathbb{R} \\ x & \mapsto f(x) \end{array}$$

connaissant la fonction f pour un petit nombre $m+2$ de points x_i. On note x_i les points pour lesquels on connait les valeurs y_i de la fonction :

$$y_i = f(x_i), \quad i = 0..m+1$$

On souhaite construire une approximation notée If (appelée interpolation de f) qui coincide avec f sur les points x_i

$$If(x_i) = f(x_i) = y_i$$

et telle que la différence entre f et If soit faible sur l'intervalle d'étude $[a,b]$. Sur la figure 1, nous représentons une fonction f et une interpolation If. Nous présentons deux techniques d'interpolation par la suite, l'interpolation polynômiale et l'interpolation par spline cubique. Ce type de problèmatique se pose

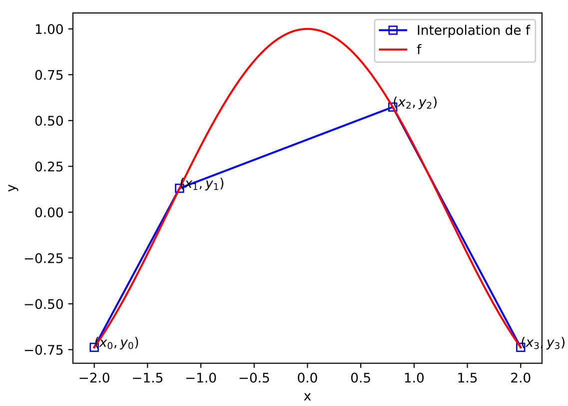

FIGURE 1 – Fonction f et son interpolée par ligne brisée passant par les points (x_i, y_i).

dès lors que la fonction f est une fonction très coûteuse à évaluer (pensez par exemple à la résolution d'un système non-linéaire de grande taille) ou lorsque cette fonction n'a été mesurée que pour certains points x_i et qu'on ne connait pas la valeur sur les autres points.

1.1.1 Interpolation par spline cubique

Ligne brisée L'approximation la plus simple est la ligne brisée (cf. figure 1) qui est aussi appelée interpolation linéaire. Elle est définie par la formule suivante

$$If(x) = A_i(x) y_i + B_i(x) y_{i+1}, \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \tag{1}$$

avec

$$B_i(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}, \quad A_i(x) = 1 - B_i(x) \tag{2}$$

On remarquera que If est une fonction affine par morceaux (elle est affine sur chaque sous-intervalle $[x_i, x_{i+1}]$.

Spline cubique Comme on peut le voir sur la figure 1, l'interpolation linéaire est peu précise et donne une interpolation avec une dérivée discontinue. Si la fonction f est lisse, il existe de meilleures approximations. L'approximation par spline cubique est l'une d'elles, elle s'écrit avec des polynômes de degré 3 :

$$If(x) = A_i(x) y_i + B_i(x) y_{i+1} + \frac{h_i^2}{6}(A_i^3(x) - A_i(x)) y_i'' + \frac{h_i^2}{6}(B_i^3(x) - B_i(x)) y_{i+1}'', \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \tag{3}$$

où h_i est le pas d'espace donné par la relation

$$h_i = x_{i+1} - x_i$$

Les coefficients $(y_1'', y_2'', ...y_m'')$ sont des inconnues qu'on introduit. On va pouvoir calculer leur valeur en imposant que l'interpolée soit de classe C^2, c'est-à-dire que la dérivée première et seconde de If est continue sur l'intervalle $[a,b]$. Si vous le souhaitez, vous pouvez calculer ces coefficients en effectuant l'exercice suivant :

Exercice 1.1
1. *Calculer la dérivée de If en fonction de x. On rappelle que les coefficients $(y_1'', y_2'', ...y_m'')$ ne dépendent pas de x, leur dérivée est donc nulle. Seules les fonctions $A_i(x)$ et $B_i(x)$ dépendent de x.*
2. *Calculer la dérivée seconde de If en fonction de x. Observer que cette dérivée seconde est continue par construction.*
3. *Exprimer la condition de continuité de la dérivée If (notamment aux points x_i) pour obtenir un système linéaire que doivent résoudre les coefficients $(y_1'', y_2'', ...y_m'')$.*

La solution de cet exercice est donnée dans l'annexe A. Il est recommandé de faire d'abord l'exercice sur une feuille de papier et regarder ensuite le corrigé. Par simplicité, on imposera une condition de Dirichlet pour y_0'' et y_{m+1}'' :

$$y_0'' = y_{m+1}'' = 0 \tag{4}$$

Seuls les coefficients intérieurs $(y_1'', y_2'', ...y_m'')$ sont donc solutions du système linéaire suivant :

$$\frac{h_{i-1}}{6} y_{i-1}'' + \left(\frac{h_{i-1} + h_i}{3}\right) y_i'' + \frac{h_i}{6} y_{i+1}'' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}, \quad i = 1..m \tag{5}$$

qu'on peut mettre sous forme matricielle

$$AY'' = B \tag{6}$$

avec la matrice tridiagonale symétrique :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{h_0 + h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & 0 & \dots & 0 \\ \frac{h_1}{6} & \frac{h_1 + h_2}{3} & \frac{h_2}{6} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \frac{h_{m-2}}{6} & \frac{h_{m-2} + h_{m-1}}{3} & \frac{h_{m-1}}{6} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{h_{m-1}}{6} & \frac{h_{m-1} + h_m}{3} \end{pmatrix} \tag{7}$$

et le second membre B (et la solution Y'') :

$$B = \begin{pmatrix} \frac{y_2 - y_1}{h_1} - \frac{y_1 - y_0}{h_0} \\ \frac{y_3 - y_2}{h_2} - \frac{y_2 - y_1}{h_1} \\ \vdots \\ \frac{y_{m+1} - y_m}{h_m} - \frac{y_m - y_{m-1}}{h_{m-1}} \end{pmatrix}, \quad Y'' = \begin{pmatrix} y_1'' \\ y_2'' \\ \vdots \\ y_m'' \end{pmatrix} \tag{8}$$

On notera qu'on a $m + 2$ points (x_i, y_i) (i allant de 0 à m+1) et que A, B, Y'' sont de taille m. Pour résumer, il faut considérer l'algorithme 1 pour calculer une interpolation par spline cubique. Afin de vous

---

Algorithm 1 Algorithme pour calculer l'interpolation par spline cubique

---

Précalculer et stocker les coefficients y_i'' en résolvant le système matriciel (6) et en utilisation les conditions aux limites (4)
for chaque point x pour lequel on veut connaître If **do**
  Trouver dans quel intervalle $[x_i, x_{i+1}]$ le point x appartient. On peut utiliser un algorithme de dichotomie pour avoir une complexité en $O(log(N))$ au lieu de $O(N)$
  Utiliser la formule (3) pour calculer $If(x)$
end for

---

aider à programmer, voici un exemple concret de valeurs que vous devez obtenir avec votre code Python :

Exemple 1.1 *Points x_i et y_i choisis :*

$$x = [-2.0, -1.2, 0.8, 2.0], y = [-0.8, 0.2, 0.6, -0.7]$$

On obtient la matrice et second membre suivants

$$A = \begin{pmatrix} 0.93333333 & 0.33333333 \\ 0.33333333 & 1.06666667 \end{pmatrix}, \quad b = (-1.05, -1.28333333)$$

Après résolution et utilisation des conditions aux limites $y_0'' = y_{m+1}'' = 0$, on obtient le vecteur y'' suivant :

$$y'' = [0., -0.78266332, -0.95854271, 0.]$$

Avec ces valeurs, on obtient l'interpolée de la figure 2, on voit que cette fois-ci l'interpolation est satisfaisante.

Il est très vivement conseillé de reproduire cette interpolation avec votre code Python.

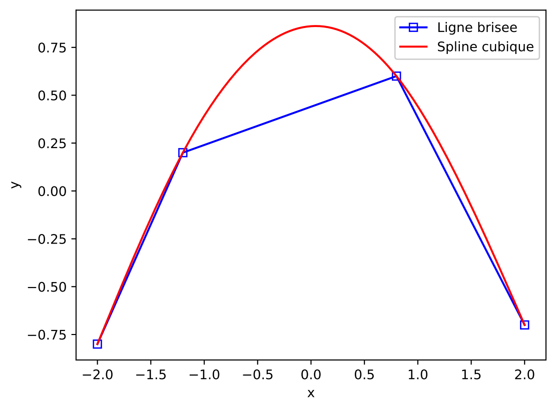

FIGURE 2 – Exemple d'interpolation par spline cubique. Comparaison avec la ligne brisée.

1.1.2 Interpolation polynômiale

Cette section n'est pas essentielle pour le projet, mais ceux qui sont intéressés par le thème sont invités à la lire. L'interpolation la plus simple consiste à chercher l'unique polynôme de degré $m+1$ passant par les $m+2$ points (x_i, y_i). Plusieurs techniques existent pour calculer ce polynôme, nous ne détaillons ici que l'utilisation des polynômes de Lagrange. Le polynôme d'interpolation de Lagrange L_i est l'unique polynôme satisfant les propriétés suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} L_i \in \mathbb{P}_{m+1} \\ L_i(x_j) = \delta_{i,j} \end{array} \right.$$

où $\mathbb{P}_{m+1}$ est l'ensemble des polynômes de degré inférieur ou égal à $m+1$. $\delta_{i,j}$ est le symbole de Kronecker qui vaut 1 si $i = j$, 0 sinon. Le polynôme d'interpolation de Lagrange L_i s'écrit comme suit :

$$L_i(x) = \frac{\displaystyle\prod_{j=0, j\neq i}^{m+1} x - x_j}{\displaystyle\prod_{j=0, j\neq i}^{m+1} x_i - x_j}$$

L'interpolation polynômiale de f par un polynôme de degré $m+1$ s'écrit alors

$$If(x) = \sum_{i=0}^{m+1} y_i L_i(x)$$

Phénomène de Runge Malheureusement lorsque m croit, l'interpolation polynômiale a le défaut de diverger (au lieu de converger) si les points x_i sont mal choisis. Ce phénomène de divergence est connu comme le phénomène de Runge. Il est particulièrement visible lorsqu'on choisit des points x_i régulièrement distribués. Sur la figure 3, on a représenté la fonction

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

et son interpolation polynômiale ($m = 9$) en utilisant des points réguliers. On voit que l'interpolation diverge notamment aux extrêmités de l'intervalle. Il est possible de montrer que la divergence est exponentielle lorsque n croît. C'est le but de l'exercice suivant :

Exercice 1.2 *On considére $m+2 = 2n+1$ points x_i définis comme $x_i = -n+i, \quad i = 0..2n$.*
1. *Calculer le polynôme de Lagrange L_n associé au point $x_n = 0$.*
2. *Calculer la valeur $I_n = L_n\left(n - \frac{1}{2}\right)$.*
3. *Calculer un équivalent grossier de I_n pour montrer que cette valeur diverge exponentiellement.*

Points de Chebyshev Sur un intervalle $[a, b]$ les points de Chebyshev sont donnés par la formule

$$x_i = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)\cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right)$$

Ils correspondent aux zéros des polynômes de Chebyshev. En choisissant ces points, on minimise le phénomène de Runge, l'interpolation converge alors exponentiellement vers la fonction f si celle-ci est lisse. Sur la figure 3, on voit l'interpolation avec ces points optimaux. Dans cette section, on a vu que l'interpolation polynômiale avec des polynômes d'ordre élevé est problématique. Souvent, il est préférable de subdiviser l'intervalle en sous-intervalles et utiliser une interpolation polynômials avec un ordre modérément élevé (typiquement $m = 4$) sur chaque sous-intervalle. Cette technique a le désavantage de produire une interpolation dont la dérivée est discontinue, l'utilisation de splines permet d'obtenir une interpolation plus lisse (vu dans la section précédente).

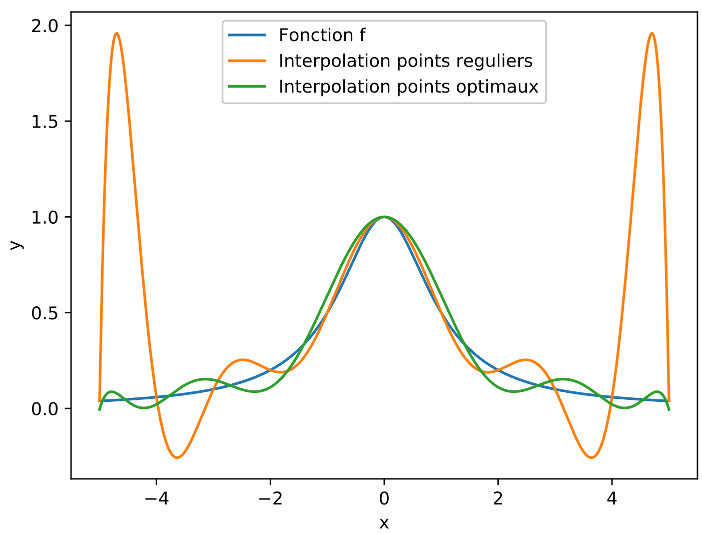

FIGURE 3 – Fonction $\frac{1}{1+x^2}$ sur l'intervalle $[-5, 5]$ et son interpolation en utilisant des points réguliers ou des points optimaux (points de Tchebycheff).

2 Intégration

Le but de cette section est de calculer numériquement une intégrale à une dimension :

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

avec f une fonction réelle définie sur l'intervalle $[a, b]$. On présente trois formules numériques pour évaluer cette intégrale : la formule des trapèzes, la formule de Simpson et la formule de Romberg. Dans le projet, il est demandé d'implémenter ces trois formules (partie 2).

2.1 Formule des trapèzes

Cette formule s'obtient en subdivisant l'intervalle $[a, b]$ en n sous-intervalles :

$$[a, b] = \bigcup_{i=0}^{n-1} [x_i, x_{i+1}]$$

avec $n + 1$ points notés x_i. Par convention, on a

$$x_0 = a, \quad x_n = b$$

On note h_i le pas d'espace :

$$h_i = x_{i+1} - x_i$$

Dans le cas où la subdivision est régulière, on aura

$$h_i = \frac{b-a}{n}, \quad x_i = a + ih$$

Sur chaque sous-intervalle $[x_i, x_{i+1}]$, on approche l'intégrale par l'aire du trapèze passant par les points $(x_i, 0)$, $(x_i, f(x_i))$, $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$ et $(x_{i+1}, 0)$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{h_i}{2} \left(f(x_i) + f(x_{i+1}) \right)$$

On obtient alors la formule des trapèzes suivante pour I

$$I \approx I_h = \frac{h_0}{2} f(a) + \frac{h_{n-1}}{2} f(b) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{(h_{i-1} + h_i)}{2} f(x_i) \tag{9}$$

Lorsque les points sont distribués régulièrement, la formule se simplifie comme

$$I \approx I_h = \frac{h}{2} \left(f(a) + f(b) \right) + h \left[\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right] \tag{10}$$

2.2 Formule de Simpson

La formule des trapèzes est une formule d'ordre 2, c'est à dire qu'on a

$$I_h = I + Ch^2 + O(h^4)$$

où I_h est l'approximation de I par la formule des trapèzes (cf. section précédente) et C une constante dépendant de la fonction f à intégrer. On peut calculer la formule de Simpson avec l'exercice suivant :

Exercice 2.1 *Obtention de la formule de Simpson*
1. *Donner le développement limité de $I_{h/2}$ en fonction de I et C*
2. *Proposer une combinaison linéaire de I_h et $I_{h/2}$ permettant d'obtenir une formule d'ordre 4.*
3. *Écrire cette combinaison linéaire sous une forme similaire à* (10).

Le corrigé de cet exercice est disponible dans l'annexe B. Il est fortement conseillé de faire cet exercice sur une feuille de papier avant de regarder le corrigé. La formule de Simpson obtenu par ce procédé s'écrit donc

$$I \approx \frac{h}{6}\left(f(a) + f(b)\right) + \frac{2h}{3}\left[\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right] + \frac{h}{3}\left[\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right] \tag{11}$$

2.3 Formule de Romberg

La formule de Romberg est une généralisation du procédé appliqué pour obtenir la formule de Simpson. On note $R(n,0)$ le résultat obtenu avec la formule des trapèzes pour $2^n + 1$ points :

$$R(n,0) = \frac{h_n}{2}\left(f(a) + f(b)\right) + h_n\left[\sum_{i=1}^{2^n-1} f(x_i)\right]$$

avec

$$h_n = \frac{(b-a)}{2^n}, \quad x_i = a + ih_n$$

On obtient alors la formule de Romberg avec l'exercice suivant :

Exercice 2.2 *Soit m un entier, on suppose qu'on a construit une approximation $R(n, m-1)$ d'ordre $2m$:*

$$R(n, m-1) = I + Ch_n^{2m} + O(h_n^{2m+2})$$

C'est le cas pour $m = 1$, puisque la formule des trapèzes $R(n,0)$ est bien une approximation d'ordre 2.
1. *Donner le développement limité de $R(n-1, m-1)$ et $R(n, m-1)$ en fonction de I et C*
2. *Proposer une combinaison linéaire (qu'on notera $R(n,m)$) permettant d'obtenir une méthode d'ordre* $2m+1$

On obtient ainsi l'expression suivante pour $R(n,m)$:

$$I \approx R(n,m) = \frac{(4^m R(n, m-1) - R(n-1, m-1))}{4^m - 1} \tag{12}$$

Ce procédé permet de construire un triangle d'approximation de I, le calcul s'arrête lorsque la valeur sur la diagonale stagne, i.e.

$$|R(n-1, m-1) - R(n,m)| \geq \varepsilon$$

On vous fournit l'exemple suivant qu'il est fortement conseillé de reproduire pour votre code Python

Exemple 2.1 *On considère la fonction $f(x) = \dfrac{1}{1+x^2}$ avec $a = -1, b = 2$. On obtient le triangle suivant pour $R(n,m)$ (la première valeur en haut à gauche correspond à $R(0,0)$) :*

1.05				
1.725	*1.95*			
1.86106528	*1.90642037*	*1.90351506*		
1.88482	*1.89273824*	*1.8918261*	*1.89164056*	
1.8906137	*1.89254494*	*1.89253205*	*1.89254326*	*1.8925468*

La valeur exacte vaut

$$I = arctan(2) - arctan(-1) = 1.8925468811915387$$

On voit que $R(4,4)$ approche très bien cette valeur exacte. La première colonne de R correspond à la méthode des trapèzes, la seconde colonne à la méthode de Simpson. Sur cet exemple, vous pouvez ainsi valider les trois méthodes.

Il est à noter que pour calculer $R(n,0)$ on peut utiliser la formule de récurrence

$$R(n,0) = \frac{1}{2}R(n-1,0) + h_n\left[\sum_{i=1}^{2^{n-1}} f(a + (2i-1)h_n)\right]$$

qui permet de gagner en temps de calcul.

A Corrigé Exercice 1.1

1. On remarque que
$$B_i'(x) = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} = \frac{1}{h_i}, \quad A_i'(x) = -\frac{1}{h_i}$$
La dérivé de If s'écrit alors :
$$If'(x) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + \frac{h_i}{6}(1 - 3A_i^2(x))y_i'' + \frac{h_i}{6}(3B_i^2(x) - 1)y_{i+1}''$$
2. On dérive une seconde fois :
$$If''(x) = A_i(x)y_i'' + B_i(x)y_{i+1}''$$
On remarque que
$$If''|_{[x_i,x_{i+1}]}(x_i) = If''|_{[x_{i-1},x_i]}(x_i) = y_i''$$
On en déduit que If'' est bien continue sur tous les points x_i, de plus If'' est continue sur chaque sous-intervalle (polynôme de degré 1), elle est donc continue sur tout l'intervalle $[a, b]$. Le coefficient y_i'' correspond à la valeur de If'' au point x_i.
3. On calcule la valeur à gauche et à droite de If' :
$$If'|_{[x_i,x_{i+1}]}(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}y_i'' - \frac{h_i}{6}y_{i+1}''$$
$$If'|_{[x_i,x_{i+1}]}(x_{i+1}) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} + \frac{h_i}{6}y_i'' + \frac{h_i}{3}y_{i+1}''$$
soit avec un changement d'indice :
$$If'|_{[x_{i-1},x_i]}(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{h_{i-1}}{6}y_{i-1}'' + \frac{h_{i-1}}{3}y_i''$$
If' est continue sur tout l'intervalle $[a, b]$ si et seulement si elle est continue en chaque point x_i, c'est-à-dire si et seulement si
$$If'|_{[x_{i-1},x_i]}(x_i) = If'|_{[x_i,x_{i+1}]}(x_i)$$
pour tout i de 1 à m, ce qui donne l'équation
$$\frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{h_{i-1}}{6}y_{i-1}'' + \frac{h_{i-1}}{3}y_i'' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{3}y_i'' - \frac{h_i}{6}y_{i+1}''$$
soit en mettant tous les inconnues y'' du même côté :
$$\frac{h_{i-1}}{6}y_{i-1}'' + \left(\frac{h_{i-1}}{3} + \frac{h_i}{3}\right)y_i'' + \frac{h_i}{6}y_{i+1}'' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}$$
qui est le système linéaire annoncé.

B Corrigé Exercice 2.1

1. On a les développements limités suivants
$$I_h = I + Ch^2 + O(h^4)$$
$$I_{h/2} = I + \frac{Ch^2}{4} + O(h^4)$$
2. Pour éliminer le terme en h^2, on considére la combinaison linéaire suivante :
$$4I_{h/2} - I_h = 3I + O(h^4)$$
On obtient donc la formule suivante
$$I \approx \frac{4I_{h/2} - I_h}{3}$$
qui est une formule d'ordre 4.
3. On a
$$\frac{4I_{h/2}}{3} = \frac{h}{3}(f(a) + f(b)) + \frac{2h}{3}\left(\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right) + \frac{2h}{3}\left(\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$
avec $x_i = a + ih$. On rappelle qu'on a
$$\frac{I_h}{3} = \frac{h}{6}(f(a) + f(b)) + \frac{h}{3}\left(\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$
En soustrayant les deux quantités on obtient la formule suivante
$$I \approx \frac{h}{6}(f(a) + f(b)) + \frac{2h}{3}\left(\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right)\right) + \frac{h}{3}\left(\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$