CALCUL NUMÉRIQUE DES INTÉGRALES

Christian BATUT

1. Introduction

L'objet de cette note est de faire un rapide tour d'horizon sur les problèmes qui se posent pour le calcul numérique des intégrales. Elle ne prétend pas être un cours sur ce vaste sujet, mais voudrait donner quelques pistes. Une petite bibliographie (cf. en particulier [2],[3],[5]) à la fin permet de se faire une idée plus précise de la question.

1) premier problème : calculer exactement l'intégrale des polynômes : construire des règles de quadrature exactes sur les polynômes de degré au plus n.

2) deuxième problème : utiliser ces résultats pour calculer les autres intégrales (interpolation des fonctions, extrapolation des limites, problèmes de convergence, évaluation de l'erreur).

L'interpolation polynomiale est un domaine classique très intéressant: on y rencontre
- les formules de Taylor et Newton (opérateur delta),
- les polynômes de Lagrange, Hermite,
- les déterminants de Van der Monde,
- l'algorithme d'Aitken : évaluer les valeurs d'une fonction (et de ses dérivées) à partir de valeurs connues en certains points,
- les polynomes de Bernoulli et la formule d'Euler-MacLaurin.

3) Le choix des points d'interpolation conduit aux méthodes de quadrature de Gauss et à la théorie des polynômes orthogonaux.

4) L'extrapolation des résultats sur les polynômes conduit aux méthodes d'accélération de la convergence : méthode de Romberg-Richardson, procédé d'Aitken.

5) Problème des intégrales singulières ou fortement oscillantes, par exemple comment calculer les intégrales de Fourier et Laplace, les coefficients de Fourier des fonctions périodiques.

6) Peut on donner des algorithmes de quadrature (exemple, l'algorithme de Risch): Calcul formel (Maple et autres systèmes)

7) Le calcul des intégrales en dimension supérieure à 2.

Après avoir évoqué la partie visible de l'iceberg, on se propose de préciser la méthode de Romberg et celle de Gauss-Aitken qui sont en pratique celles qu'il faut connaître en licence de Mathématiques et en classes préparatoires.

2. Règles exactes sur les polynômes

On se ramène par changement de variable à l'intervalle $[0,1]$. Notons Π_n l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à n. Une règle d'intégration est dite de degré n si elle est exacte sur Π_n et fausse pour au moins un élément de Π_{n+1}.

La fonction

$$f \mapsto \int_0^1 f(x)\,dx$$

est une forme linéaire. Sur l' espace vectoriel Π_n de dimension finie $n+1$, elle peut s'écrire comme combinaison linéaire de $n+1$ formes linéaires indépendantes.

Interpolation d'Hermite : de façon générale, considérons un système de points distincts $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ dans $[0,1]$ et des multiplicités $n_1, n_2, \dots, n_m$.

Les $n = n_1 + n_2, \dots + n_m$ formes linéaires

$$f \mapsto f^{(k)}(x_j) \quad (1 \le j \le m,\ 0 \le k < n_j)$$

sont linéairement indépendantes. Il existe un unique polynôme de degré $< n$ tel que

$$P^{(k)}(x_j) = y_j^{(k)} \quad (1 \le j \le m,\ 0 \le k < n_j)$$

et une règle d'intégration exacte pour les polynômes de degré inférieur à n:

$$\int_0^1 f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=0}^{n_j-1} w_j^{(k)} f^{(k)}(x_j).$$

On a ici $n+m$ paramètres $w_j^{(k)}$ et x_j. On peut imposer certains d'entre eux, et on veut que la règle soit de degré le plus élevé possible.

Si on choisit les x_j on est conduit aux méthodes de Newton-Cotes (cas des points équirépartis). Si on laisse le choix des x_j ou d'une partie d'entre eux, on est conduit aux méthodes de Gauss et associées (Radau, Lobatto...). Si on choisit les coefficients, on est conduit aux règles de Tchebicheff (cas des coefficients égaux).

Les x_j étant donnés, il y a des relations de dualité entre la recherche du polynôme d'interpolation $P^{(k)}(x_j) = y_j^{(k)}$ et la recherche des n constantes $w_j^{(k)}$: celles ci sont obtenues en écrivant

$$\mu_i := \int_0^1 x^i\,dx = \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=0}^{n_j-1} (k!) w_j^{(k)} \binom{i}{k} x_j^{i-k} \qquad (0 \le i < n).$$

système linéaire de Cramer dont le déterminant est un *Van der Monde* généralisé. (on a fait apparaître des coefficients binomiaux).

Pour y voir plus clair, considérons simplement le cas particulier où tous les n_j valent 1:

Interpolation de Lagrange: en prenant les formes linéaires $f \mapsto f(x_j)$ où les $x_j \quad (0 \le j \le n)$ sont des points distincts dans $[0,1]$ on obtient la règle exacte sur Π_n:

$$A(f) = \sum_{j=0}^{n} w_j f(x_j)$$

Les w_j sont obtenus en résolvant le système

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_n \\ x_0^2 & x_1^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ x_0^n & x_1^n & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_0 \\ \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix}$$

tandis que la recherche du polynôme de Lagrange fait intervenir la matrice transposée.

Rem: dans le cas général, le déterminant de la matrice des systèmes duaux (constituées de m blocs

$$V_j(n, n_j, x_j) = \Big(\binom{i}{k} x_j^{i-k} \ (0 \le i < n; \ 0 \le k < n_j) \Big)$$

est égal à

$$\prod_{1 \le j < i \le m} (x_i - x_j)^{n_i n_j}$$

montrant existence et unicité des coefficients w).

Dans le cas particulier de Lagrange, les constantes w_j peuvent s'écrire

$$w_j = \int_0^1 l_j(x)\, dx \qquad l_j(x) = \prod_{i \ne j} \frac{x - x_i}{x_j - x_i},$$

les polynômes l_j constituant la base duale de la famille de formes linéaires $f \mapsto f(x_j)$; l'expression générale est assez compliquée.

Les règles de **Newton-Cotes** sont les règles de degré n obtenues avec les points *équi-répartis* $x_j = a + jh$, $h = (b-a)/n$.

La classique **formule d'Euler-MacLaurin** fait partie de ces familles de règles d'intégration

$$\int_0^1 f(x)\, dx = \frac{f(0) + f(1)}{2} + \sum_{k=1}^{p} \frac{B_{2k}}{(2k)!} \big(f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(1) \big) + R_p$$

$$R_p = - \int_0^1 f^{(2k+1)}(x) \frac{B_{2k+1}(x)}{(2k+1)!}\, dx = - - \frac{B_{2p+2}}{(2p+2)!} f^{(2p+2)}(\xi) \qquad (0 < \xi < 1)$$

formules donnant une règle exacte sur Π_{2p+1}. Pour n entier positif, posons $h = (b-a)/n$. On définit la *somme des trapèzes:*

$$T_n = \frac{h}{n}\Big(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+\frac{k}{n}h) + \frac{1}{2}f(b)\Big)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = T_n + \sum_{k=1}^{p} \frac{B_{2k}h^{2k}}{(2k)!}\big(f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)\big) + R_{n,p}$$

$$|R_{n,p}| \le \frac{(b-a)^{2p+3}}{n^{2p+2}} \frac{|B_{2p+2}|}{(2p+2)!} M_{2p+2},$$

où M_{2p+2} est un majorant de $f^{(2p+2)}$ sur l'intervalle d'intégration.

Les nombres de Bernoulli (voir un peu plus bas)

$$B_1 = 1/6,\ B_2 = -1/30,\ B_3 = 1/42,\ B_4 = -1/30...$$

se majorent facilement. Dans l'utilisation de cette formule, un choix judicieux de n et p s'impose! (La série d'Euler-MacLaurin n'est pas en général convergente).

Cette formule est bien adaptée aux règles composées (voir §4.), car elle ne demande l'évaluation des dérivées qu'aux bornes de l'intervalle d'intégration. Donnons une preuve formelle rapide valable pour les polynômes (toutes les sommes sont finies...):

$$f(x+1) = f(x) + f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} + \cdots = e^D f(x)$$

en notant D l'opérateur de dérivation et I l'opérateur identité.

Si F est une primitive de f on a:

$$\int_x^{x+1} f(t)\,dt = F(x+1) - F(x) = (e^D - I)F = \frac{e^D - I}{D} f.$$

$\dfrac{e^D - I}{D}$ est un opérateur inversible sur l'espace Π_n. On introduit le développement en série

$$\frac{x}{e^x - 1} = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \cdots + b_k x^k + \cdots$$

$$f(x) = \int_x^{x+1} f(t)\,dt + b_1 D(F(x+1) - F(x)) + b_2 D^2(F(x+1) - F(x)) + \cdots$$

$$f(x) = \int_x^{x+1} f(x)\,dx + b_1(f(x+1) - f(x)) + b_2(f'(x+1) - f'(x)) + \cdots$$

comme $b_1 = -1/2$ on obtient:

$$\int_x^{x+1} f(x)\,dx = \frac{1}{2}\big(f(x) + f(x+1)\big) + b_2\big(f'(x) - f'(x+1)\big) + b_3\big(f''(x) - f''(x+1)\big) - \cdots$$

les coefficients b_k définissent les nombres de Bernoulli ($b_1 = -1/2$, $b_{2k+1} = 0$, $b_{2k} = B_{2k}/(2k)!$ pour tout $k > 0$).

Il faut signaler le bon comportement des fonctions périodiques (suffisamment dérivables) pour certaines règles. La règle des trapèzes $T_n(f)$ pour l'intervalle $[0, 2\pi]$ est exacte sur les polynômes trigonométriques $P(x) = \sum_{k=-n}^{k=n} c_k e^{ikt}$. Pour une fonction 2π périodique dont la série de Fourier $f(x) = \sum_{k\in Z} c_k e^{ikt}$ converge absolument, on a l'égalité

$$T_n(f) = 2\pi \sum_{k\in Z} c_{nk}.$$

On peut d'ailleurs remarquer que les termes correcteurs à la formule des trapèzes dans la formule d'Euler-MacLaurin sont nuls .

3. Intégration des fonctions quelconques : interpolation polynomiale - évaluation du reste

Pour une fonction non polynôme, on construit un polynôme d'interpolation P dont on calcule exactement l'intégrale comme précédemment. Le problème est alors d'évaluer l'erreur

$$E(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b P(x)\,dx$$

Citons la formule de Peano: Si $E(P) = 0$ pour tout $P \in \Pi_n$, alors pour toute fonction dans $\mathcal{C}_{n+1}([a,b])$, on a :

$$E(f) = \int_a^b f^{(n+1)}(t) K(t)\,dt$$

$$K(t) = \frac{1}{n!} E_x[(x-t)_+^n], \quad (x-t)_+^n = \begin{cases} (x-t)^n & \text{si } x \geq t \\ 0 & \text{si } x < t \end{cases}$$

Pour la plupart des règles usuelles, la fonction $K(t)$ garde un signe constant sur $[a,b]$ et le reste peut s'écrire grace à la formule de la moyenne:

$$E(f) = f^{(n+1)}(\xi) \int_a^b K(t)\,dt \quad \text{pour un } \xi \in [a,b]$$

De plus, en utilisant $f(x) = x^{n+1}$ on obtient

$$E(f) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) E(x^{n+1}).$$

4. Convergence des règles. Règles composées

Il est bien connu que le fait d'augmenter le nombre de points d'interpolation n'améliore pas la qualité de l'approximation de l'intégrale. Appelons *"élémentaires"* les règles précédentes. On utilise des *"règles composées"* qui consistent à subdiviser l'intervalle en n sous intervalles égaux et à appliquer une règle élémentaire sur chacun d'eux; par exemple la règle de Newton-Cotes à 3 points conduit à la **règle de Simpson**:

$$\int_0^1 f(x)\,dx = \frac{1}{6n}\big(f(0) + 4\sum_{k=1}^{n} f(\frac{2k-1}{2n}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(\frac{k}{n}) + f(1)\big)$$

On montre facilement que lorsque p tend vers l'infini, la somme de droite converge vers l'intégrale. Ici, l'erreur est (pour un intervalle $[a,b]$)

$$E(f) = \frac{(b-a)^5}{2880n^4} M_4$$

où M_4 est un majorant de $|f^{(4)|}$ sur $[a,b]$.

5. Méthodes de Gauss

On cherche une règle exacte sur Π_{2m-1} de la forme

$$A(f) = \sum_{k=1}^{m} w_k f(x_k)$$

pour l'intégrale $\int_a^b f(x)\omega(x)\,dx$, où $\omega(x)$ est une fonction poids convenable définie sur $[a,b]$. Le fait de séparer l'intégrand en un produit de 2 fonctions a de nombreux avantages (calculs plus simples, traitement des singularités), intégrale sur des intervalles non bornés). En écrivant

$$\mu_i = A(x^i) = \sum_{k=1}^{m} w_k x_k^i \quad \text{pour } 0 \le i < 2m$$

on a un système de $2m$ équations et $2m$ inconnues w_k, x_k. Si on introduit le polynôme

$$p_m(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_m) = x^m + a_{m-1}x^{m-1} + \cdots a_0,$$

on voit que

$$\text{(1)} \qquad \int_a^b x^i p_m(x)\omega(x)\,dx = 0 \qquad \text{pour } 0 \le i < m$$

ce qui montre que les p_m sont les polynômes orthogonaux pour la mesure $\omega(x)dx$ sur $[a,b]$.

Le problème est alors de calculer le polynôme p_m et ses racines. On obtient alors comme précédemment les w_i. La théorie des polynômes orthogonaux donne des formules et des récurrences pour les p_m; ils sont à racines réelles simples dans $[a,b]$ (si $\omega > 0$) et ces racines peuvent se calculer par la méthode de bissection. En introduisant la matrice des moments $\mu_i = \int_a^b x^i\omega(x)\,dx$, on a un moyen simple de calculer les polynômes: les coefficients a_{m-1}, a_{m-2},...,a_0 sont solutions du système linéaire (1),

$$\mu_{m+i} + a_{m-1}\mu_{m+i-1} + \cdots + a_0\mu_i = 0 \qquad \text{pour } 0 \le i < m$$

c'est à dire $MX = Y$ où

$$M = \begin{pmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{m-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_m \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \mu_{m-1} & \mu_m & \cdots & \mu_{2m-2} \end{pmatrix}$$

$$Y = -^t(\mu_m, \mu_{m+1}, \ldots, \mu_{2m-1})$$

Les coefficients w_j (*nombres de Christoffel*) ont ici des propriétés particulières, notamment ils sont positifs (si $\omega > 0$) et peuvent s'écrire

$$w_j = \int_a^b \omega(x) l_j(x)\, dx = \int_a^b \omega(x) l_j^2(x)\, dx$$

Le terme d'erreur devient

$$E = \frac{f^{(2m)}(\xi)}{(2m)!} \int_a^b \omega(x) p_m^2(x)\, dx$$

Notons que les méthodes de Gauss ont l'avantage de ne pas faire intervenir les extrémités de l'intervalle d'intégration, où il peut exister une singularité. Elles peuvent aussi s'appliquer à des intervalles non bornés.

Les exemples classiques sont
- le poids 1 sur $[-1, +1]$ (polynômes de Legendre),
- le poids $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ sur $[-1, +1]$ (polynômes de Tchebichev),
- le poids e^{-x} sur $[0, +\infty[$ (polynômes de Laguerre),
- le poids e^{-x^2} sur $]-\infty, +\infty[$ (polynômes d'Hermite).

On utilise souvent la formule la plus simple suivante (de degré 3):

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{h}{2}\big(f(\frac{a+b}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(\frac{a+b}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}})\big) \qquad (h = b - a)$$

(Gauss et 2ème polynôme de Legendre)

Une généralisation de la méthode de Gauss consiste à fixer $x_{r+1}, x_{r+2}, ..., x_m$ et laisser indéterminées $x_1, \ldots, x_r$. On a $m + r$ paramètres (m poids et r abscisses) à déterminer pour une règle exacte sur Π_{m+r-1}. Les r autres abscisses sont encore les zéros de certains polynômes. Les **méthodes de Radau et Lobatto**, par exemple consistent à fixer respectivement l'origine et les 2 extrémités de l'intervalle d'intégration (règle exactes sur Π_{2m-2} et Π_{2m-3} (cf [5]).

On peut aussi imposer certains coefficients $w_j^{(k)}$: par exemple si on les prend tous égaux, avec le poids 1 sur $[-1, +1]$ on retrouve les zéros des polynômes de Tchebichev. Mais il peut ne pas y avoir de points x_j réels (ici le polynôme p_n est connu par ses *sommes de Newton* $\sum_{j=1}^m x_j^i$). Prendre tous les $n_j = 2$ et $w_j^{(1)} = 0$ redonne la quadrature de Gauss ci-dessus.

6. Extrapolation - Méthode de Romberg

La formule d'Euler-MacLaurin montre que (si f est suffisamment dérivable) la suite T_n possède un développement limité de la forme

$$T_n = I + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \cdots + a_p h^{2p} + O(h^{2p+2})$$

La méthode de Romberg consiste à lui appliquer le procédé d'accélération de Richardson:

A partir des valeurs T_1, T_2, T_4 ,$\cdots T_{2^j}$..., on *extrapole* la limite T_∞ (on cherche la valeur d'un polynôme $\sum_{j=0}^{p} a_j h^{2j}$ en $h = 0$ à partir de certaines valeurs connues de ce polynôme).

On forme une suite double $T_{i,j}$ en posant

$$T_{0,j} = T_{2^j}$$

$$T_{i,j} = \frac{4^i T_{i-1,j+1} - T_{i-1,j}}{4^i - 1}$$

On vérifie immédiatement que pour $j \to \infty$

$$T_{i,j} = I + O(\frac{1}{4^{(i+1)j}})$$

Cette méthode très classique ne doit être appliquée qu'à des fonctions "bien approchable" par des polynômes, en particulier suffisamment dérivables sur tout l'intervalle d'intégration, bornes comprises. Par exemple elle ne donne aucune accélération pour l'intégrale

$$\int_0^1 \sqrt{x}\, dx.$$

La fonction $\sqrt{x}$ n'est pas dérivable en 0. Cependant il existe un développement limité de la forme:

$$T_n = I + a_1 h^{3/2} + a_2 h^2 + a_3 h^{5/2} + a_4 h^4 + \cdots$$

La méthode de Richardson s'applique alors, mais en remplaçant le facteur 4 par $2\sqrt{2}$ à la première ligne, et en multipliant ce facteur par $\sqrt{2}$ au lieu de 4 à chaque ligne suivante.

De même la fonction $8\sqrt{x(1-x)}$ n'est pas dérivable en 0 et 1. Cependant il existe un développement limité de la forme:

$$T_n = \pi + a_1 h^{3/2} + a_2 h^{5/2} + \cdots + a_p h^{p+1/2} + O(h^{p+3/2})$$

et la méthode de Richardson s'applique, mais en remplaçant le facteur 4 par $2\sqrt{2}$ à la première ligne, et en multipliant ce facteur par 2 au lieu de 4 à chaque ligne suivante.

Notons d'ailleurs que la méthode de Simpson est équivalente à la méthode des Trapèzes sur ces deux exemples.

On donne en appendice l'exemple de $\int_0^1 \frac{4\,dx}{1+x^2}$. (Rem: ici le coefficient de h^{4k} est nul: on peut appliquer la méthode avec le facteur 16 au lieu de 4 à partir de la 2ème ligne et 4 à la 1ère ligne).

La méthode de Romberg n'est pas toujours bien programmée: Il convient d'éviter plusieurs écueils :

1) Pour calculer $T_{0,j} = T_{2^j}$, on utilise $T_{2^{j-1}}$ et on n'évalue la fonction que sur 2^{j-1} points intermédiaires.

2) On peut travailler dans un tableau linéaire: il faut alors éviter de faire commencer la suite $T_{1,j}$ à l'indice 1, la suite $T_{i,j}$ à l'indice i (mais à $j = 0$).

3) On peut construire le tableau Ti, j par diagonales i+j=k successives. On a alors un test d'arrêt tout à fait admissible en pratique, qui est que la différence de 2 termes consécutifs devient inférieur à la précision demandée ε. (En fait si les dérivées successives aux bornes de l'intervalle d'intégration sont très grandes, ce test devient mauvais).

Il convient d'abord de calculer cette différence δ:

$$\delta = \frac{T_{i-1,j+1} - T_{i-1,j}}{4^i - 1}$$

$$T_{i,j} = T_{i-1,j+1} + \delta$$

(cette manière d'ajouter un "terme correcteur" au terme précédent est plus stable numériquement que d'écrire la formule exacte pour $T_{i,j}$ et permet de tester l'arrêt).

Lorsque le terme $T_{k,0}$ a été calculé et si la précision voulue n'est pas atteinte, on commence une nouvelle diagonale $i + j = k + 1$ on double le nombre de trapèzes en calculant la "somme des rectangles"

$$R_k = h \sum_{j=1}^{2^k} f(x_j)$$

où les x_j sont les 2^j nouveaux points médians, puis

$$\delta = \frac{R_k - T_{k,0}}{2} \qquad\qquad T_{k+1,0} = T_{k,0} + \delta$$

(Ici aussi on ne calcule pas directement $T_{k+1,0} = \dfrac{T_{k,0} + R_k}{2}$).

7. Quelques remarques sur le tableau de Romberg :

La première ligne ($i = 1$) du tableau $T_{1,j}$ est la méthode composée de Simpson, la deuxième ligne du tableau $T_{2,j}$ est la méthode composée de Boole-Villarceau.

Les lignes suivantes ne sont plus des règles de Newton-Cotes; en fait la ligne $T_{i,j}$ est une règle composée (dont les coefficients w sont positifs) à $2^i + 1$ points équirépartis et j intervalles de degré de précision $2i + 1$.

On peut d'ailleurs donner une justification de la méthode de Romberg qui ne fait pas appel à la formule d'Euler-MacLaurin (cf [20]):

Considérons une règle

$$A(f)=\sum_{k=1}^{m} w_k f(x_k)$$

exacte sur les polynômes de degré inférieur ou égal à q. Si q est un entier pair et si la règle est *symétrique*, on voit facilement qu'elle est encore exacte sur les polynômes de degré inférieur ou égal à $q+1$. On construit la régle composée $A_2(f)$ en divisant l'intervalle en deux sous intervalles égaux; plus précisément:

$$A_2(f)=\frac{1}{2}A\big(f(\frac{x+a}{2})\big)+\frac{1}{2}A\big(f(\frac{x+b}{2})\big).$$

L'erreur sur le polynôme x^{q+2} est

$$E_2(x^{q+2})=\frac{1}{2}E(\frac{x+a}{2})^{q+2})+\frac{1}{2}E((\frac{x+b}{2})^{q+2})=2^{-(q+2)}E(x^{q+2})$$

et l'on voit qu'on peut intégrer exactement x^{q+2} avec la règle

$$\tilde{A}(f)=\frac{2^{q+2}A_2(f)-A(f)}{2^{q+2}-1}.$$

Le fait que les suites $i\to T_{i,j}$ convergent vers I est assez facile à démontrer. Par contre, on ne sait pas dire grand chose de la vitesse de convergence. Dans le cas ou f est analytique dans un domaine ouvert du plan complexe qui contient l'intervalle $[a,b]$, on peut montrer assez facilement que la convergence est "super-linéaire", c'est à dire plus rapide que toute progression géométrique. Pour prouver la convergence en colonnes, on exprime $T_{i,j}$ en fonction de $T_{0,j}$, $T_{0,j+1}$,...,$T_{0,j+i}$: Les coefficients sont presque des coefficients binomiaux "4-analogues" et on a une formule d'inversion qui permet de retrouver les suites en lignes à partir des suites en colonnes. Voici les formules:

$$T_{i,j}=T_{0,j}+c_{i,1}T_{0,j+1}+\cdots+c_{i,i}T_{0,j+i}$$

$$c_{i,k}=(-1)^{i-k}\frac{4^{k(k+1)/2}}{d_k\cdot d_{i-k}}$$

$$d_i=(4-1)(4^2-1)\cdots(4^i-1)$$

$$\binom{n}{k}_4=\frac{d_n}{d_k\cdot d_{n-k}}$$

$$(-1)^n d_n T_{n,0}=\sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k}_4\big((-1)^k 4^{\frac{k(k+1)}{2}}T_{0,k}\big)$$

$$4^{n(n+1)/2}T_{0,n}=\sum_{k=0}^{n}4^{\frac{(n-k)(n-k-1)}{2}}\binom{n}{k}_4\big(d_k T_{k,0}\big)$$

(Notons que toutes ces formules ne dépendent pas de l'indice de colonne j). La convergence en colonne résulte alors d'un raisonnement de type Césaro et du fait que $c_{i,k} \to 0$ quand $i \to \infty$ (cf. [4], [5], [13]).

8. Accélération d'Aitken

Toute suite u_j possédant une convergence linéaire vers une limite l (c'est à dire s'il existe une constante c telle que $\varepsilon_j = c\varepsilon_{j-1}$ où $\varepsilon_j = u_j - l$) peut être accélérée par le procédé d'Aitken: La résolution de 3 équations successives $\varepsilon_j = c\varepsilon_{j-1}$ aux 3 inconnues l, ε_j et c donne *la formule d'extrapolation d'Aitken:*

$$l = u_{j+2} - \frac{(u_{j+2} - u_{j+1})^2}{u_{j+2} - 2u_{j+1} + u_j}$$

qui permet de construire une nouvelle suite plus rapidement convergente. On peut alors appliquer à nouveau le procédé.

En utilisant une règle de Gauss et en prenant pour u_j la règle composée à 2^j intervalles, on obtient un moyen très efficace pour calculer une intégrale. Par exemple on obtient 22 décimales correctes pour $\int_0^1 \sqrt{x}\, dx$ avec une règle de Gauss à 2 points sur 10 sous-intervalles alors que 4096 trapèzes ne donnent que 13 décimales (pour un même nombre d'évaluations de la fonction).

9. Intégrales singulières

Voici quelques idées:

- - Ignorer les singularités peut réussir! (appliquer plusieurs méthodes).
- - Développer en série et intégrer terme à terme.
- - Soustraire la singularité et découper l'intégrale en une partie singulière qui obéit aux méthodes classiques et une singulière où l'on peut appliquer les règles d'approxiamtion.
- - Changer d'argument est une arme efficace.
- - Les méthodes de Gauss évitent les singularités.
- - Un développement asymptotique peut parfois être employé.

10. Intégration en dimension supérieure à 2

De nombreux problèmes nouveaux apparaissent:

- - l'augmentation de la quantités de calculs.
- - les nombreuses formes du domaine d'intégration.
- - la non indépendance des formes linéaires analogues aux $f^{(k)}(x_j)$.
- - la non existence d'une théorie satisfaisante des polynômes orthogonaux.

11. Algorithme d'intégration et systèmes de calcul formel

Ils se sont développés récemment, mais ne sont pas toujours efficaces. Par exemple les systèmes *Axiom* et *MuPAD* utilisent **l'algorithme de Risch** et réussissent:

$$\int \frac{t+1}{(t-2)\sqrt{t^3+1}} = -\,-\frac{1}{3}\log\frac{(6t+6)\sqrt{t^3+1}+t^3+12t^2-6t+10}{t^3-6t^2+12t-8}.$$

MacSyma, *Maple* et *Reduce* échouent. *Mathematica* retourne une réponse compliquée laissant croire que la primitive n'est pas élémentaire (cf [7], [15]).

12. BIBLIOGRAPHIE

[1] Moisan, Jacques , Debeaumarché Gérard : Mathématiques et informatique aux concours scientifiques. Travaux dirigés, problèmes corrigés et exercices pour les classes de mathématiques supérieures et spéciales et les premiers cycles scientifiques des universités. Ellipses Eyrolles (1989)

[2] Demailly Jean-Pierre : Analyse numérique et équations différentielles. Presses Universitaires de Grenoble (1991)

[3] Stoer J, Bulirsch, R. : Introduction to numerical analysis. Second edition. Texts in applied mathematics - 12 Springer Verlag (1993)

(Le chapitre 3 constitue un cours tout à fait adapté en Math. Spé.)

[4] Davis, Philip J. Rabinowitz, Philip : Methods of numerical integration. Academic Press (1975)

("Pavé" très complet qui fait le tour de la question)

[5] Ralston Anthony A first course in numerical analysis McGraw-Hill (1965)

(chapitre 4 très complet sur la quadrature)

[6] Dahlquist, Germund, Bjorck, Ake : Numerical methods. Prentice-Hall series in automatic computation. Prentice-Hall (1974)

[7] Geddes, Keith O. Czapor, Stephen R. Labahn, George. Algorithms for computer algebra Kluwer academic publishers (1992)

[8] Scheid Francis Theory and problems of numerical analysis. Second edition.
Schaum's Outline Series. Schaum publising Co (1968)

(Nombreux exercices)

[9] Szego Gabor : Orthogonal polynomials. American Mathematical Society Colloquium Publications - 23. American Mathematical Society (1939)

Ouvrage classique sur la théorie des polynômes orthogonaux.

On trouve dans la revue de Mathématiques Spéciales (RMS), ainsi que dans l'American Mathematical Monthly (AMM) de nombreux articles très courts et faciles à lire qui constituent d'intéressantes sources d'exercices. En voici quelques uns sur lesquels je suis tombé:

[11] La formule d'Euler-MacLaurin et son application au calcul approché de certaines séries par B. Kokanovsky et J.L. Lamard RMS 80-81 p 325 (cf aussi RMS 83-84 p 161)

[12] Sur quelques formules d'intégration approchée par A. Warusfel RMS 82-83 p 294

[13] A propos de la méthode d'intégration de Romberg par A. Warusfel RMS 85-86 p186

[14] L'intégrale par J.M. Arnaudiès RMS 89-90 p 287
[15] Sommation et intégration formelle par D. Monasse RMS 93-94 p 241-247
[16] L'intégrale de Lebesgue en classe de Math. Spé. par R Antetomaso RMS 93-94 p 481
[17] Fubini simple et efficace par A. Warusfel RMS 93-94 p 529
[18] R.W. Hamming: A class or integration formulas AMM 78 (Mai 1971) p518
[19] G.M Philipps: Gregory method of numerical integration AMM 79 (Mars 1972) p 270-274
[20] T. von Petersdorff: A short proof for Romberg integration AMM Oct 1993 p 783

13. Appendice: Règles usuelles

Rectangles :

$$\int_a^b f(x)\,dx = hf(\frac{a+b}{2}) \qquad E = \frac{h^3}{24}f''(\xi) \quad h = b-a$$

Trapèzes :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) \qquad E = -\frac{h^3}{12}f''(\xi) \qquad h = b-a$$

Simpson :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) \qquad E = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \qquad h = \frac{b-a}{2}$$

Boole/Villarceau :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{2h}{45}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$$

$$E = -\frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\xi) \qquad h = \frac{b-a}{4}$$

Newton-Cotes 7 points :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{140}(41f_0 + 216f_1 + 27f_2 + 272f_3 + 27f_4 + 216f_5 + 41f_6)$$

$$E = -\frac{9h^9}{1400}f^{(8)}(\xi) \qquad h = \frac{b-a}{6}$$

Euler-MacLaurin :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + \sum_1^p \frac{h^{2k}B_{2k}}{(2k)!}\Big(f^{(2k-1)}(a) - f^{(2k-1)}(b)\Big)$$

$$E = \frac{h^{2p+3}B_{2p+2}}{(2p+2)!}f^{(2p+2)}(\xi) \qquad h = b-a$$

Autre règle de degré 5 :

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + \frac{h^2}{10}(f'(a) - f'(b)) + \frac{h^3}{120}(f''(a) + f''(b))$$

$$E = \frac{h^7}{100800}f^{(6)}(\xi) \qquad h = b-a$$

Accélération de Romberg (Richardson (4, 4)) pour $\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2} = \pi$

Nombre de décimales correctes: (la 1ère ligne est la règle des trapèzes $T(2^j)$) :

1	1	2	3	3	4	4	5	6	6	7	7	8
2	5	7	9	10	12	14	16	18	19	21	23	
3	6	8	10	12	14	15	17	19	21	23		
5	8	13	16	19	22	25	28	31	34			
8	10	15	18	21	24	27	30	33				
10	13	19	24	28	33	37	41					
13	17	22	28	32	36	41						
17	21	27	35	40	45							
21	26	31	40	45								
26	32	37	47									
33	37	43										
37	43											
43												

Accélération de Richardson (16, 4)) pour $\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2}$

1	1	2	3	3	4	4	5	6	6	7	7	8
2	5	7	9	10	12	14	16	18	19	21	23	
4	7	11	14	17	20	23	26	29	32	35		
7	10	15	21	25	29	33	37	42	46			
10	14	19	27	33	38	44	49	54				
14	21	25	35	42	48	55	62					
20	25	31	42	51	59	67						
25	31	39	50	62	71							
31	39	48	59	74								
39	48	59	69									
48	59	69										
59	69											
69												

Accélération d'Aitken pour $\int_0^1 \frac{4dx}{1+x^2}$

1	1	2	3	3	4	4	5	6	6	7	7	8
2	5	7	9	11	13	15	16	18	20	22		
8	9	14	17	20	23	26	29	32				
11	17	20	26	30	34	39						
20	24	30	37	43								
27	36	43										
43												

Différence entre intégrale et somme des Trapèzes

1. Formule d'Euler MacLaurin

$$\boxed{\int_0^1 f(x)\,dx \;=\; \frac{1}{2}(f(0)+f(1))+\sum_1^p \frac{B_{2k}}{(2k)!}\Big(f^{(2k-1)}(0)-f^{(2k-1)}(1)\Big)+R_p}$$

$$R_p=-\frac{B_{2p+2}}{(2p+2)!}f^{(2p+2)}(\xi) \qquad\qquad 0<\xi<1$$

$$\frac{x}{e^x-1}=1-\frac{1}{2}x+\sum_1^\infty \frac{B_{2k}}{(2k)!}x^{2k}$$

$$T_n=h\Big(\frac{1}{2}f_0+\sum_{k=1}^{n-1}f_k+\frac{1}{2}f_n\Big) \qquad\qquad h=\frac{b-a}{n}$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \;=T_n+\sum_{k=1}^p \frac{h^{2k}B_{2k}}{(2k)!}\big(f^{(2k-1)}(a)-f^{(2k-1)}(b)\big)+R_{n,p}}$$

$$|R_{n,p}|\le \frac{(b-a)^{2p+3}}{n^{2p+2}}\frac{|B_{2p+2}|}{(2p+2)!}M_{2p+2},$$

où M_{2p+2} est un majorant de $f^{(2p+2)}$ sur l'intervalle d'intégration.

2. Formule de Gregory

$$\Delta f(x)=f(x+h)-f(x)$$

$$\frac{\Delta^j f(x)}{j!}=\sum_{i\ge j}s_{i,j}\frac{h^i}{i!}f^{(i)}(x) \qquad\qquad \frac{h^j}{j!}f^{(j)}(x)=\sum_{i\ge j}S_{i,j}\frac{\Delta^i f(x)}{i!}$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx=T_n--h\sum_{k=1}^p c_{k+1}\big(\Delta^k f_0+(-\Delta)^k f_{n-k}\big)+R_{n,p}}$$

$$\frac{x}{\log(1+x)}=\sum_0^\infty c_k x^k=1+\frac{1}{2}x-\frac{1}{12}x^2+\frac{1}{24}x^3-\frac{19}{720}x^4+\cdots$$

3. Coefficients de Newton-Cotes:

$$\boxed{w_{n,j}=\frac{1}{n}\Big(\varepsilon_j-(-1)^j\sum_{k=j}^n(-1)^k c_{k+1}C_k^j--(-1)^{n-j}\sum_{k=n-j}^n(-1)^k c_{k+1}C_k^{n-j}\Big)}$$

où $\varepsilon_j=1$ si $0<j<n$ et $\varepsilon_0=\varepsilon_n=1/2$.

Par exemple $\quad w_{2,0}=w_{2,2}=\frac{1}{6},\ w_{2,1}=\frac{4}{6}$.