Introduction à l'Analyse Numérique, MAM3 2015/2016

Holger Heumann

basé sur les notes de

Abderrahmane Habbal et Jean-Antoine Desideri

23 décembre 2015

Table des matières

1 Interpolation **5**

1.1 Généralités 5

1.2 Interpolation Polynômiale 6

1.2.1 Interpolation des valeurs d'une fonction, polynôme de Lagrange 6

1.2.2 Calcul de l'erreur 9

1.2.3 Évaluation des polynômes 10

1.3 Approximation par Moindres Carrés 15

1.4 Polynômes Orthogonaux 18

2 Différentiation et Intégration Numérique **23**

2.1 Considérations Générales 23

2.2 Différentiation Numérique 25

2.2.1 Example 25

2.2.2 Cas Général du Polynôme d'Interpolation de Lagrange 26

2.2.3 Diverses formules et leurs erreurs 27

2.2.4 Erreur de discrétisation, Précision, Erreur arrondi . . . 30

2.3 Intégration Numérique 31

2.3.1 Formules de base 31

2.3.2 Formules d'intégration composées 34

2.3.3 Réglés d'intégration de Gauss 36

2.3.4 Réglés d'intégration de Gauss [version Habbal/Desideri] 38

3 Équations Différentielles **45**

3.1 Rappels 45

3.1.1 Equation différentielle d'ordre n, $n \in \mathbb{N}$ 45

3.1.2 Forme canonique 45

3.1.3 Équation différentielle linéaire homogène 46

3.1.4 Équation différentielle linéaire homogène à coefficients constants . . . 47
3.1.5 Analogie entre les équations ax differénces et les équations différentielles . . . 47
3.2 Intégration numérique . . . 47
3.2.1 Intégration numérique par développement Taylor . . . 48
3.2.2 Théorème de convergence . . . 50
3.2.3 Méthodes de Runge-Kutta . . . 52
3.2.4 Méthode de multipas . . . 54
3.2.5 Méthode de prédicteur-correcteur . . . 57
3.3 Notion de Stabilité . . . 58

Chapitre 1

Interpolation

1.1 Généralités

Le problème de l'interpolation peut se poser dans plusieurs situations. Par exemple :

a) Une fonction f *n'est pas complètement définie*. On connait simplement un nombre finie de ses valeurs (par exemple données expérimentales) :

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n)),$$

On peut alors vouloir déterminer une fonction φ définie sur tout un intervalle et constituant une certaine *approximation de* f (dans un sens à préciser). Il est alors souhaitable que $\varphi(x)$ soit numériquement *facile à évaluer*.

b) *Tabulation d'une fonction spéciale.* $f(x)$ est connue pour tout x, mais son évaluation numérique est complexe. On peut alors vouloir déterminer une fois pour toutes un nombre fini de valeurs $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ et pour tout $\xi \neq x_0, x_1, \ldots, x_n$ approcher $f(\xi)$ en fonction de ces valeurs.

Définition 1. (Problème interpolation) *On cherche à construire une fonction*

$$\varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n) \tag{1.1}$$

où x est la variable et $a_0, a_1, \ldots$ sont des paramètres ajustables, de telle sorte que pour $(n+1)$ couples (x_i, f_i) $(f_i = f(x_i))$ on ait

$$\varphi(a_i; a_0, a_1, \ldots, a_n) = f_i \quad i = 0, 1, 2, \ldots n\,. \tag{1.2}$$

FIGURE 1.1 – Interpolation des valeurs d'une fonction, polynôme de Lagrange

On appelle

$$\begin{aligned} (b_i, f_i) &= \textit{points du support d'interpolation} \\ b_i &= \textit{abscisses du support (toutes distinctes)} \\ f_i &= \textit{ordonnés} \end{aligned}$$

On choisit la forme que l'on donne à $\varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n)$ de manière à ce que le réglage des paramètres $a_0, a_1, \ldots a_n$ soit le plus simple possible et que l'évaluation numérique de $\varphi(x; a_0, a_1, \ldots, a_n)$ en un point x donné nécessite le moins d'opérations possibles.

Différents types d'interpolation :

- linéaire :
  φ dépend linéairement de $a_0, a_1, \ldots$ (Sa détermination résulte de la résolution d'un système linéaire.)
- polynomiale :
  φ est un polynôme en x (adapté à l'interpolation de fonctions "lisses")
- autres :
  - rationnelle (comportement asymptotique $x \to \infty$
  - exponentielle (monotonie)
  - trigonométrique (fonctions périodiques)

1.2 Interpolation Polynômiale

1.2.1 Interpolation des valeurs d'une fonction, polynôme de Lagrange

On cherche à déterminer un polynôme de plus bas degré possible qui interpole la fonction en $n + 1$ points distincts $x_0, x_1, \ldots x_n$. Il est naturel de chercher un polynôme de degré $\leq n$ ($n + 1$ coefficients ajustables). Ce problème admet une unique solution :

Théorème 2. *Étant donnés :*

- *un entier n,*
- *$(n+1)$ points distincts de la droite réelle,*

$$x_0, x_1, \ldots, x_n,$$

- *les valeurs $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ d'une fonction régulière de $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ définie au moins sur le support d'interpolation.*

Il existe un polynôme $P_n(x)$ et un seul de degré $\leq n$ tel que :

$$i = 0, 1, \ldots, n : \quad P_n(x_i) = f(x_i)$$

Démonstration. a) **Existence :** Supposons que l'on soit capable de construire $n+1$ polynômes $Q_0(x), Q_1(x), \ldots, Q_n(x)$ de degré $\leq n$ tels que

$$\forall i\,, \forall j\,, \quad Q_i(x_j) = \delta_{i,j} = \begin{cases} 1\,, & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j\,, \end{cases}$$

alors

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) Q_i(x)$$

répond à la question. En effet

$$\deg(P_n) \leq \max_i(\deg(Q_i)) \leq n$$

$$\forall j, P_n(x_j) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) Q_i(x_j) = f(x_j)$$

On voit qu'il suffit de prendre (noter qu'aucun facteur n'est nul)

$$Q_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)}$$

b) **Unicité :** Supposons que $Q_n(x)$ soit un polynôme de degré deg $\leq n$ satisfaisant la condition d'interpolation

$$\forall i, \quad Q_n(x_i) = f(x_i)$$

Alors le polynôme $P_n(x) - Q_n(x)$ s'il n'est pas nul est de degré $\leq n$ et s'annule en $(n+1)$ points. Ceci constitue une contradiction.

Figure 1.2 – for proof

On conclut que l'on a nécessairement

$$Q_n = P_n$$

La solution est donc unique (parmi les polynômes de degré $\leq n$).

□

Remarque 3. *Quels sont tous les polynômes satisfaisant la condition d'interpolation, sans restriction de degré ?*

Réponse

$$P(x) = P_n(x) + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) Q(x)$$

où $Q(x)$ est un polynôme quelconque.

Définition 4. *Le polynôme*

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{j=0, j \neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

est appelé polynôme d'interpolation de Lagrange *de la fonction f basé sur les $n+1$ points distincts $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$. P_n est de degré $\leq n$. L'ensemble des polynômes*

$$\left\{ \prod_{j=0, j \neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right\}_{i=0}^{n}$$

est appelé la base de polynômes d'interpolation de Lagrange.

Un exemple : On considère $f(x) = 2^x$. Le polynôme de Lagrange P_2 pour $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ et $x_2 = 1$ est

$$P_2(x) = \frac{1}{4}x(x-1) - (x+1)(x-1) + (x+1)x\,.$$

Le polynôme de Lagrange P_3 pour $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ et $x_3 = 2$ est

$$P_3(x) = \frac{-1}{12}x(x-1)(x-2) + \frac{1}{2}(x+1)(x-1)(x-2) - (x+1)x(x-2) + \frac{2}{3}(x+1)x(x-1)\,.$$

On trouve $P_2(0.5) = \frac{23}{16}$ et $P_3(0.5) = \frac{91}{64}$, alors l'erreur c'est $|P_2(0.5) - \sqrt{2}| = 0.02328643762$ et $|P_3(0.5) - \sqrt{2}| = 0.00766143762$.

1.2.2 Calcul de l'erreur

Théorème 5. *Soit f une fonction de classe $\mathcal{C}^{n+1}([a,b])$ pour une certain entier n et $(n+1)$ points distincts $\{x_i\}_{i=0,1,\dots,n}$ de $[a,b]$. On note $P_n(x)$ le polynôme d'interpolation de Lagrange de la fonction f basé sur ces points. Alors pour tout point $z \in [a,b]$ il existe un point $\xi \in]a,b[$ tel que*

$$f(z) - P_n(z) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}(z-x_0)(z-x_1)\dots(z-x_n)$$

Démonstration. a) z est l'un des points $x_0, x_1, \dots, x_n$. Le résultat est trivial.

b) z est distinct de tous les x_i. On pose alors

$$\lambda = \frac{f(z) - P(z)}{(z-x_0)(z-x_1)\dots(z-x_n)}$$

et on introduit la fonction $\varphi(x)$ définie par

$$\varphi(x) = f(x) - P_n(x) - \lambda(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)\,.$$

φ a la même régularité que f : $\varphi \in C^{n+1}([a,b])$. φ s'annule en $n+2$ points distincts :

$$x_0, x_1, \dots, x_n \text{ et } z$$

Donc (théorème de Rolle) φ' s'annule en $n+1$ points distincts et φ'' s'annule en n points, et .... Donc φ^{n+1} s'annule en un point ξ au moins :

$$0 = \varphi^{n+1}(\xi) = f^{n+1}(\xi) - 0 - \lambda(n+1)!\,,$$

et, alors

$$f(z) - P_n(z) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{n+1!}(z-x_0)(z-x_1)\dots(z-x_n)\,.$$

□

Le corollaire suivant est le cas particulière avec des points interpolation équidistants.

Corollaire 6. *Soit f une fonction de classe $\mathcal{C}^{n+1}([a,b])$ pour une certain entier n et $(n+1)$ points distincts et équidistant $\{x_i = a+ih\}_{i=0,1,\dots,n}$ de $[a,b]$ avec $h = \frac{b-a}{n}$. On note $P_n(x)$ le polynôme d'interpolation de Lagrange de la fonction f basé sur ces points. Alors pour tout point $z \in [a,b]$ il existe un point $\xi \in]a,b[$ tel que*

$$\sup_{z\in[a,b]} |f(z) - P_n(z)| \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} \sup_{\xi\in[a,b]} f^{n+1}(\xi)$$

Démonstration. On suppose $x_{i-1} \leq x \leq x_i$:

$$\begin{aligned}
\prod_{j=0}^{n} |z-x_j| &= |z-x_0|\dots|z-x_{i-1}||z-x_i|\dots|z-x_n| \\
&\leq (i)h(i-1)h\dots 2h|z-x_{i-1}||z-x_i|2h\dots(n-i+1)h \\
&= h^{n-2}(z-x_{i-1})(x_i-z)i!\,(n+1-i)! \\
&\leq h^{n-2}(x_{i-1}-x_i)^2\frac{1}{4}i!\,(n+1-i)! \\
&\leq h^{n-2}(x_{i-1}-x_i)^2\frac{1}{4}(n+1)!
\end{aligned}$$

car $\max_{x_{i-1}\leq x\leq x_i}(x-x_{i-1})(x_i-x) = \frac{1}{4}(x_i-x_{i-1})^2$ et $i!(n+1-i)! \leq n!$ □

1.2.3 Évaluation des polynômes

Motivation :

a) évaluation économique d'un polynôme

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x + \dots + a_nx^n$$

— la pire des méthodes ($\frac{n(n+1)}{2}$ multiplications) :
calculer séparément les puissances x^i de x, évaluer la somme $\sum_{i=0}^{n} a_ix^i$

— l'algorithme des facteurs emboités :

$$P(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(\dots(a_{n-1} + x(a_n))\dots)))$$

Soit z une valeur particulière, et

$$\begin{aligned} &b_n = a_n, \\ &b_i = a_i + x_0 b_{i+1},\ i = n-1, ..., 1, 0. \end{aligned}$$

Alors $P(z) = b_0$

Démonstration.

$$\begin{aligned} a_i =& b_i - z b_{i+1} \\ P(z) =& b_0 - z b_1 + (b_1 - z b_2) z + (b_2 - z b_3) z^2 + \dots \\ & + (b_{n-1} - z b_n) z^{n-1} + b_n z^n = b_0 \end{aligned}$$

□

b) Soit $P_k(x)$ le polynôme d'interpolation associé aux points $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k$. Il est souhaitable que l'organisation des calculs soit telle que les calculs effectués pour construire P_{k-1} soit directement utilisable pour construire P_k afin que des approximations supérieurs puissent être construites sans refaire tous les calculs à chaque fois.
Pour cela, on examine $h(x) = P_k(x) - P_{k-1}(x)$:

$$\deg h \leq k$$

et

$$h(x_0) = h(x_1) = \cdots = h(x_{k-1}) = 0\,,$$

alors

$$h(x) = A_k(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})$$

avec $A_k = A_k(f; x_0, x_1, \dots x_k)$. A_k est appelée *kième différence divisée* aux points $x_0, x_1, \dots x_k$.

Définition 7. *Soit $P_k(x)$ le polynôme d'interpolation associé aux points $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k$ et $P_{k-1}(x)$ le polynôme d'interpolation associé aux points $x_0, x_1, \dots, x_{k-1}$. $f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ est appelée* kième différence divisée *aux points $x_0, x_1, \dots x_k$. On a*

$$P_k(x) = P_{k-1}(x) + f[x_0, x_1, \dots, x_k](x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1})$$

On trouve

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \quad P_k(x) = f[x_0, x_1, \dots x_k]x^k + (\text{polynôme de deg} < k) \\
&\Rightarrow \quad P_k(x)^k = k! f[x_0, x_1, \dots x_k] \\
&\Rightarrow \quad f[x_0, x_1, \dots x_k] = \frac{P_k^k(x)}{k!}
\end{aligned}
$$

que la $k$ième différence divisée est proportionnelle à la $k$ième dérivée de P_k. En plus on a

$$
\begin{aligned}
P_k(x) &= \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \prod_{j=0, j\neq i}^{k} \frac{x - x_i}{x_i - x_j} \\
&= \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{j=0, j\neq i}^{k} (x_i - x_j)} x^k + (\text{polynôme de deg} < k)
\end{aligned}
$$

alors

$$
f[x_0, x_1, \dots x_k] = \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{\prod\limits_{j=0, j\neq i}^{k} (x_i - x_j)}
$$

La $k$ième différence divisée dépend des points mais pas de l'ordre.

On revient à la formule

$$
P_k(x) = P_{k-1}(x) + f[x_0, x_1, \dots x_k](x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1}) .
$$

On convient que $f[x_0] = f(x_0) = P_0(x)$

$$
\begin{aligned}
&P_0(x) = f[x_0] \\
&P_1(x) = P_0(x) + f[x_0, x_1](x - x_0) \\
&P_2(x) = P_1(x) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\
&\qquad \dots \\
&P_n(x) = P_{n-1}(x) + f[x_0, x_1, \dots x_n](x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})
\end{aligned}
$$

et on trouve la forme de Newton du P_n.

Théorème 8. La forme de Newton *du polynôme d'interpolation de Lagrange basée sur les points* $x_0, x_1, \ldots, x_n$ *est :*

$$\begin{aligned} P_n(x) =& f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)+ \\ & \cdots + f[x_0, x_1, \ldots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_{n-1}) \\ =& \sum_{i=0}^{n} f[x_0, x_1, \ldots, x_i] \prod_{j=1}^{i-1} (x - x_j) \end{aligned}$$

où par convention $\prod_{j=0}^{-1}(x - x_j) = 1$.

Plus généralement, on appellera *forme de Newton* basée sur les points $y_1, y_2, \ldots y_k$ un polynôme $P(x)$ donné par

$$\begin{aligned} P(x) = a_0 + a_1(x - y_1) + a_2(x - y_1)(x - y_2)+ \\ \ldots a_k(x - y_1)(x - y_2) \ldots (x - y_k) \end{aligned}$$

où $a_0, a_1, \ldots, a_k$ sont des coefficients donnés.

Théorème 9. *On a la formule suivante*

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_{k+1}] = \frac{f[x_1, \ldots, x_{k+1}] - f[x_0, x_1, \ldots, x_k]}{x_{k+1} - x_0}$$

pour les différences divisées $f[x_0, x_1, \ldots, x_{k+1}]$, $f[x_1, \ldots, x_{k+1}]$ *et* $f[x_0, x_1, \ldots, x_k]$ *d'une fonction* f *dans les points* $\{x_0, x_1 \ldots, x_{k+1}\}$, $\{x_1, \ldots, x_{k+1}\}$ *et* $\{x_0, x_1, \ldots, x_k\}$.

Démonstration. Soient p et q les polynômes d'interpolation pour f dans

$$\{x_0, x_1, \ldots, x_k\} \quad \text{et} \quad \{x_1, \ldots, x_{k+1}\}$$

et on trouve que

$$r(x) := \frac{(x - x_0)q(x) + (x_{k+1} - x)p(x)}{x_{k+1} - x_0}$$

est un polynôme de degré $\leq k + 1$, qui vérifie $r(x_i) = f(x_i), 0 \leq i \leq k + 1$. D'après la définition des différences divisées (le coefficient devant x^k pour un polynôme d'interpolation de degré k) on trouve

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_{k+1}] = \frac{f[x_1, \ldots, x_{k+1}] - f[x_0, x_1, \ldots, x_k]}{x_{k+1} - x_0}$$

□

L'application récursive de cette formule permet de construire le table des différences divisées.

$$\begin{array}{cccccc}
x_0 & f[x_0] & f[x_0,x_1] & \dots & f[x_0,\dots,x_{n-1}] & f[x_0,\dots,x_n] \\
x_1 & f[x_1] & f[x_1,x_2] & \dots & f[x_1,\dots,x_n] & \\
\dots & \dots & \dots & \dots & & \\
x_{n-2} & f[x_{n-2}] & f[x_{n-2},x_{n-1}] & \dots & & \\
x_{n-1} & f[x_{n-1}] & f[x_{n-1},x_n] & & & \\
x_n & f[x_n] & & & &
\end{array}$$

Une fois la table construite, on a alors :

$$\begin{aligned} P_n(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1](x-x_0) + f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1) + ... \\ ... + f[x_0,x_1,\dots,x_n](x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1}) \end{aligned}$$

et on peut utiliser le schéma de Horner pour évaluer $P_n(x)$:

— Poser $b_n = f[x_0,\dots,x_n]$
— Pour $i = n-1, n-2, \dots, 0$ faire :

$$b_i = f[x_0,\dots,x_i] + (x-x_i)b_{i+1}$$

et trouver $b_0 = P_n(x)$.

Démonstration.

$$f[x_0,\dots,x_n] = b_n \qquad f[x_0,\dots,x_i] = b_i + b_{i+1}(x_i - x)$$

Alors

$$
\begin{aligned}
P(x) = & b_0 + b_1(x_0 - x) \\
& + (b_1 + b_2(x_1 - x))(x - x_0) \\
& + (b_2 + b_3(x_2 - x))(x - x_0)(x - x_1) \\
& + \dots \\
& + (b_{n-1} + b_n(x_{n-1} - x)) \prod_{i=0}^{n-2}(x - x_i) \\
& + b_n \prod_{i=0}^{n-1}(x - x_i) \\
= & b_0
\end{aligned}
$$

$\square$

Remarque 10. *Remarques sur les faiblesses de l'interpolation de Lagrange*

a) *Supposons que $f(x) = K(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$. Alors le polynôme d'interpolation de Lagrange de* deg $\leq n$ *basé sur les points $x_0, x_1, \dots, x_n$ c'est le polynôme nul, et l'erreur $e = f - p_n = f$ est fortement oscillatoire. Pourtant on aurait pu penser que l'approximation d'un polynôme de degré $n+1$ par un polynôme de degré n eut été bonne. Lorsque le nombre des points est grand il vaut mieux utiliser plusieurs approximations de bas degré qu'un seul de haut degré. C'est ça l'idée générale pour le spline (approximation locale) : On approche f par morceau : Sur chaque morceau (l'intervalle) on approche $f(x)$ par une quadratique, une cubique ou un quartique.*

b) *Lorsque les données sont bruitées on ne veut pas nécessairement passer exactement par les points. Alors, c'est mieux d'avoir un approximation au sens des moindres carrés.*

1.3 Approximation par Moindres Carrés

On cherche à approcher une fonction donnée f par une polynôme p de degré $\leq k$ qui minimise la norme (ou plutôt le carré de la norme) de la différence entre f et p :

$$
E = \|f - p\|^2 = \langle f - p, f - p \rangle := \begin{cases} \text{soit} & \int_a^b (f(x) - p(x))^2 w(x) dx \\ \text{soit} & \sum_{n=1}^{N} (f(x_n) - p(x_n))^2 w(x_n) \end{cases}
$$

avec $w(x) > 0$ donné. Pour cela on considère une base $\{P_0, P_1, \ldots, P_k\}$ des polynômes de degré $\leq k$. On envisage en particulier le cas d'une base orthogonale. On peut chercher la solution sous la forme

$$p(x) = d_0 P_0(x) + d_1 P_1(x) + \cdots + d_k P_k(x)$$

D'où

$$E = E(d_0, d_1, \ldots, d_k) = \langle f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i, f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i \rangle = \| f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i \|^2$$

Soit $(d_0^*, d_1^*, \ldots, d_k^*)$ la solution optimale (qui minimise E). On a :

$$r = 1, 2, \ldots k \quad \frac{\partial E}{\partial d_r}(d_0^*, d_1^*, \ldots, d_k^*) = 0$$

Or

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial d_r} &= \langle -P_r, f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i \rangle + \langle f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i, -P_r, \rangle \\
&= -2 \langle P_r, f - \sum_{i=0}^{k} d_i P_i \rangle
\end{aligned}$$

D'où :

$$\frac{1}{2} \frac{\partial E}{\partial d_r} = \sum_{i=0}^{k} d_i^* \langle P_r, P_i \rangle - \langle f, P_r \rangle$$

La solution optimale satisfait donc le système :

$$\sum_{i=0}^{k} d_i^* \langle P_r, P_i \rangle = \langle f, P_r \rangle \quad r = 0, 1, \ldots k$$

On obtient un système linéaire de $k+1$ équations pour $k+1$ inconnues $d_0^*, d_1^*, \ldots, d_k^*$. Ce système s'appelle le système des *équations normales.* En particulier, si l'on choisit une base orthogonale, le système devient diagonale

$$d_i^* \langle P_i, P_i \rangle = \langle f, P_i \rangle$$

et la solution est immédiate

$$d_i^* = \frac{\langle f, P_i \rangle}{\langle P_i, P_i \rangle} \ .$$

Conclusion : On a donc intérêt à construire la base orthogonale $\{P_0, P_1, \dots, P_k\}$ issue du produit scalaire considéré. La solution s'exprime alors de manière immédiate dans cette base particulière.

Exemple : Approximation de la fonction exponentielle sur $[-1, 1]$ par un polynôme de degré ≤ 3. On veut minimiser $\int_{-1}^{1}(\exp(x) - p(x))^2 dx$. On considère donc le produit scalaire $\langle g, h\rangle = \int_{-1}^{1} g(x)h(x)dx$ et les polynômes orthogonaux associés sont ceux de Legendre :

$$\begin{array}{ll}
P_0(x) = 1 & \langle P_0, P_0\rangle \quad = 2 \\
P_1(x) = x & \langle P_1, P_1\rangle \quad = \dfrac{2}{3} \\
P_2(x) = \dfrac{3}{2}(x^2 - \dfrac{1}{2}) & \langle P_2, P_2\rangle \quad = \dfrac{2}{5} \\
P_3(x) = \dfrac{5}{2}(x^3 - \dfrac{3}{5}x) & \langle P_3, P_3\rangle \quad = \dfrac{2}{7}
\end{array}$$

On calcule

$$\begin{aligned}
\langle f, P_0\rangle &= \int_{-1}^{1} \exp(x)dx = \exp(1) - \frac{1}{\exp(1)} \\
\langle f, P_1\rangle &= \int_{-1}^{1} \exp(x)xdx = \frac{2}{\exp(1)} \\
\langle f, P_2\rangle &= \int_{-1}^{1} \exp(x)\frac{3}{2}(x^2 - \frac{1}{2})dx = \exp(1) - \frac{7}{\exp(1)} \\
\langle f, P_3\rangle &= \int_{-1}^{1} \exp(x)\frac{5}{2}(x^3 - \frac{3}{5}x)dx = -5\exp(1) - \frac{37}{\exp(1)}
\end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
d_0^* &= \frac{\langle f, P_0\rangle}{\langle P_0, P_0\rangle} = 1.175201194 \\
d_1^* &= \frac{\langle f, P_1\rangle}{\langle P_0, P_0\rangle} = 1.103638324 \\
d_2^* &= \frac{\langle f, P_2\rangle}{\langle P_0, P_0\rangle} = 0.3578143506 \\
d_3^* &= \frac{\langle f, P_3\rangle}{\langle P_0, P_0\rangle} = 0.7045563367
\end{aligned}$$

1.4 Polynômes Orthogonaux

On considère un intervalle $[a, b]$ et une *fonction de pondération* $w(x)$ (weight function) définie au moins sur l'ouvert $]a, b[$ et à valeurs positives

$$\forall x \in]a, b[, \quad w(x) > 0$$

Étant donné 2 fonctions g et h définies sur $[a, b]$ (et suffisamment régulières) on définit leur *produit scalaire* par

$$\langle g, h\rangle = \int_a^b g(x)h(x)w(x)dx$$

a) Pour certaines applications on peut considérer plutôt une version discrète de cette définition (pour éviter les quadratures)

$$\langle g, h\rangle = \sum_{n=1}^{N} g(x_n)h(x_n)w(x_n)$$

où $x_1, x_2, \ldots, x_n$ sont choisis en avance. Ce qui suit s'applique également à ce cas au changement de notation près.

b) Le rôle de $w(x)$ apparaît dans la section sur Approximation par Moindres Carrés.

On rappelle que le produit scalaire est une *forme bilinéaire symétrique* :

— forme : application d'un espace vectoriel $\to \mathbb{R}$;

— bilinéaire : linéaire par rapport à g :

$$\forall g_1, g_2, h, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \langle \alpha g_1 + \beta g_2, h\rangle = \alpha\langle g_1, h\rangle + \beta\langle g_2, h\rangle$$

et linéaire par rapport à h :

$$\forall g, h_1, h_2, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \langle g, \alpha h_1 + \beta h_2\rangle = \alpha\langle g, h_1\rangle + \beta\langle g, h_2\rangle$$

Ceci nous permet de définir une norme :

$$\|g\| = \sqrt{\langle g, g\rangle} = \sqrt{\int_a^b g^2(x)w(x)dx}$$

qui satisfait les conditions suivants :

i) $\forall g \in \mathcal{F}$ $\|g\| \geq 0$ et $\|g\| = 0 \Rightarrow g = 0$;

ii) $\forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall g \in \mathcal{F}$ on a $\|\alpha g\| = |\alpha|\|g\|$;

iii) $\forall g, h \in \mathcal{F}$ on a $\|g+h\| \leq \|g\| + \|h\|$;

où $\mathcal{F}$ est un espace fonctionnel adéquat.

Définition 11. *Deux fonctions g et h sont dites* orthogonales *(au sens de ce produit scalaire) lorsque $\langle g, h \rangle = 0$.*

Exemple On prend $g(x) = 1$, $h(x) = x$, $a = -1$, $b = 1$ et trouve

$$\langle g, h \rangle = \int_a^b g(x)h(x)dx = 0$$

$$\langle g, h \rangle = \sum_{i=-10}^{10} g(i)h(i)dx = 0$$

$$\langle g, h \rangle = \int_a^b \frac{g(x)h(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = 0$$

On s'intéresse plus particulièrement aux suites (finies ou infinies) *de polynômes orthogonaux* $P_0(x), P_1(x), \ldots, P_i(x), \ldots$ telles que $P_i(x)$ est de degré i (exactement) et P_i est orthogonal à P_j quel que soit $j \neq i$:

$$P_i(x) = \alpha_i x^i + (\text{polynôme de degré} < i),\ \alpha_i \neq 0, \text{ et } \quad \forall j \neq i, \langle P_i, P_j \rangle = 0$$

Remarque 12. *Quel que soit k, $\{P_0, \ldots, P_k\}$ forment une famille libre :*

$$d_0 P_0 + d_1 P_1 \cdots + d_k P_k = 0 \quad \Rightarrow \quad d_0 = d_1 = \cdots = d_k = 0$$

Remarque 13. *Si p est un polynôme de degré $\leq k$, alors p_k peut s'écrire :*

$$p(x) = d_0 P_0(x) + d_1 P_1(x) + \cdots + d_k P_k(x)$$

où les coefficients $d_0, d_1, \ldots, d_k$ sont uniques.

Démonstration. Récurrence sur k. □

Ceci signifie que $\{P_0, P_1, \ldots, P_k\}$ forment une famille génératrice des polynôme de degré $\leq k$, alors $\{P_0, P_1, \ldots, P_k\}$ est une base.

Remarque 14. *Si p est un polynôme de degré $< k$, alors p est orthogonal à P_k :*

Démonstration.

$$p = d_0 P_0 + \ldots, d_r P_r, \quad r < k, \quad \Rightarrow \quad \langle p, P_k \rangle = \sum_{i=0}^{r} d_i \langle P_i, P_k \rangle = 0$$

□

Remarque 15. *(On suppose ici que le produit scalaire est défini au moyen de l'intégrale et non par la somme discrète.) Le polynôme P_k a exactement k zéros simples ; ces zéros appartiennent tous à l'intervalle $[a, b]$. Ceci implique que $P_k(x)$ est de la forme :*

$$P_k(x) = \alpha_k(x - \xi_{1,k})(x - \xi_{2,k}) \dots (x - \xi_{k,k})$$

où $\xi_{1,k}, \xi_{2,k}, \dots, \xi_{k,k} \in [a, b]$ et sont distincts.

Démonstration. On suppose $k > 0$, car $k = 0$ est trivial. Soient $\xi_{1,k}, \xi_{2,k}, \dots, \xi_{r,k}$ les points de $[a, b]$ où $P_k(x)$ change de signe. Montrons que $r \geq k$. Par l'absurde. Supposons $r < k$. Soit $\bar{x} \in [\max_i \xi_{i,k}, b]$. Posons

$$p(x) = P_k(\bar{x})(x - \xi_{1,k})(x - \xi_{2,k}) \dots (x - \xi_{r,k})$$

p et P_k changent de signe aux mêmes points sur $[a, b]$ et ont le même signe pour $x > \bar{x}$. Alors, p et P_k ont le même signe sur $[a, b]$. Mais d'après Remarque 14, $\langle p, P_k \rangle = 0$ car p de degré $< k$. C'est une contradiction car $x \in [a, b]$ et $x \neq \xi_{i,k} \Rightarrow p(x)P_k(x)w(x) > 0$. L'hypothèse $r < k$ est rejetée : $r \geq k$. On conclut que $r = k$. □

Remarque 16. *Si $\{P_0, P_1, \dots, P_k\}$ sont des polynômes orthogonaux, aussi $\{\alpha_0 P_0, \alpha_1 P_1, \dots \alpha_k P_k\}$ des polynômes orthogonales avec $\alpha_0, \dots \alpha_k \in \mathbb{R}$.*

Remarque 17. *Les polynômes orthogonaux $\{P_0, P_1, \dots P_k\}$ avec $P_i = \alpha_i x^i \dots$ satisfont la relation de récurrence à 3 termes suivantes :*

$$P_{i+1}(x) = A_i(x - B_i)P_i(x) - C_i P_{i-1}(x) \quad i = 0, 1, \dots k - 1$$

où

$$\begin{aligned} A_i &= \frac{\alpha_{i+1}}{\alpha_i} \quad \forall i \\ P_{-1} &= 0 \textit{ par convention} \\ S_i &= \langle P_i, P_i \rangle \\ B_i &= \frac{\langle xP_i, P_i \rangle}{S_i} \\ C_i &= \frac{A_i S_i}{A_{i-1} S_{i-1}} \end{aligned}$$

Démonstration. Par récurrence. Supposons que la suite des polynômes soit construite jusqu'au rang i, cad. qu'on suppose connus $P_0, P_1, \dots, P_i$ satisfaisant toutes les conditions d'orthogonalité. Peut on alors régler les coefficients A_i, B_i, C_i de telle sort que le polynôme

$$P_{i+1}(x) = A_i(x - B_i)P_i(x) - C_i P_{i-1}(x)$$

répond à la question ? Par simple comparaison des termes en x^{i+1} de part et d'autre, on voit qu'il faut prendre

$$A_i = \frac{\alpha_{i+1}}{\alpha_i}$$

D'autre part on veut que $\langle P_{i+1}, P_j \rangle = 0$ pour $j = 0, 1, \ldots, i$. On examine séparément les cas $j = i$ et $j = i - 1$ d'abord.

Le cas $i = j$:

$$\langle P_{i+1}, P_i \rangle = A_i(\langle xP_i, P_i \rangle - B_i \underbrace{\langle P_i, P_i \rangle}_{=S_i}) - C_i \underbrace{\langle P_{i-1}, P_i \rangle}_{=0}$$

ce qui donne :

$$B_i = \frac{\langle xP_i, P_i \rangle}{S_i}$$

Le cas $j = i - 1$:

$$\begin{aligned} \langle P_{i+1}, P_{i-1} \rangle &= A_i(\langle (x - B_i)P_i, P_{i-1} \rangle - C_i \langle P_{i-1}, P_{i-1} \rangle \\ &= A_i(\langle P_i, (x - B_i)P_{i-1} \rangle - C_i \langle P_{i-1}, P_{i-1} \rangle \\ &= A_i(\langle P_i, xP_{i-1} \rangle - C_i \langle P_{i-1}, P_{i-1} \rangle \end{aligned}$$

ce qui donne :

$$C_i = \frac{A_i}{S_{i-1}} \langle P_i, xP_{i-1} \rangle$$

Mais

$$xP_{i-1} = \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} P_i + \gamma_0 P_0 + \gamma_1 P_1 + \ldots \gamma_{i-1} P_{i-1}$$

et

$$\langle xP_{i-1}, P_i \rangle = \frac{\alpha_{i-1}}{\alpha_i} \langle P_i, P_i \rangle = \frac{S_i}{A_{i-1}}$$

soit finalement

$$C_i = \frac{A_i S_i}{A_{i-1} S_{i-1}} \,.$$

Maintenant pour $j < i - 1$

$$\langle P_{i+1}, P_j \rangle = A_i \underbrace{\langle P_i, (x - B_i)P_j \rangle}_{=0} - C_i \underbrace{\langle P_{i-1}, P_j \rangle}_{=0} = 0$$

ce qui termine la démonstration. $\square$

Application

a) Polynômes de Legendre : $\langle g, h \rangle = \int_{-1}^{1} g(x)h(x)dx$

$$P_{k+1}(x) = \frac{(2k+1)xP_k(x) - kP_{k-1}(x)}{k+1}$$

b) Polynômes de Chebychev : $\langle g, h \rangle = \int_{-1}^{1} \frac{g(x)h(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$

$$T_{k+1}(x) = 2T_k(x) - T_{k-1}(x) \quad \text{ou} \quad T_k(\cos(\theta)) = \cos(k\theta)$$

Chapitre 2

Différentiation et Intégration Numérique

2.1 Considérations Générales

Étant donné une fonction régulière (au moins $C^1([a,b])$) on cherche à approcher

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx, \quad D(f) = f'(a) \quad \text{ou} \quad S_n(f) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin nxdx$$

D'une manière général on cherche une approximation de $\mathcal{L}(f)$ où $\mathcal{L}$ est un opérateur linéaire ($\forall \alpha, \beta$, $\forall g, h$ $\mathcal{L}(\alpha g + \beta h) = \alpha\mathcal{L}(g) + \beta\mathcal{L}(h)$. On envisage d'avoir recours à une approximation soit parce que f est une fonction compliquée (à évaluer, à intégrer, à dériver, ...) soit parce qu'une tabulation de f ($x_i, i = 0, 1, 2 \dots$) est la seule information commun.

Définition 18. *Soient $\mathcal{L}$ un opérateur linéaire et $\mathcal{L}_h$ un autre opérateur linéaire qui dépend d'une paramètre $h \in \mathbb{R}$, $h \geq 0$.*

— *L'opérateur $\mathcal{L}_h$ s'appelle* l'approximation consistante *de $\mathcal{L}$ si*

$$E_h := \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}_h(f) \to 0 \quad si \quad h \to 0$$

indépendamment de f.

— *L'opérateur $\mathcal{L}_h$ s'appelle* l'approximation de ordre k, $k > 0$, *de $\mathcal{L}$ si*

$$E_h := \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}_h(f) = O(h^k)$$

indépendamment de f.

En général, pour trouver une approximation $\mathcal{L}_h$, on approche f par le polynôme d'interpolation de Lagrange p basé sur les points $\{x_i\}, i = 0, 1, 2, \ldots, n$

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x) \quad L_i(x) = \prod_{i=0, j \neq i}^{n} \frac{(x - x_j)}{x_i - x_j}$$

et

$$f(x) = p(x) + e(x) \text{ et si } f \in C^{n+1}([a,b]) :$$
$$\forall x \in [a,b], \exists \xi \in [a,b], e(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

On se propose alors de prendre $\mathcal{L}(p)$ comme approximation $\mathcal{L}_h(f)$ de $\mathcal{L}(f)$ où $h = \min_{i=1,\ldots,n} x_{i+1} - x_i$.

Remarque 19. *Par suite de la* linéarité de $\mathcal{L}$ *:*

1. $$\mathcal{L}(f) = \mathcal{L}(p) + \mathcal{L}(e) \qquad \textit{donc :} \qquad E := \mathcal{L}(f) - \mathcal{L}(p) = \mathcal{L}(e)$$
   L'erreur entre $\mathcal{L}(f)$ et son approximation $\mathcal{L}(p)$ est $\mathcal{L}(e)$
2. $$\mathcal{L}(p) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\mathcal{L}(L_i)}_{=w_i} = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$
   Les coefficients pondérateurs $\{w_i\}$ ne dépendent pas de f. Donc : La règle de différentiation, d'intégration, ..., s'établit une fois pour toutes lors que les points d'interpolation sont choisis.
   En plus, si on a
   $$\mathcal{L}_h(f) = \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i)$$
   avec $w_i, 0 \leq i \leq n$ donnée, on peut utiliser la formule de Taylor-Lagrange pour vérifie
   $$\mathcal{L}_h(f) - \mathcal{L}(f) = O(h^k).$$
   De la même manière on peut utiliser l'équation
   $$\mathcal{L}_h(f) - \mathcal{L}(f) = O(h^k)$$
   pour trouver les coefficients pondérateurs qui font que $\mathcal{L}_h$ est une approximation de ordre k.

2.2 Différentiation Numérique

2.2.1 Example

Soit $\mathcal{L}(u) = u'(a)$. Trouve $\mathcal{L}_h$ une approximation consistante qui est basée sur les valeurs $u(a+h)$ et $u(a)$.

1. On utilise le polynôme d'interpolation de Lagrange pour trouver $\mathcal{L}_h$:
   Le polynôme d'interpolation pour $x_0 = x$, $x_1 = x + h$

   $$p(x) = u[x_0] + u[x_0, x_1](x - x_0) = u(a) + \frac{u(a+h) - u(a)}{h}(x - a)$$

   alors

   $$p'(x) = u[a, a+h] = \frac{u(a+h) - u(x)}{h}$$

   et

   $$u'(a) = \frac{u(a+h) - u(x)}{h} + E_1(a)$$

   avec

   $$E_1(a) = E_1(x_0) = \prod_{i=0, i\neq 1}^{1} (x_0 - x_i)\frac{u''(\xi)}{2} = -\frac{h}{2}u''(\xi).$$

2. On utilise Taylor-Lagrange pour trouver $\mathcal{L}_h$:

   $$L_h(u) = w_0 u(a) + w_1 u(a+h)$$

   et

   $$u(a+h) = u(a) + u'(a)h + u''(\xi)\frac{h^2}{2}, \quad \xi \in]a, a+h[,$$

   alors

   $$\begin{aligned} L(u) - L_h(u) &= u'(a) - w_0 u(a) - w_1 u(a+h) \\ &= u'(a) - w_0 u(a) - w_1 \left(u(a) - u'(a)h - u''(\xi)\frac{h^2}{2} \right). \end{aligned}$$

   Ça donne les conditions suivantes :

   $$\begin{aligned} w_0 + w_1 &= 0 \\ 1 - w_1 h &= 0 \end{aligned}$$

   qui donne $w_0 = -\frac{1}{h}$ et $w_1 = \frac{1}{h}$

3. On vérifie avec Taylor-Lagrange, que $\mathcal{L}_h(u) = \frac{u(a+h)-u(a)}{h}$ est une approximation consistant de $\mathcal{L}(u)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(u) - \mathcal{L}_h(u) &= u'(a) - \frac{u(a+h)-u(a)}{h} \\
&= u'(a) - \frac{u(a) + u'(a)h + u''(\xi)\frac{h}{2} - u(a)}{h} = O(h)
\end{aligned}$$

2.2.2 Cas Général du Polynôme d'Interpolation de Lagrange

$$f(x) = p(x) + e(x) \quad \Rightarrow \quad f'(x) = p'(x) + e'(x)$$

NB : Soient précaution sur la régularité de f ($f \in C^2([a,b])$ ou $f \in C^3([a,b])$) le processus de différentiation numérique est instable :

$$e(x) \text{ petit} \nRightarrow e'(x) \text{ petit}$$

surtout si les données sont bruitées.

Néanmoins supposons que $f \in C^{n+2}([a,b])$ et dérivons l'expression

$$e(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

dans laquelle on considère ξ comme une fonction régulière de x. $e(x)$ est le produit de $n+1$ facteurs. Ceci donne :

$$E(x) = e'(x) = \left(\sum_{j=0}^{m}\prod_{i=1, i\neq j}^{n}(x - x_i)\right)\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} + \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\frac{f^{(n+2)}(\xi)}{(n+1)!}\frac{d\xi}{dx}$$

Évaluons cette formule en un point d'interpolation x_k :

$$E(x_k) = \left(\prod_{i=0, i\neq k}^{n}(x - x_i)\right)\frac{f^{(n+1)}(\xi_k)}{(n+1)!} + 0$$

Rappelons que $E(x_k) = f'(x_k) - p'(x_k)$ c'est a dire l'erreur commise dans l'approximation de la dérivée de f au point d'interpolation x_k par la dérivée du polynôme associé de Lagrange en ce point.

2.2.3 Diverses formules et leurs erreurs

Dérivée première

a) *Deux points* $x_0 = a$, $x_1 = a + h$ et $n = 1$:
Le polynôme d'interpolation

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) = f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x - a)$$

alors

$$p'(x) = f[a, a+h] = \frac{f(a+h) - f(x)}{h}$$

et

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

avec

$$E_1(a) = E_1(x_0) = \prod_{i=0, i\neq 1}^{1} (x_0 - x_i)\frac{f''(\xi)}{2} = -\frac{h}{2}f''(\xi)$$

On dit que la formule est précise au 1er ordre.

b) *Trois points* $x_0 = a$, $x_1 = a + h$ $x_2 = a + 2h$ et $n = 2$:
Le polynôme d'interpolation

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

Les différences divisées :

x_i	$f[x_i]$	$f[\,,\,]$	$f[\,,\,,\,]$
a	$f(a)$	$\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	$\frac{f(a+2h)-2f(a+h)+f(a)}{2h^2}$
$a+h$	$f(a+h)$	$\frac{f(a+2h)-f(a+h)}{h}$	
$a+2h$	$f(a+2h)$		

Alors

$$\begin{aligned} p(x) =& f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x - a) \\ &+ \frac{f(a+2h) - 2f(a+h) + f(a)}{2h^2}(x - a)(x - a - h) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} p'(a) =& \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + \frac{f(a+2h) - 2f(a+h) + f(a)}{2h^2}(-h) \\ =& \frac{-3f(a) + 4f(a+h) - f(a+h)}{2h} \end{aligned}$$

D'où

$$f'(a) = \frac{-3f(a) + 4f(a+h) - f(a+2h)}{2h} + E_2(a)$$

avec

$$E_2(a) = \prod_{i=0;i\neq 0}^{2} (x_0 - x_i)\frac{f'''(\xi)}{3!} = \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

On dit que la formule est précise au seconde ordre lorsque $h \to 0$.

c) Trois points, formule centrée : $x_0 = a - h$, $x_1 = a$, $x_2 = a + h$: Le polynôme d'interpolation

$$p(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

Les différences divisée :

x_i	$f[x_i]$	$f[\,,\,]$	$f[\,,\,,\,]$
$a-h$	$f(a-h)$	$\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$	$\frac{f(a+h)-2f(a+h)+f(a-h)}{2h^2}$
a	$f(a)$	$\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	
$a+2$	$f(a+h)$		

Alors

$$\begin{aligned} p(x) = & f(a) + \frac{f(a) - f(a-h)}{h}(x - a) \\ & + \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^2}(x-a)(x-a-h) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} p'(x) = & \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^2}(-h) \\ = & \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \end{aligned}$$

D'où

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} + E_2^c(a)$$

avec

$$E_2^c(a) = \prod_{i=0;i\neq 1}^{2} (x_0 - x_i)\frac{f'''(\xi)}{3!} = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$

Observe la symétrie de la formule. (2 valeurs seulement sont utilisées). La formule est encore précise au seconde ordre lorsque $h \to 0$, mais le coefficient est moindre.

En comparant avec la formule dissymétrique à 2 points on constate que la precision augmente lorsqu'on utilise une "formule symétrique" ou "centrée".

Dérivée seconde trois points, x_0, x_1, x_2

$$\begin{aligned} f(x) &= P_2(x) + e(x) \\ f''(x) &= P_2''(x) + e''(x) \\ P_2(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) \\ P_2''(x) &= 2f[x_0, x_1, x_2] \end{aligned}$$

1. formule décentrée : $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = a + 2h$

$$\boxed{f''(a) = P_2''(a) + e''(a) = \frac{f(a) - 2f(a+h) + f(a+2h)}{h^2} + E_1}$$

avec

$$e(x) = (x-a)(x-a-h)(x-a-2h)\frac{f'''(\xi(x))}{6}$$

alors

$$e'(x) = ((x-a-h)(x-a-2h) + (x-a)(x-a-2h) + (x-a)(x-a-h))\frac{f'''(\xi(x))}{6} + \\ (x-a)(x-a-h)(x-a-2h)\frac{f^4(\xi(x))}{6}\frac{d\xi(x)}{dx}$$

et

$$e''(x) = ((x-a-h) + (x-a-2h) + (x-a) + (x-a-2h) + (x-a) + (x-a-h))\frac{f'''(\xi(x))}{6} + \\ ((x-a-h)(x-a-2h) + (x-a)(x-a-2h) + (x-a)(x-a-h))\frac{f^4(\xi(x))}{6}\frac{d\xi(x)}{dx} \\ (x-a)(x-a-h)(x-a-2h)\frac{f^5(\xi(x))}{6}\frac{d^2\xi(x)}{dx^2}$$

qui donne

$$E_1 = e''(a) = -hf'''(\xi) + \frac{2}{3}h^2 f^{(4)}(\xi)\frac{d\xi(a)}{dx}$$

La formule est une approximation consistante de première ordre.

2. formule centrée $x_0 = a - h$, $x_1 = a$, $x_2 = a + h$

$$f''(a) = Q_2''(a) + E_2 = \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)}{h^2} + E_2$$

L'évaluation direct de l'erreur via Taylor-Lagrange

$$\begin{aligned} f(a+h) &= f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2}f''(a) + \frac{h^3}{6}f'''(a) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\alpha) \\ f(a-h) &= f(a) - hf'(a) + \frac{h^2}{2}f''(a) - \frac{h^3}{6}f'''(a) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\beta) \end{aligned}$$

donne

$$\frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a+h)}{h^2} = f''(a) + \frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\alpha) + f^{(4)}(\beta)).$$

La formule est une approximation consistante de ordre deux.

On observe de nouveau que l'usage d'une formule symétrique ou centrée augmente l'ordre de précision de 1.

2.2.4 Erreur de discrétisation, Précision, Erreur arrondi

Les formules obtenues jusqu'ici sont de la forme

$$D(f) = D(P_k) + const.\, h^r f^{r+1}(\xi)$$

où D est l'opérateur de dérivation h est le support d'interpolation et ξ un point intermédiaire. Dans ce cas le terme $consth^r f^{(r+1)}(\xi)$ est appelé *erreur de discrétisation* et la formule est dite *précise à l'ordre* r.

L'erreur de discrétisation est d'autant petite que h est petit.

En pratique, à cette erreur s'ajoute l'erreur d'arrondi qui est l'erreur que l'on commet en évaluant la formule, c'est à dire le terme $D(P_k)$, par arithmétique tronquée.

À contrario, l'erreur d'arrondi croît lorsque h décroit. Il existe donc un h optimal d'autant plus petit que les calculs arithmétiques sont effectuées de manière précise.

Example

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$$
$$f'_{calc}(a) = \frac{f(a+h) + \varepsilon^+ - f(a-h) - \varepsilon^-}{2h}$$

alors

$$\underbrace{f'_{calc}(a)}_{\text{valeur calculée}} = \underbrace{f'(a)}_{\text{valeur exacte}} + \underbrace{\frac{h^2}{6} f'''(\xi)}_{O(h)} + \underbrace{\frac{\varepsilon^+ - \varepsilon^-}{2h}}_{O(h^{-1})}$$

2.3 Intégration Numérique

2.3.1 Formules de base

Interpolation de f :

$$f(x) = P_n(x) + e(x)\,, \quad e(x) = \underbrace{\Pi_{i=0}^{n}(x - x_i)}_{=\omega} \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

alors

$$\int_a^b f(x)dx = I(f) = I(P_n) + E = \int_a^b P_n(x)dx + \int_a^b e(x)dx\,.$$

Formule de rectangle

$n = 0$, $x_0 = a$ et $P_0(x) = f(a)$ donne :

$$\boxed{I(f) = (b-a)f(a) + E_0, \quad E_0 = f'(c)\frac{(b-a)^2}{2}, \quad a < c < b}$$

car

$$I(P_0) = \int_a^b f(a)dx = (b-a)f(a)$$
$$e(x) = (x - x_0)f'(\xi(x)) = (x-a)f'(\xi(x))$$
$$E_0 = \int_a^b f'(\xi(x))(x-a)dx \overset{*}{=} f'(c)\int_a^b (x-a)dx = f'(c)\frac{(b-a)^2}{2}$$

$*$ théorème des accroissements finis comme $x - a > 0$

Règle du point central

$n = 0$, $x_0 = \frac{a+b}{2}$ et $P_0(x) = f(\frac{a+b}{2})$ donne :

$$\boxed{I(f) = (b-a)f(\frac{a+b}{2}) + \widetilde{E}_0, \quad \widetilde{E}_0 = f''(c)\frac{(b-a)^3}{24}, \quad a < c < b}$$

car

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + f''(\eta)\frac{(x-x_0)^2}{2}$$
$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(x_0) + f'(x_0)\underbrace{\int_a^b (x-x_0)dx}_{=0} + \underbrace{\int_a^b \frac{f''(\eta)}{2}(x-x_0)^2}_{=\widetilde{E}_0=\frac{f''(c)}{24}(b-a)^3}.$$

Le preuve standard donne seulement

$$I(f) = (b-a)f(\frac{a+b}{2}) + (f'(c_1) + f'(c_2))\frac{(b-a)^2}{8}$$

car

$$\begin{aligned}
\widetilde{E}_0 &= \int_a^b f'(\xi(x))(x-x_0)dx \\
&= f'(c_2)\int_{x_0}^b (x-x_0)dx - f'(c_1)\int_a^{x_0} (x_0-x)dx \\
&= (f'(c_2) - f'(c_1))\frac{(b-a)^2}{8}
\end{aligned}$$

A nouveaux on constante pour le nombre de points d'interpolation égal la formule symétrique est plus précise.

Règle de trapèze

$n = 1$, $x_0 = a$, $x_1 = b$ et $P_1(x) = f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)$ donne :

$$\boxed{I(f) = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} + E_1, \quad E_0 = -f''(c)\frac{(b-a)^3}{12}, \quad a < c < b}$$

car

$$\begin{aligned}
I(P_1) &= (b-a)f(a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{(b-a)^2}{2} \\
&= (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2} \\
e(x) &= \underbrace{(x-a)(x-b)}_{\leq 0}\frac{f''(\xi(x))}{2} \\
E_0 &= \int_a^b (x-a)(x-b)\frac{f''(\xi(x))}{2}dx \overset{*}{=} -f''(c)\frac{(x-a)^3}{12}
\end{aligned}$$

$*$ théorème des accroissements finis comme

Formule de Simpson

$n = 0$, $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$ donne :

$$\boxed{\begin{aligned}
I(f) &= \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)) + E_2 \\
E_2 &= -\frac{f^{(4)}(c)}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5, \quad a < c < b
\end{aligned}}$$

On introduit $X = x - \mu$, $\mu = \frac{a+b}{2}$, $h = b - a$

$$\begin{aligned}
P_2(x) &= f(a) + f[a,b](X + \frac{h}{2}) + f[a,b,\mu](X^2 - \frac{h^2}{4}) \\
I(P_2) &= \int_a^b P_2(x) = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} P_2(x)dX \\
&= f(a)h + f[a,b]\left(\frac{x^2}{2} + \frac{h}{2}x\right)_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} + f[a,b,\mu]\left(\frac{x^3}{3} - \frac{h^2}{4}x\right)_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}}. \\
&= f(a)h + f[a,b]\frac{h^2}{2} + f[a,b,\mu]\left(\frac{2}{3}\frac{h^3}{8} - \frac{h^3}{4}\right) \\
&= f(a)h + \frac{f(b)-f(a)}{h}\frac{h^2}{2} + \frac{f(b) - 2f(\mu) + f(a)}{2(\frac{h}{2})^2}\left(-\frac{h^3}{8}\right) \\
&= \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))
\end{aligned}$$

Comme

$$\int_a^b (x-a)(x-b)(x-\mu)dx = \int_{-\frac{h}{2}}^{\frac{h}{2}} (X^2 - \frac{h^2}{4})XdX = 0$$

on trouve pour

$$I(P_2) = \int_a^b P_2(x) + f[a,b,\mu,\mu](x-a)(x-b)(x-\mu)dx$$

et alors

$$\begin{aligned} E_2(x) &= \int_a^b \frac{f^{(4)}(\xi)}{24}(x-a)(x-b)(x-\mu)^2 dx \\ &= -\frac{f^{(4)}(\xi)}{2880}(b-a)^5 \end{aligned}$$

2.3.2 Formules d'intégration composées

Les formules de base ne sont précis que si $b-a$ est petit. Il faut donc en général subdiviser l'intervalle

$$a < x_0 < x_1 < x_2 \cdots < x_N = b$$

et sommer

$$I = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx}_{\text{formule de base}}$$

Si E_i est l'erreur commise sur $\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$ alors l'erreur commise sur I sera

$$E = \sum_{i=1}^{N} E_i$$

On prendre plus précisément.

$$x_i = a + ih\,, \quad h = \frac{b-a}{N}$$

et on posera

$$f_i = f(x_i)$$

Règle composée du rectangle

$$I(f) = h\sum_{i=1}^{N} f_{i-1} + E, \quad E = \frac{b-a}{2} f'(\xi)h$$

La formule de base donne :

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = (x_i - x_{i-1})f(x_{i-1}) + E_i = hf(x_{i-1}) + \frac{h^2}{2} f'(\eta_i)$$

Alors

$$N \min_{x\in[a,b]} f'(x) \leq \sum_{i=1}^{N} f'(\eta_i) \leq N \max_{x\in[a,b]} f'(x)$$

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

$$\frac{\sum_{i=1}^{N} f'(\eta_i)}{N} = f'(\eta)\,.$$

La formule est donc consistante au 1er ordre en h. En sommant les erreurs l'ordre de précision diminue de 1.

Règle composée du point central

$$I(f) = h\sum_{i=1}^{N} f_{i-1/2} + E, \quad E = \frac{b-a}{24} f''(\xi)h^2$$

Règle composée du trapèze

$$I(f) = h\sum_{i=1}^{N-1} f_i + \frac{h}{2}(f_0 + f_N) + E, \quad E = -\frac{b-a}{12} f''(\xi)h^2$$

Règle composée du Simpson

$$I(f) = \frac{h}{6}\left(f_0 + 2\sum_{i=1}^{N-1} f_i + f_N + 4\sum_{i=1}^{N} f_{i-1/2}\right) + E,$$
$$E = -\frac{b-a}{2880} f^{(4)}(\xi) h^4$$

Remarque importante

Une manière d'évaluer l'ordre de précision d'une formule consiste à déterminer l'ensemble $\mathcal{P}$ des polynômes tels que la formule est exacte dès lorsque $f \in \mathcal{P}$. Il apparait donc intéressant de chercher des règles d'intégration qui pour un nombre de points d'évaluation de f donné maximise le degré possible des polynômes pour lesquels la formule est exacte. Cette recherche est effectué dans la section suivantes.

2.3.3 Réglés d'intégration de Gauss

On va démontrer qu'il y a $k+1$ coefficients de pondération $w_0, \ldots, w_k$ et $k+1$ point d'évaluation $x_0, \ldots, x_k$ qui fait que

$$\int_a^b f(x)q(x)dx = \sum_{i=0}^{k} w_i f(x_i) + \frac{f^{(2k+2)}(\xi)}{(2k+2)!}\int_a^b \prod_{i=0}^{k}(x-x_i)^2 q(x)dx, \quad \xi \in]a,b[\,.$$

Si f et un polynôme de degré $2k+1$, on a besoin de seulement $k+1$ évaluation de f pour calculer le valeur $\int_a^b f(x)dx$. Les formules d'intégration numérique qui sont base sur le polynôme d'interpolation de Lagrange, comme la formule de trapèze ou la formule de Simpson, ont besoin de $2k+1$ ou $2k$ évaluation de f pour trouver le valeur exacte pour un tel f.

Un premier exemple est $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $x_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$, $w_1 = w_2 = 1$, $q(x) = 1$ dans $[-1,1]$. On vérifie que $\int_{-1}^{1} f(x)dx = f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3})$ pour toutes les polynômes de degré ≤ 3.

$$f(x) = 1 : \quad \int_{-1}^{1} 1dx = 2 = 1 + 1$$

$$f(x) = x : \quad \int_{-1}^{1} xdx = 0 = -1/\sqrt{3} + 1/\sqrt{3}$$

$$f(x) = x^2 : \quad \int_{-1}^{1} x^2dx = 2/3 = (-1/\sqrt{3})^2 + (1/\sqrt{3})^2$$

$$f(x) = x^3 : \quad \int_{-1}^{1} x^3dx = 0 = (-1/\sqrt{3})^3 + (1/\sqrt{3})^3$$

Théorème 20. *Soient $f \in C^{2k+2}$. Il existe $k+1$ coefficients de pondération $w_i > 0$, $0 \leq i \leq k$ et $k+1$, point d'évaluation x_i, $0 \leq i \leq k$ deux à deux distincts tel que*

$$\int_a^b f(x)q(x)dx = \sum_{i=0}^{k} w_i f(x_i) + \frac{f^{(2k+2)}(\xi)}{(2k+2)!} \int_a^b \prod_{i=0}^{k} (x - x_i)^2 q(x)dx,$$

avec $\quad \xi \in]a, b[$.

Démonstration. On donne cette preuve en deux étapes.

a) Supposons que f est une polynôme de degré $\leq 2k+1$:
Il est possible (regarde la fin du chapitre I) de construire un suite de polynôme $p_0(x), \ldots, p_n(x)$ tel que le degré de p_i est $\leq i$ et

$$\int_a^b p_i(x)p_j(x)q(x)dx = \begin{cases} 0\,, & i \neq j \\ 1\,, & i = j \end{cases}$$

On prends comme les point d'évaluation x_i, $0 \leq i \leq k$ les racines du polynôme $p_{k+1}(x)$ de cet suite. Le polynôme d'interpolation de Lagrange de f est

$$P_k(x) = \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \prod_{j=0, i\neq j}^{k} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

L'erreur $e(x) = f(x) - P_k(x)$ est un polynôme de degré $\leq 2k+1$ qui s'annule dans $x = x_0, \ldots, x_k$ et $e(x)$, alors il y un polynôme $r(x)$ de degré $\leq k$ tel que

$$e(x) = p_{k+1}(x)r(x)\,.$$

Comme p_{k+1} est orthogonal avec tous les polynômes de degré $\leq k$ on trouve

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)q(x)dx &= \int_a^b P_k(x)q(x)dx + \underbrace{\int_a^b p_{k+1}(x)r(x)q(x)dx}_{=0} \\
&= \int_a^b P_k(x)q(x)dx \\
&= \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \underbrace{\int_a^b \prod_{j=0, j\neq i}^{k} \frac{x-x_j}{x_i-x_j} q(x)dx}_{:=w_i} \\
&= \sum_{i=0}^{k} w_i f(x_i)
\end{aligned}$$

b) Dans le cas général on prend x_i, $0 \leq i \leq k$ et w_i, $0 \leq i \leq k$ comme dans **a)** et on introduit le polynôme d'interpolation de Lagrange-Hermite $F(x)$ avec $f(x_i) = F(x_i)$ et $f'(x_i) = F'(x_i)$. Alors, d'après **a)**

$$\int_a^b F(x)q(x)dx = \sum_{i=0}^{k} w_i F(x_i) = \sum_{i=0}^{k} w_i f(x_i)$$

et avec l'erreur d'interpolation

$$\begin{aligned}
E &= \int_a^b f(x)q(x)dx - \sum_{i=0}^{k} w_i f(x_i) = \int_a^b (f(x) - F(x))q(x)dx \\
&= \int_a^b \frac{f^{2k+2}(\eta(x))}{(2k+2)!} \prod_{i=0}^{k} (x-x_i)^2 q(x)dx \\
&= \frac{f^{2k+2}(\eta)}{(2k+2)!} \int_a^b \prod_{i=0}^{k} (x-x_i)^2 q(x)dx
\end{aligned}$$

□

2.3.4 Réglés d'intégration de Gauss [version Habbal/Desideri]

Les formules précédents sont applicables lorsque la fonction f est suffisamment différentiable sur $[a, b]$. Cependant il existe des pathologies faibles de f pour les quelles l'intégral existe.

Par example :

$$f(x) \approx \frac{1}{\sqrt{x-a}}, \quad \Phi(x) = \int \frac{dx}{\sqrt{x-a}} = 2\sqrt{x-a} + c$$

On général on pourra définir une fonction de pondération $w(x) \geq 0$ d'expression simple telle que

$$g(x) = \frac{f(x)}{w(x)}$$

est une fonction lisse et on écrira :

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

On est donc ramené au problème d'intégration d'une fonction lisse g par rapport à une fonction poids $w(x)$.

Méthodologie

On interpole d'abord la fonction g :

$$g(x) = p_k(x) + \frac{g^{k+1}(\xi)}{(k+1)!}\psi_k(x) \quad \text{où} \quad \psi_k(x) = \prod_{i=0}^{k}(x - x_i)$$

On intègre ensuite de a à b par rapport à x, ce qui donne :

$$\boxed{I = I(g) = I(p_k) + E, \quad E = \int_a^b \frac{g^{(k+1)}}{(k+1)!}\psi_k(x)w(x)dx}$$

Or

$$p_k(x) = \prod_{i=0}^{k} g(x_i)L_i(x) \quad \text{où} \quad L_i(x) = \frac{\prod_{j=0,j\neq i}^{k}(x - x_j)}{\prod_{j=0,j\neq i}^{k}(x_i - x_j)}$$

et

$$\begin{aligned} I(p_k) = \int_a^b p_k(x)w(x)dx &= \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{k} g(x_i)L_i(x)\right) w(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{k} \left(\int_a^b L_i(x)w(x)dx\right) g(x_i) \end{aligned}$$

D'où la règle d'interpolation :

$$I(p_k) = \sum_{i=1}^{k} A_i g(x_i) \quad \text{avec} \quad A_i = \int_a^b L_i(x) w(x) dx$$

indépendant de g et calculé une fois pour toutes.

Revenons maintenant à la forme générale de l'erreur

$$E = I(g) - I(p_k) = \int_a^b \frac{g^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} \psi_k(x) w(x) dx$$

où $\psi_k(x) = \prod_{i=0}^{k}(x - x_i)$.

g est une fonction *lisse* c'est à dire suffisamment différentiable. On suppose par la suite que $g \in C^{2k+2}([a,b])$. Pour cette raison on admettra que cette fonctions peut être approché d'aussi près que l'on veut par une polynôme judicieusement construit à condition que le degré soit suffisamment grand. Sous certaines conditions on aura dans un certains sens

$$g = \lim_{k \to \infty} p_k$$

Il est donc naturel de chercher à construire une formule d'intégration numérique qui soit exacte par les polynômes de degré aussi grand que possible. On observe immédiatement que la formule est exacte (quels soit les x_i) lorsque g est une polynôme de degré $\leq k$. En fait nous allons voit que ce résultat reste vrai pour les polynômes de degré plus élevé à condition de placer judicieusement les points d'interpolation x_i.

Pour cela, complétons la suite $x_0, x_1, \ldots x_k$ (2 à 2 distincts), par m points d'interpolation supplémentaires $x_{k+1}, \ldots x_{k+m}$. Supposons tout d'abord que $x_0, x_1, \ldots x_{k+m}$ sont 2 à 2 distincts et considérons le polynôme d'interpolation de Lagrange p_{k+m} de la function g en ces points. La forme de Newton de ce polynôme s'écrit :

$$p_{k+m}(x) = g[x_0] + g[x_0, x_1]\psi_0(x) + \ldots g[x_0, \ldots x_{k+m}]\psi_{k+m-1}(x)$$

et si l'on suppose que $g \in C^{k+m+1}([a,b])$ on a :

$$\forall x \in [a,b]. \exists \eta : g(x) = p_{k+m} + \frac{g^{k+m+1}(\eta)}{(k+m+1)!}\psi_{k+m}(x)$$

On a également

$$p_k(x) = g[x]_0 + g[x_0, x_1]\psi_0(x) + g[x_0, \ldots x_k]\psi_k(x)$$

de sorte que

$$p_{k+m}(x) = p_k(x) + g[x_0, x_1, \dots, x_{k+1}]\psi_k(x) \dots g[x_0, \dots x_{k+m}]\psi_{k+m-1}(x)$$

et

$$\begin{aligned} g(x) = p_k(x) + g[x_0, x_1, \dots, x_{k+1}]\psi_k(x) \dots g[x_0, \dots x_{k+m}]\psi_{k+m-1}(x) \\ + \frac{g^{k+m+1}(\eta)}{(k+m+1)!}\psi_{k+m}(x) \end{aligned}$$

Soit encore

$$\begin{aligned} g(x) = p_k(x) + \frac{g^{k+1}(c_1)}{(k+1)!}\psi_k(x) + \dots \frac{g^{k+m}(c_m)}{(k+m)!}\psi_{k+1}(x) \\ + \frac{g^{(k+m+1)}(\eta)}{(k+m+1)!}\psi_{k+m}(x) \end{aligned}$$

où $c_1, \dots c_m$ sont des constantes (indépendantes de x) dons les valeurs sont fixées par le choix des points d'interpolation $x_0, x_1, \dots x_{k+m}$ et η dépend de x.

Nous admettons que par continuité ce résultat reste vrai lorsque $x_0, \dots x_k$ (support du polynôme p_k) sont 2 à 2 distincts et $x_{k+1}, x_{k+2}, \dots x_{k+m}$ sont quelconques.

En multipliant la relation précédant par $w(x)$ et en intégrant de a à b par rapport à x on obtient :

$$I(g) = I(p_k) + E$$

où

$$\begin{aligned} E = & \frac{g^{(k+1)}(c_1)}{(k+1)!}\int_a^b \psi_k(x)w(x)dx + \dots + \frac{g^{k+m}(c_m)}{(k+m)!}\int_a^b \psi_{k+1}w(x)dx \\ & + \frac{g^{(k+m+1)}(\eta)}{(k+m+1)!}\int_a^b \psi_{k+m}(x)w(x)dx \end{aligned}$$

Il en résulte que

Théorème 21. *Si* $x_0, x_1 \ldots, x_{k+m}$ *(pour un certain* $m \geq 1$*) sont tels que*

$$\int_a^b \psi_k(x)(x - x_{k+1}) \ldots (x - x_{k+i})w(x)dx = 0$$

pour $i = 0, 1, \ldots m - 1$ *alors*

$$E = I(g) - I(p_k) = \int_a^b \frac{g^{(k+m+1)}(\eta)}{(k+m+1)} \psi_{k+m} w(x)dx$$

(pour une certaine fonction $\eta = \eta(x)$*)*

Le jeu va consister à choisir les points $x_0, x_1, \ldots x_{k+m}$ pour que les hypothèses de ce théorème soient satisfait avec une valeur de m aussi grande que possible.

Pour cela, on considère le produit scalaire associé à la fonction de pondération $w(x)$

$$\langle u; v \rangle = \int_a^b u(x)v(x)w(x)dx\,.$$

On a vu qu'en général on sait construite une suite $\{P_k\}$ de polynômes orthogonaux qui vérifient

$$\deg P_k = k$$

En particulier on sait que le polynôme $P_{k+1}(x)$ admet $(k+1)$ zéros distincts appartenant à $[a, b]$ (voir les remarques dans les paragraphes sure les polynômes orthogonaux). On peut donc écrire :

$$P_{k+1} = \alpha_{k+1}(x - \xi_0)(x - \xi_1) \ldots (x - x_k)$$

où $\alpha_{k+1} \neq 0$ et $\xi_0, \xi_1, \ldots \xi_k \in [a, b]$. Choisissons de prendre

$$x_0 = \xi_0, x_1 = \xi_1, \ldots x_k = \xi_k$$

de sorte que $P_{k+1}(x) = \alpha_{k+1}\psi_k(x)$.

D'autre part, le polynôme P_{k+1} est orthogonal à tout polynôme p de degré $< k+1$. Ceci s'applique en particulière aux polynômes

$$q_i(x) = \frac{(x - x_{k+1})(x - x_{k+1}) \ldots (x - x_{k+i})}{\alpha_{k+1}},\ i = 0, 1, \ldots m - 1$$

pourvu que $m-1 < k-1$, soit $m \leq k+1$. On a donc :

$$\begin{aligned} 0 &= \int_a^b P_{k+1}(x) q_i(x) w(x) dx \\ &= \int_a^b \alpha_{k+1} \psi_k \frac{(x-x_{k+1})(x-x_{k+1})\dots(x-x_{k+i})}{\alpha_{k+1}} dx \end{aligned}$$

La hypothèse du théorème précèdent sont donc satisfait lorsque $m = k+1$.

On a le choix de $x_{k+1}, \dots x_{2k+1}$. Prenons

$$x_{k+1} = \xi_0, x_{k+2} = \xi_1, \dots x_{2k+1} = \xi_k$$

alors

$$\psi_{2k+1}(x) = (x-x_0)^2 (x-x_1)^2 \dots (x-x_k)^2 = \frac{P_{k+1}^2(x)}{\alpha_{k+1}^2}$$

Comme $w(x) \geq 0$ on peut appliquer le théorème de la moyenne :

$$E = \frac{g^{(2k+2)}(\eta)}{(2k+2)!} \int_a^b \frac{P_{k+1}^2(x)}{\alpha_{k+1}^2} w(x) dx$$

La règle d'integration de Gauss utilise $k+1$ évaluations de la fonction g et elle est exacte (en particulier) si g et une polynôme de degré $\leq 2k+1$.

Chapitre 3

Équations Différentielles

3.1 Rappels

3.1.1 Equation différentielle d'ordre n, $n \in \mathbb{N}$

On dit que la fonction $y = f(x)$ est une solution de l'équation différentielle d'ordre n

$$y^{(n)} = \phi(x, y, y', \dots y^{(n-1)}) \tag{3.1}$$

dans laquelle *phi* est une fonction régulière de ses arguments, sur l'intervalle $[a, b]$, si :

a) $f \in C^n(]a, b[)$

b) $\forall x \in]a, b[$, (3.1) est vérifiée lorsque on substitue $f(x)$ à y, $f'(x)$ à $y', \dots f^{(n)}(x)$ à y^n.

3.1.2 Forme canonique

En posant

$$Y = \begin{pmatrix} y \\ y' \\ \dots \\ y^{(n-1)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

on ramène (3.1) à une équation différentielle d'ordre 1 dans laquelle l'inconnue est une application de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}^n$:

$$Y : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n, \quad Y' = \Phi(x, Y) \tag{3.2}$$

où

$$\Phi(x,Y) = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \\ \dots \\ y^{(n-1)} \\ \phi(x,y,y',\dots,y^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

Remarque 22. *Pour définir complètement un problème différentiel, il convient d'ajoindre à l'équation différentielle un* système compatible et complet de conditions *qui peuvent être :*

1. initiales

   Exemple : Équation du pendule :

$$J\theta'' + mg\sin(\theta) = 0\,, \quad \theta(0) = \theta_0, \theta'(0) = 0,$$

   Plus généralement le problème (3.1) *avec*

$$y(a) = y_a, y'(a) = y'_a, \dots y^{(n-1)}(a) = y_a^{(n-1)}$$

   ou le problème (3.2) *est appelé* problème de Cauchy*.*

2. aux limites

   Exemple :

$$y'' = \phi(x,y,y')\,, \quad y(0) = \alpha\,, y(a) = \beta$$

3.1.3 Équation différentielle linéaire homogène

Définition 23. *Équation* (3.1) *est linéaire homogène lorsque ϕ est linéaire par rapport à $y, y', \dots y^{(n-1)}$, ou de manière équivalente, équation* (3.2) *est linéaire homogène lorsque $\Phi(x,Y)$ est linéaire par rapport à Y*

$$\Phi(x,Y) = A(x)Y.$$

Cette définition n'exclut pas la possibilité que ϕ (ou Φ) dépend de x. L'équation différentielle (3.1) peut alors s'écrire sous la forme :

$$\mathcal{L}y := a_n(x)y^{(n)} + a_{n-1}(x)y^{(n-1)} + \dots a_0(x)y = 0$$

Théorème 24. *L'ensemble des solutions est un espace vectoriel de dimension n.*

Si $y_1(x), y_2(x), \dots y_n(x)$ sont n solutions indépendantes de l'équation différentielle (3.1) supposée linéaire, alors la solution générale de cette équation est de la forme :

$$y(x) = C_1 y_1(x) + C_2 y_2(x) + \dots C_n y_n(x)$$

où $C_1, C_2, \dots C_n$ sont des constantes arbitraires.

3.1.4 Équation différentielle linéaire homogène à coefficients constants

On rajoute à l'hypothèse

3.1.5 Analogie entre les équations ax differénces et les équations différentielles

3.2 Intégration numérique

Nous avons vu qu'une équation différentielle d'ordre n générale :

$$y^{(n)} = \phi(t, y, y', \dots y^{(n-1)})$$

pouvait par le changement de variable

$$Y = \begin{pmatrix} y \\ y' \\ \dots \\ y^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

se ramener à la forme canonique suivante :

$$Y' = \Phi(x, Y)$$

où

$$\Phi(t, Y) = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \\ \dots \\ y^{(n-1)} \\ \phi(t, y, y', \dots, y^{(n-1)}) \end{pmatrix}$$

c'est-à-dire à une equation différentielle du 1er ordre où cette fois-ci l'inconnu est une application $Y(t) \in \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}^n$.

On rappelle que l'on distingue alors deux types de problème :

a) *Problèmes de Cauchy* : le vecteur Y est spécifié initialement, disons en $x = x_0$; pour ces problèmes il est suffisamment général de traiter le cas $n = 1$.

b) *Problèmes aux limites* : k ($k < n$) composantes du vecteur Y sont spécifiés en $t = a$, et $n-k$ en $t = b$; ces problèmes peuvent s'approcher par des méthodes de *differences finies* ou des *méthodes de tir*.

Dans ce cours, on se limite à *l'étude des problèmes de Cauchy*. Les méthodes numériques que l'on présente s'appliquent aussi bien au cas où l'inconnue est une vecteur qu'au cas scalaire. Pour ces raisons, il est suffisamment général de traiter le cas où l'équation est du 1er ordre :

$$y' = \phi(t, y)\,, \quad y(a) = y_0$$

3.2.1 Intégration numérique par développement Taylor

On suppose que la fonction $\phi(t, y)$ est suffisamment différentiable par rapport à ses variables x et y et que la solution exacte du problème, $y(t)$, est de classe $C^{(k+1)}([a, b])$. Un développement limité à l'ordre k de la solution $y(t + h)$ autour d'une point $t \in [a, b]$ s'écrit :

$$y(t+h) = y(t) + hy'(t) + \frac{h^2}{2!}y''(t) + \dots \frac{h^k}{k!}y^{(k)}(t) + \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}y^{(k+1)}(\xi)$$

où $\xi \in]t, t + h[$. On obtient les dérivées successive de y en fonction de t en prenant les *dérivées totales* de $\phi(t, y(t))$ par rapport à t :

$$\begin{aligned}
y'(t) &= \phi(t, y(t)) \\
y''(t) &= \phi'(t, y(t)) = \partial_t\phi(t, y(t)) + \partial_y\phi(t, y(t))\phi(t, y(t)) \\
y'''(t) &= \phi''(t, y(t)) = \dots \\
&\dots
\end{aligned}$$

On cherche à faire *avancer* la solution *pas à pas*. On est conduit à introduire l'opérateur suivant :

$$T_k(t, y) := \phi(t, y) + \frac{h}{2!}\phi'(t, y) + \frac{h^2}{3!}\phi''(t, y) + \dots + \frac{h^{k-1}}{k!}\phi^{(k-1)}(t, y)$$

de sorte que pour la solution exacte on a :

$$y(t + h) = y(t) + hT_k(t, y(t)) + E_{loc}$$

où

$$E_{loc} = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi)$$

La quantité E_{loc} est appelé *erreur locale*. E_{loc} est l'erreur hypothétique qui serait commise sur y_{n+1} si l'information provenant du pas n, c'est-à-dire y_n, était exacte. Nous allons voir comment cette erreur locale s'accumule en une *erreur globale* (ou *error de troncature*, ou *erreur de discrétisation*)

$$E_{glo} := e_{n+1} = y(x_{n+1}) - y_{n+1}$$

c'est-à-dire l'écart qui existe vraiment entre la valeur exacte et la valeur calculée. En général, $E_{loc} \neq E_{glo}$, car en principe on a accumulé des erreurs aux pas précédents et $y_n \neq y(x_n)$.

Algorithme de Taylor explicite d'ordre k

1. *Initialisation* : Choisir un pas $h = \frac{b-a}{N}$. Poser $t_0 = a$, $t_n = a + nh$, $t_N = a + Nh = b$ de sorte que $y(t_0) = y(a) = y_0$.
2. *Intégration* : Calculer des approximations y_n de $y(t_n)$ en appliquant la formule de récurrence suivante :

$$y_{n+1} = y_n + hT_k(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, 3 \ldots N-1$$

On peut aussi faire le développement de $y(t)$ autour de $t+h$

$$\begin{aligned} y(t) =& y(t+h) - hy'(t) + \frac{h^2}{2!} y''(t+h) \\ &+ \ldots \frac{(-h)^k}{k!} y^{(k)}(t+h) + \frac{(-h)^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi) \end{aligned}$$

qui donne

$$y(t+h) = y(t) + hT_k^{im}(t+h, y(t+h)) - \frac{(-h)^{k+1}}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi)$$

avec

$$T_k^{im}(t,y) = \phi(t,y) - \frac{h}{2!}\phi'(t,y) + \frac{h^2}{3!}\phi''(t,y) + \cdots + \frac{(-h)^{k-1}}{k!}\phi^{(k-1)}(t,y)$$

Algorithme de Taylor implicite d'ordre k

1. *Initialisation* : Choisir un pas $h = \frac{b-a}{N}$. Poser $t_0 = a$, $t_n = a + nh$, $t_N = a + Nh = b$ de sorte que $y(t_0) = y(a) = y_0$.
2. *Intégration* : Calculer des approximations y_n de $y(x_n)$ en appliquant la formule de récurrence suivante :

$$y_{n+1} = y_n + hT_k^{im}(t_{n+1}, y_{n+1}), \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots N-1$$

Examples, $k = 1$

— Euler explicite (Taylor explicite d'ordre 1)

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(t_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots N-1$$

— Euler implicite (Taylor implicite d'ordre 1)

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(t_{n+1}, y_{n+1}) \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots N-1$$

3.2.2 Théorème de convergence

Théorème 25. *On regarde le schéma :*

$$y_{n+1} = y_n + hT(t_n, t_{n+1}, y_n, y_{n+1}), \quad n = 0, 1, 2, \dots N-1$$

avec $h = \frac{b-a}{N}$ et $t_n = a+nh$, pour l'intégration numérique du problème Cauchy

$$y' = \phi(t, y), \quad y(a) = y_0\,.$$

Si on suppose que $T(t, t+h, y(t), y(t+h))$ est tel que

$$y(t+h) = y(t) + hT(t, t+h, y(t), y(t+h)) + O(h^{k+1})$$

on trouve

$$y(t_n) - y_n = O(h^k), \quad n = 0, 1, 2, \dots N$$

Démonstration. On a

$$y(t_{n+1}) - y_{n+1} = y(t_{n+1}) - \widetilde{y}(t_{n+1}) + \widetilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1}$$

où $\widetilde{y}$ est la solution du problème Cauchy

$$\widetilde{y}' = \phi(t, \widetilde{y}), \quad \widetilde{y}(t_n) = y_n\,.$$

Alors

$$\begin{aligned}\widetilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1} =& \widetilde{y}(t_{n+1}) - y_n - T(t_n, t_{n+1}, y_n, y_{n+1})\\ =& \widetilde{y}(t_{n+1}) - \widetilde{y}(t_n) - hT(t_n, t_{n+1}, \widetilde{y}(t_n), \widetilde{y}(t_{n+1}))\\ &+ hT(t_n, t_{n+1}, y_n, \widetilde{y}(t_{n+1})) - hT(t_n, t_{n+1}, y_n, y_{n+1})\\ =& O(h^{k+1}) + h\partial_4 T(t_n, t_{n+1}, y_n, \eta)(\widetilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1})\end{aligned}$$

qui donne

$$\begin{aligned}\widetilde{y}(t_{n+1}) - y_{n+1} &= O(h^{k+1}) \frac{1}{1 - h\partial_4 T(t_n, t_{n+1}, y_n, \eta)}\\ &= O(h^{k+1})(1 + h\partial_4 T(t_n, t_{n+1}, y_n, \eta) + O(h^2))\end{aligned}$$

Comme la théorie de équations différentielles donne

$$|y(t_{n+1}) - \widetilde{y}(t_{n+1})| \leq e^{Ah} |y(t_n) - \widetilde{y}(t_n)|$$

on arrive dans la récursion (TD X, exo 3.)

$$|y(t_{n+1}) - y_{n+1}| =: E_{n+1} \leq e^{Ah} E_n + Bh^{k+1}$$

qui donne

$$E_{n+1} \leq Bh^k \frac{e^{hA(n+1)} - 1}{A} + e^{hA(n+1)} E_0 = O(h^k)$$

comme $E_0 = y(t_0) - y_0 = 0$. □

Conclusion On voit que l'accumulation de l'erreur locale en $O(h^{k+1})$ donne une erreur globale en $O(h^k)$.

Remarque 26.
- *La borne que nous venons d'établir ne constitue pas nécessairement une estimation précise de l'erreur, ce n'est qu'un borne.*
- *D'une manière générale nous disons qu'une méthode est* précise à l'ordre k *si l'erreur locale* E_{loc} *est de la forme*

$$E_{loc} = const\, h^{k+1} y^{k+1}(\xi)$$

et nous admettons que ceci implique que l'erreur de troncature

$$e_n = y(t_n) - y_n = O(h^k)$$

On voit que la méthode d'Euler qui est du 1er ordre converge lentement puisqu'il faut grosso modo doubler le nombre de pas de discrétisation pour diviser l'erreur pas 2. *On est tenté d'utiliser une méthode* *d'ordre plus élevé et notamment l'algorithme de Taylor d'ordre k. Cependant, celui-ci est souvent très compliqué à mettre en reverse ?uvre a cause de la nécessiter d'évaluer formellement les dérivées successives $\phi, \phi', \phi'', \dots$. Pour cette raison, bien qu'il garde un intérêt théorique essentiel car il nous a permis de définir la notion d'ordre de précision, on lui préfère en pratique des méthodes de Runge-Kutta, ou des méthodes multipas.*

3.2.3 Méthodes de Runge-Kutta

En remplacement de l'algorithme de Taylor d'ordre 2 on propose la formule de récurrence suivante

$$\begin{aligned} k_1 &= h\phi(t_n, y_n) \\ k_2 &= h\phi(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + ak_1 + bk_2 \end{aligned}$$

et a, b, α and β sont de constantes ajustable.

Un développement de Taylor de $\frac{k_2}{h}$ nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{k_2}{h} =& \phi(t_n + \alpha h, y_n + \beta k_1) \\ =& \phi(t_n, y_n) + \alpha h \phi_t(t_n, y_n) + \beta k_1 \phi_y(t_n, y_n) \\ &+ \frac{\alpha^2 h^2}{2}\phi_{t,t}(t_n, y_n) + \alpha\beta k_1 \phi_{t,y}(t_n, y_n) + \frac{\beta^2 k_1^2}{2}\phi_{y,y}(t_n, y_n) + O(h^3) \end{aligned}$$

En effectuant les substitutions correspondants, on obtient :

$$\begin{aligned} y_{k+1} =& y_k + (a+b)h\phi(t_n, y_n) + bh^2(\alpha\phi_t(t_n, y_n) + \beta\phi\phi_y(t_n, y_n)) \\ &+ bh^3\left(\frac{\alpha^2}{2}\phi_{t,t}(t_n, y_n) + \alpha\beta\phi\phi_{t,y}(t_n, y_n) + \frac{\beta^2}{2}\phi^2\phi_{y,y}(t_n, y_n)\right) + O(h^4) \end{aligned}$$

Ce développement est à comparer à celui-ci (déjà obtenu) de la solution exacte

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) =& y(t_n) + hf(t_n, y_n) + \frac{h^2}{2}(\phi_t(t_n, y_n) + \phi\phi_y(t_n, y_n)) \\ &+ \frac{h^3}{6}(\phi_{t,t}(t_n, y_n) + 2\phi\phi_{t,y}(t_n, y_n) + \phi_{y,y}\phi^2(t_n, y_n) + \phi_t\phi_y(t_n, y_n) + \phi_y^2\phi(t_n, y_n)) \\ &+ O(h^4) \end{aligned}$$

On voit que l'on est amené à choisir les constantes de telle sorte que

$$\begin{aligned} a+b &= 1 \\ b\alpha = b\beta &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Ce qui permet d'identifier les 3 premiers termes. On constate qu'aucun réglage des coefficients ne permet d'identifier le terme suivante. On a donc plusieurs solution. On choisit généralement :

$$a = b = \frac{1}{2} \qquad \alpha = \beta = 1$$

ce qui donne la méthode suivante :

Méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 :

$$\begin{aligned} k_1 &= h\phi(t_n, y_n) \\ k_2 &= h\phi(t_n + h, y_n + k_1) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned}$$

En examinant à nouveau les développements limités de y_{n+1} et de y_{t_n+1} on voit que l'erreur locale (c'est à dire ce que vaudrait la différence $y(t_{n+1}) - y_{n+1}$ si l'information provenant du pas n était exacte, c'est-à-dire si on avait $y_n = y(t_n)$) est de la forme :

$$E_{loc} = O(h^3)$$

La méthode est donc précise au seconde ordre :

$$|e_n| = |y_n - y(t_n)| = O(h^2)$$

En utilisant la même méthode d'ajustement de coefficients, on peut obtenir une famille de méthodes précises au 3ieme ordre et un famille de méthodes précises au 4ieme ordre. La plus utilisée est la suivante :

Méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 :

$$\begin{aligned}
k_1 &= h\phi(t_n, y_n)\\
k_2 &= h\phi(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})\\
k_3 &= h\phi(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})\\
k_4 &= h\phi(t_n + h, y_n + k_3)\\
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)
\end{aligned}$$

L'erreur locale est ici $O(h^5)$ est l'erreur globale $O(h^4)$. La méthode est précise au 4ieme ordre. Cette precision accrue est au prix de quatre évaluations de la fonction ϕ par pas.

3.2.4 Méthode de multipas

On a vu dans la méthode de Runge-Kutta qu'une précision global du 4ieme ordre (l'erreur locale = $O(h^5)$) pouvait être atteint par une formule combinant judicieusement 4 approximations de la fonction ϕ. Ces approximations obtenu lors d'étapes intermédiaires du passage de (t_n, y_n) à (t_{n+1}, y_{n+1}) sont inutilisées par la suite.

Dans une méthode multipas au contraire, on cherche à construire une formule utilisant (en même nombre) les valeurs de ϕ déjà calculées aux pas précèdent. Pour cela on remarque qu'en intégrant l'équation différentielle

$$y'(t) = \phi(t, y(t))$$

de t_n à t_{n+1} on obtient :

$$y_{n+1} - y_n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(t, y(t))dt$$

On peut donc utiliser la procédure habituelle d'approximation numérique des intégrales. Supposons que les n premier pas de l'intégration numérique aient déjà effectué de sorte que l'on dispose d'approximations

$$y_0, y_1, \dots y_n$$

de la fonction inconnu $y(t)$ aux points

$$t_0 = a, t_1 = a + h, t_2 = a + 2h, \dots t_n = a + nh$$

(où h et la pas) mais aussi de la fonction $\phi(t, y)$:

$$\phi_0 = \phi(t_0, y_0), \phi_1 = \phi(t_1, y_1), \ldots \phi_n = \phi(t_n, y_n)$$

En vue de l'intégration numérique de $\phi(t, y(t))$ sur l'interval $[t_n, t_{n+1}]$ approchons cette fonction pas le polynôme d'interpolation de Lagrange $p_m(t)$, où m est un entier fixé, aux $(m+1)$ points de discrétisation précédent t_{n+1} c'est à dire : $t_n, t_{n-1}, t_{n-2}, \ldots, t_{n-m}$ (en pratique on prendra $m = 3$)

$$\begin{aligned} p_m(t) =& \phi_n + \phi[t_n, t_{n-1}](t - t_n) \\ &+ \phi[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}](t - t_n)(t - t_{n-2}) \\ &+ ... \\ &+ \phi[t_n, \ldots t_{n-m}](t - t_n) \ldots (t - t_{n-m}) \end{aligned}$$

de sorte que :

$$\begin{aligned} \phi_n &= \phi(t_n, y_n) \\ \phi[t_n, t_{n-1}] &= \frac{\phi_n - \phi_{n-1}}{h} \\ \phi[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}] &= \frac{\phi_n - 2\phi_{n-1} + \phi_{n-2}}{2h^2} \\ \phi[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}, t_{n-3}] &= \frac{\phi_n - 3\phi_{n-1} + 3\phi_{n-2} - \phi_{n-3}}{6h^3} \\ &\cdots \end{aligned}$$

On définit donc la méthode d'intégration par l'équation

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} p_m(t) dt.$$

On obtient donc dans le cas générale :

$$\begin{aligned} y_{n+1} =& y_n + \phi_n h + \phi[t_n, t_{n-1}] \int_{t_n}^{t_{n+1}} (t - t_n) dt \\ &+ \phi[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}] \int_{t_n}^{t_{n+1}} (t - t_n)(t - t_{n-2}) dt \\ &+ \ldots \\ &+ \phi[t_n, \ldots t_{n-m}] \int_{t_n}^{t_{n+1}} (t - t_n) \ldots (t - t_{n-m}) dt \end{aligned}$$

On fait le changement de variable $t = t_n + \Theta h$ afin que :

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + \phi_n h + h^2 \phi[t_n, t_{n-1}] \int_0^1 \Theta d\Theta \\ & + h^3 \phi[t_n, t_{n-1}, t_{n-2}] \int_0^1 \Theta(\Theta + 1) d\Theta \\ & + \dots \\ & + h^{m+1} \phi[t_n, \dots t_{n-m}] \int_0^1 \Theta \dots (\Theta + m - 1) d\Theta \end{aligned}$$

On a

$$\int_0^1 \Theta d\Theta = \frac{1}{2} \quad \int_0^1 \Theta(\Theta+1) d\Theta = \frac{5}{6} \quad \int_0^1 \Theta(\Theta+1)(\Theta+2) d\Theta = \frac{9}{4}$$

de sorte que pour $m = 3$ on obtient

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + h(\phi_n + \frac{\phi_n - \phi_{n-1}}{1} \frac{1}{2} + \frac{\phi_n - 2\phi_{n-1} + \phi_{n-2}}{2} \frac{5}{6} \\ & + \frac{\phi_n - 3\phi_{n-1} + 3\phi_{n-2} - \phi_{n-3}}{6} \frac{9}{4} \end{aligned}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55\phi_n - 59\phi_{n-1} + 37\phi_{n-2} - 9\phi_{n-3})$$

Erreur local et précision : Si toutes les informations sur $[t_0, t_n]$ étaient exacte, on aurait :

$$\phi(t) = y'(t) = p_m(t) + \frac{y^{(5)}(\eta)}{4!}(t - t_n)(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})(t - t_{n-3})$$

d'où par intégration

$$y(t_{n+1}) = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} p_m(t) dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{y^{(5)}(\eta)}{4!}(t - t_n)(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})(t - t_{n-3}) dt$$

ce qui fournit l'erreur locale :

$$E_{loc} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{y^{(5)}(\eta)}{4!}(t - t_n)(t - t_{n-1})(t - t_{n-2})(t - t_{n-3}) dt$$

Or sur $[t_n, t_{n+1}]$ tous les facteurs $(t-t_n), (t-t_{n-1}), (t-t_{n-2}), (t-t_{n-3})$ sont positifs de sorte que la formule de la moyenne s'applique :

$$\begin{aligned} E_{loc} =& \frac{y^{(5)}(\xi)}{4!} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (t-t_n)(t-t_{n-1})(t-t_{n-2})(t-t_{n-3})dt \\ =& \frac{h^5 y^{(5)}(\xi)}{4!} \int_0^1 \Theta(\Theta+1)(\Theta+2)(\Theta+3)dt \end{aligned}$$

Finalement

$$\boxed{E_{loc} = \frac{251}{720} h^5 y^{(5)}(\xi) = O(h^5)}$$

L'erreur globale est donc en $O(h^4)$. La méthode est précise au 4ème ordre. Son inconvénient majeur réside dans le fait qu'elle ne peut s'appliquer qu'à partir du 4ème pas, les 3 premières approximations devant être obtenues par une autre méthode. L'autre inconvénient réside dans la nécessité de stocker plusieurs valeurs de ϕ ce qui peut être prohibitif dans le cas vectoriel ($y \in \mathbb{R}^p, p > 1$). Son avantage principal est que l'on évalue qu'une seule fois la fonction ϕ par pas.

3.2.5 Méthode de prédicteur-correcteur

Dans les méthodes multipas examinées dans la section précédent, le polynôme d'interpolation de Lagrange de $\phi(t, y(t))$ est basé sur l'information "en amont"du point calculé c'est-à-dire sur les valeurs aux points $t_n, t_{n-1}, \ldots t_{n-m}$ pour un certain m. Pour les raisons liées à la précision mais aussi à la stabilité, une notion que nous examinerons dans une section ultérieure, il est souvent préférable de construire un polynôme dont la forme dépend aussi de valeur en t_{n+1}.

Par example si dans la formule

$$y_{n+1} = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(t, y(t))dt$$

on approche l'intégrale par la formule du trapèze on obtient :

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(\phi(t_n, y_n) + \phi(t_{n+1}, y_{n+1}))$$

Ce qui constitue une équation "implicite" c'est-à-dire dans laquelle l'inconnue y_{n+1} apparaît à gauche mais aussi à droite, et généralement nonlinéairement, et qu'il faut donc résoudre par rapport à cette inconnue, directement ou itérativement. Dans ce dernier cas, au pas n, on cherche à construire une suite $y_{n+1}^0, \ldots y_{n+1}^k, \ldots$ qui converge vers la solution y_{n+1} de l'équation précédent. On peut appliquer la méthode d'Euler pour définir le premier élément de la suite y_{n+1}^0. C'est le **Prédicteur**

$$y_{n+1}^0 = y_n + h\phi(t_n, y_n)$$

Aux itérations suivantes, on définie le **Correcteur** $(k \geq 1)$

$$y_{n+1}^k = y_n + \frac{h}{2}(\phi(t_n, y_n) + \phi(t_{n+1}, y_{n+1}))$$

L'itération au correcteur est prolongée jusqu'à satisfaction d'une critère de convergence qui peut être de la forme :

$$|y_{n+1}^k - y_{n+1}^{k-1}| < \varepsilon |y_{n+1}^k|$$

où ε est un nombre petit précisant la tolérance. À convergence l'erreur locale est celle de la formule d'intégration du trapèze c'est-à-dire de la forme $E_{loc} = O(h^3)$. Par accumulation, l'erreur globale est donc $O(h^2)$. Il en résulte alors que la méthode est donc du second ordre.