Interpolation polynomiale & Intégration numérique

Pour une étude numérique d'une fonction f sur un intervalle $[a,b]$, on souhaiterait simplifier f en la remplaçant par une fonction plus élémentaire. L'idée sera ensuite de remplacer f par cette approximation en vue
- d'estimer la valeur de f en des points où on ne l'a pas calculée
- de calculer l'intégrale de f.

1 Interpolation polynomiale

Une première idée est d'approcher f par un polynôme P. On peut choisir d'imposer que f coïncide avec f en quelques points $x_1,\dots,x_n$ (uniformément répartis dans $[a,b]$), c'est-à-dire que $f(x_i) = P(x_i)$ pour $i = 1,\dots,n$.
Soit $x_1,\dots,x_n \in \mathbb{R}$ distincts et $y_1,\dots,y_n \in \mathbb{R}$. Il existe un unique polynôme réel P de degré $n-1$ tel que

$$\text{pour } i = 1,\dots,n, \qquad P(x_i) = y_i.$$

En effet, ce problème équivaut à trouver les coefficients $a_0,\dots,a_{n-1} \in \mathbb{R}$ du polynôme $P = a_0 + a_1 X + \cdots + a_{n-1}X^{n-1}$, et les conditions équivalent au système linéaire

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & & & & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{n-1} \end{pmatrix},$$

qui est régulier car le déterminant de la matrice ci-dessus (matrice de Vandermonde) est $\prod_{i<j}(x_j - x_i) \neq 0$.
Une autre preuve de l'existence d'un tel polynôme consiste à le définir explicitement à partir des *polynômes de Lagrange* : pour $k = 1,\dots,n$, définissons le polynôme

$$L_k = \prod_{1\le i\le n,\, i\neq k} \frac{1}{x_k - x_i}(X - x_i).$$

Par exemple, pour $n = 3$, $L_1 = \frac{(X-x_2)(X-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$, $L_2 = \frac{(X-x_1)(X-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$ et $L_3 = \frac{(X-x_1)(X-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$. On constate que $L_k(x_k) = 1$, et $L_k(x_i) = 0$ si $i \neq k$. Par conséquent, si on pose

$$Q(X) = y_1 L_1(X) + y_2 L_2(X) + \cdots + y_n L_n(X),$$

alors $Q(x_i) = y_i$ pour $i = 1,\dots,n$. Et Q est un polynôme de degré $n-1$.
Pour l'unicité, on peut aussi remarquer que si P vérifie les conditions, alors $R = P - Q$ est un polynôme de degré $n-1$ et que $R(x_i) = 0$ pour $i = 1,\dots,n$; comme un polynôme non nul de degré n a au plus n racines, on a $R = 0$.

1) Dans Octave, on choisit de représenter un polynôme P par le vecteur $P = [a_{n-1}, a_{n-2}, \cdots a_1, a_0]$ de ses coefficients par ordre décroissant de degré. Par exemple, $X^2 - 7$ correspond à $[1, -7]$. Écrire une fonction `R=add_poly(P,Q)` qui additionne deux polynômes (attention à leurs degrés).

2) Pour effectuer le produit de deux polynômes P et Q, on peut utiliser `conv(P,Q)`. Écrire une fonction `poly_lagrange(vx,k)` qui prend en argument un vecteur `vx=[x1 ... xn]` et un entier $k \in \{1,\dots,n\}$ (où n est la longueur de `vx`) et renvoie le polynôme de Lagrange L_k ci-dessus. (A-t-on vraiment besoin de `add_poly` ?)

3) Écrire une fonction `P=interpol(vx,vy)` qui prend en arguments des vecteurs `vx=[x1 ... xn]` et `vy=[y1 ... yn]` et renvoie l'unique polynôme P tel que $P(x_i) = y_i$ pour $i = 1,\dots,n$.

4) Représenter graphiquement $f : x \mapsto \sin x$ sur $[-\pi,\pi]$. Prenons $n = 5$. On prend $x_1,\dots,x_n$ équirépartis dans $[-\pi,\pi]$ avec $x_1 = -\pi$ et $x_n = \pi$. Calculer le polynôme P de degré $n-1$ tel que $P(x_i) = f(x_i)$ pour $i = 1,\dots,n$, et le représenter graphiquement par-dessus le graphe précédent. Mettre en évidence sur le graphe les points $(x_i,f(x_i))$ (avec `plot(vx,f(vx),'+r')`). Augmenter n et comparer.

5) Même chose pour $f : x \mapsto \frac{1}{1+4x^2}$ sur $[-2,2]$.

L'exemple précédent suggère qu'il peut arriver que augmenter le nombre de points n et donc le degré $n-1$ augmente en fait la distance entre f et P en certains points hors de $x_1,\dots,x_n$. Cette méthode n'est donc **pas appropriée** en général.

2 Interpolation polynomiale par morceaux

On utilise plutôt des approximations φ polynomiales *par morceaux* : on subdivise $[a,b]$ en $a = a_0,a_1,\dots,a_n = b$ et, sur chaque intervalle $[a_i,a_{i+1}]$ de la subdivision, on définit $\varphi(x) = P_i(x)$ où P_i est un polynôme de degré k (petit). On raffine alors la subdivision (on rend $\max_i(a_{i+1} - a_i)$ petit) sans augmenter le degré des polynômes (k fixé). C'est par exemple l'approche utilisée pour estimer l'intégrale de f par ses *sommes de Riemann*, qui est l'intégrale d'une fonction constante par morceaux approchant f.
Plusieurs approches sont possibles pour choisir les polynômes sur chaque intervalle : pour avoir un polynôme de degré k, on peut notamment

— utiliser une subdivision à $k+1$ points de chaque intervalle et utiliser le polynôme d'interpolation en ces $k+1$ points (c'est-à-dire l'unique polynôme de degré $\leq k$ qui coïncide avec f en ces points) : on privilégie le fait que φ coïncide avec f en de nombreux points

— ou imposer seulement une coïncidence aux extrêmités a_i,a_{i+1} de chaque intervalle, mais aussi le fait que globalement φ est de classe $\mathcal{C}^{k-1}$ (c'est-à-dire qu'en $a_2,a_3,\dots,a_{n-1}$, les dérivées $\varphi',\varphi'',\dots,\varphi^{(k-1)}$ sont égales à gauche et à droite) : on privilégie le fait que φ soit régulière (ce qui est intéressant si on sait que f l'est aussi).

Le premier cas revient à ce que l'on a déjà vu ; détaillons ce que donne la seconde option pour $k = 0,1,2$.

2.1 Approximation de degré 0 (constante) par morceaux

Plusieurs choix sont naturels (il n'y a pas de contrainte de régularité) :

— approximation par point gauche : $\varphi(x) = f(a_i)$ pour tout $x \in [a_i,a_{i+1}[$

— par point milieu $\varphi(x) = f\left(\frac{a_i+a_{i+1}}{2}\right)$ pour tout $x \in]a_i,a_{i+1}[$ (valeur quelconque en a_i, a_{i+1}) ;

— par point droit : $\varphi(x) = f(a_{i+1})$ pour tout $x \in]a_i,a_{i+1}]$;

2.2 Approximation de degré 1 (affine) par morceaux, continue

On cherche φ qui

— est affine par morceaux sur tous les intervalles $]a_i,a_{i+1}[$

— coïncide avec f en $a_1,\dots,a_n$

— est **continue** : les limites à gauche et à droite en a_i sont égales.

Cela donne $\varphi(x) = f(a_i) + \frac{x-a_i}{a_{i+1}-a_i}\big(f(a_{i+1}) - f(a_i)\big)$ pour tout $x \in [a_i,a_{i+1}]$.

2.3 Approximation de degré 2 par morceaux, de classe $\mathcal{C}^1$

On cherche φ qui

— est une fonction polynôme de degré 2 sur chacun des intervalles $]a_i,a_{i+1}[$

— coïncide avec f en $a_1,\dots,a_n$

— est continue

— est $\mathcal{C}^1$: les pentes à gauche et à droite en a_i sont égales.

Notons P_i le polynôme de degré 2 tel que $\varphi(x) = P_i(x)$ lorsque $x \in [a_i,a_{i+1}]$. Chaque polynôme P_i comporte 3 coefficients donc peut (a priori) satisfaire 3 contraintes linéaires. On peut ainsi imposer $P(a_i) = f(a_i)$, $P(a_{i+1}) = f(a_{i+1})$, et $P_i'(a_i) = P_{i-1}'(a_i)$: à supposer que l'on ait déjà défini $P_{i-1}(= \varphi_{|[a_{i-1},a_i]})$, la dernière condition assure par récurrence que φ sera dérivable en a_i, avec une dérivée continue. On note que la première dérivée $P_1'(a_1)$ est quelconque ; on peut par exemple imposer $P_1'(a_1) = f'(a_1)$ si f est $\mathcal{C}^1$.

On procèderait de même pour un degré $k \geq 3$. L'exemple le plus usité est celui de degré 3 : la fonction φ est appelée une *spline* (cubique). En assurant que la courbe est $\mathcal{C}^2$, on assure la continuité de la courbure, ce qui suffit en pratique à donner une allure lisse.
Ces approximations régulières sont souvent utilisées en C.A.O. (conception assistée par ordinateur) : pour dessiner une courbe lisse dans un logiciel, au lieu de spécifier l'équation de la courbe, ou de la discrétiser en précisant quels pixels elle traverse, on se donne quelques points par laquelle elle passe, ainsi que le niveau de régularité souhaité (ligne brisée ou spline, par exemple).

3 Calcul numérique d'intégrales

On suppose que f est continue sur $[a,b]$. Pour estimer $\int_a^b f(t)dt$, on calcule $\int_a^b \varphi(t)dt$, où φ est "proche" de f et simple à intégrer.
On utilise une méthode d'interpolation polynomiale par morceaux selon la subdivision $a = a_0 < \cdots < a_n = b$ donnée par $a_i = a + ih$, où $h = \frac{b-a}{n}$: sur chaque intervalle $[a_i,a_{i+1}]$, φ est donnée par un polynôme P_i de degré k.
On remarque que

$$\int_a^b \varphi(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{a_i}^{a_{i+1}} \varphi(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{a_i}^{a_{i+1}} P_i(x)dx$$

3.1 Degré 0

On obtient les méthodes suivantes :

— (point gauche) $\displaystyle\int_a^b f(x)dx \simeq R_n(f) = \sum_{i=0}^{n-1}(a_{i+1} - a_i)f(a_i) = h\sum_{i=0}^{n-1} f(a+ih)$

— (point milieu) $\displaystyle\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n-1}(a_{i+1} - a_i)f(\frac{a_i + a_{i+1}}{2})$

— (point droit) $\displaystyle\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{n-1}(a_{i+1} - a_i)f(a_{i+1})$

On parle de **méthode des rectangles**. Il s'agit des **sommes de Riemann** usuelles.

6) On suppose f de classe $\mathcal{C}^1$ sur $[a,b]$. On note $M_1 = \max_{[a,b]}|f'|$. Montrer que, pour tout $x \in [a_i,a_{i+1}]$,

$$|f(x) - f(a_i)| \leq M_1(x - a_i)$$

et en déduire que, pour la méthode des rectangles associés au point gauche,

$$\left|\int_a^b f(x)dx - R_n(f)\right| \leq \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2}{n}M_1.$$

3.2 Degré 1

On obtient la **méthode des trapèzes** :

$$\int_a^b f(x)dx \simeq T_n(f) = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{a_i}^{a_{i+1}}\Big(f(a_i) + (x-a)\frac{f(a_{i+1}) - f(a_i)}{a_{i+1} - a_i}\Big)dx = \sum_{i=0}^{n-1}(a_{i+1} - a_i)\frac{f(a_i) + f(a_{i+1})}{2}$$

$$= \frac{1}{2}f(a_0) + \sum_{i=1}^{n-2}(a_{i+1} - a_i)f(a_i) + \frac{1}{2}f(a_n) = \frac{1}{2}f(a_0) + h\sum_{i=1}^{n-2} f(a+ih) + \frac{1}{2}f(a_n)$$

On constate que la différence par rapport à la méthode des rectangles ne tient qu'aux "termes de bord". Néanmoins, la vitesse de convergence est accrue.

7) On suppose f de classe $\mathcal{C}^2$ sur $[a,b]$. On note $M_2 = \max_{[a,b]}|f''|$. Pour simplifier les notations on fait un calcul sur un intervalle $[\alpha,\beta]$, que l'on pourra appliquer à $[a_i,a_{i+1}]$. En faisant deux intégrations par parties (dans l'intégrale de droite), montrer que

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx = (\beta - \alpha)\frac{f(\alpha) + f(\beta)}{2} + \frac{1}{2}\int_\alpha^\beta (x-\alpha)(x-\beta)f''(x)dx,$$

et en déduire que

$$\left|\int_\alpha^\beta f(x)dx - (\beta - \alpha)\frac{f(\alpha) + f(\beta)}{2}\right| \leq \frac{(\beta-\alpha)^3}{12}M_2.$$

Conclure que

$$\left|\int_a^b f(x)dx - T_n(f)\right| \leq \frac{1}{12}\frac{(b-a)^3}{n^2}M_2.$$

3.3 Degré 2

Notons L_1,L_2,L_3 les polynômes de Lagrange associés à des points $\alpha,\frac{\alpha+\beta}{2},\beta$. Pour une fonction $f : [\alpha,\beta] \to \mathbb{R}$, le polynôme interpolateur est $P = f(\alpha)L_1 + f(\frac{\alpha+\beta}{2})L_2 + f(\beta)L_3$, d'intégrale

$$\int_\alpha^\beta P(t)dt = f(\alpha)\int_\alpha^\beta L_1 + f(\frac{\alpha+\beta}{2})\int_\alpha^\beta L_2 + f(c)\int_\alpha^\beta L_3 = \frac{\beta-\alpha}{6}\Big(f(\alpha)+4f(\frac{\alpha+\beta}{2})+f(\beta)\Big) \qquad (*)$$

en calculant par exemple $(\frac{\alpha+\beta}{2}-\alpha)(\frac{\alpha+\beta}{2}-\beta)\int_\alpha^\beta L_2(t)dt = \int_\alpha^\beta(t-\alpha)(t-\beta)dt = \int_\alpha^\beta(t-\alpha)^2dt + (\alpha-\beta)\int_\alpha^\beta(t-\alpha)dt$ (en écrivant $t-\beta = (t-\alpha)+(\alpha-\beta)$) d'où $\int_\alpha^\beta L_2 = \frac{1}{3}(\beta-\alpha)^3 - \frac{1}{2}(\beta-\alpha)^3 = -\frac{(\beta-\alpha)^3}{6}$ d'où $\int_\alpha^\beta L_2 = \frac{4}{6}(\beta-\alpha)$.
On en déduit la **méthode de Simpson** en appliquant ceci à chacun des intervalles $[a_0,a_1],\dots,[a_{n-1},a_n]$:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq S_n(f) = \sum_{i=0}^{n-1}\frac{a_{i+1}-a_i}{6}\Big(f(a_i)+4f(\frac{a_i+a_{i+1}}{2})+f(a_{i+1})\Big)$$

et, pour une subdivision régulière, avec $\ell = \frac{h}{2}$, on a $a_i = a+2i\ell$ et $\frac{a_i+a_{i+1}}{2} = a+(2i+1)\ell$ donc en regroupant les termes cela s'écrit

$$S_n(f) = \frac{\ell}{3}\Big(f(a) + 2\sum_{i=0}^{n-1} f(a+2i\ell) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(a+(2i+1)\ell) + f(b)\Big)$$

On peut démontrer que, si $f \in \mathcal{C}^4$, et $M_4 = \max_{[a,b]}|f^{(4)}|$,

$$\left|\int_a^b f(x)dx - S_n(f)\right| \leq \frac{1}{2880}\frac{(b-a)^5}{n^4}M_4$$

Du fait de l'amélioration sensible de la vitesse de convergence (n^{-4} plutôt que n^{-2}), tout en ne faisant que doubler la complexité (on évalue f en deux fois plus de points), cette méthode est l'une des plus utilisées en pratique.

8) Écrire des fonctions `I=integ_rectangle(f,a,b,n)`, `I=integ_trapeze(f,a,b,n)` et `I=integ_simpson(f,a,b,n)` qui prennent en argument une fonction `f`, les extrêmités `a,b` de l'intervalle d'intégration, et le nombre `n` d'intervalles de la subdivision, et renvoie les estimations de $\int_a^b f(x)dx$ par les méthodes des rectangles (avec point à gauche), des trapèzes et de Simpson.

9) Tester ces fonctions avec le calcul de $\int_{-1}^1 \frac{dt}{1+t^2}$. Représenter graphiquement les erreurs pour les trois méthodes pour $n = 10^k$, $k = 1,\dots,5$. On utilisera un graphe avec des échelles logarithmiques sur les deux axes (fonction `loglog`). On pourra utiliser `legend("Rectangles","Trapèzes","Simpson")` pour ajouter une légende au graphe. Représenter également $\frac{1}{n}$, $\frac{1}{n^2}$ et $\frac{1}{n^4}$ pour comparaison.

10) Tester avec $\int_0^1 \sqrt{t}\,dt$. Que constate-t-on et pourquoi ?

4 Calcul de la borne de l'erreur dans la méthode de Simpson

On commence par borner l'erreur de l'approximation sur un unique intervalle $[\alpha,\beta] \subset [a,b]$. On définit la fonction g sur $[0,\frac{\beta-\alpha}{2}]$ par

$$g(t) = \int_{m-t}^{m+t} f(x)dx - \frac{2t}{6}\big(f(m-t) + 4f(m) + f(m+t)\big)$$

où $m = \frac{\alpha+\beta}{2}$. On est donc intéressé à borner $g(\frac{\beta-\alpha}{2})$. Cette fonction g est de classe $\mathcal{C}^4$, et ses dérivées successives sont

$$\begin{aligned}
g'(t) &= \frac{1}{3}\big(2f(m+t) + 2f(m-t) - 4f(m) + tf'(m-t) - tf'(m+t)\big)\\
g''(t) &= \frac{1}{3}\big(f'(m+t) - f'(m-t) - tf''(m-t) - tf''(m+t)\big)\\
g^{(3)}(t) &= \frac{t}{3}\big(f^{(3)}(m-t) - f^{(3)}(m+t)\big)
\end{aligned}$$

donc en particulier $g(0) = g'(0) = g''(0) = 0$, et

$$|g^{(3)}(t)| = \frac{t}{3}\left|\int_{m-t}^{m+t} f^{(4)}(u)du\right| \leq \frac{t}{3}(2tM_4) = \frac{2t^2}{3}M_4.$$

La formule de Taylor avec reste intégral à l'ordre 2 en 0 donne donc (ou par intégrations successives)

$$|g(t)| = \left|\int_0^t \frac{1}{2}(t-x)^2 g^{(3)}(x)dx\right| \leq \frac{1}{2}\int_0^t (t-x)^2|g^{(3)}(x)|dx \leq \frac{1}{3}M_4\int_0^t (t-x)^2x^2dx = \frac{t^5}{90}M_4,$$

ce qui s'écrit en particulier, pour $t = \frac{\beta-\alpha}{2}$,

$$\left|\int_\alpha^\beta f(x)dx - \frac{\beta-\alpha}{6}\big(f(\alpha) + 4f(\frac{\alpha+\beta}{2}) + f(\beta)\big)\right| \leq \frac{(\beta-\alpha)^5}{2880}M_4$$

En appliquant ceci à chacun des n intervalles $[a_0,a_1],\ldots,[a_{n-1},a_n]$ et en sommant les inégalités, on obtient finalement

$$\begin{aligned}
\left|\int_a^b f(x)dx - S_n(f)\right| &= \left|\sum_{i=0}^{n-1}\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(x)dx - \frac{h}{6}\big(f(a_i) + 4f(a_i + \frac{h}{2}) + f(a_{i+1})\big)\right|\\
&\leq \sum_{i=0}^{n-1}\left|\int_{a_i}^{a_{i+1}} f(x)dx - \frac{h}{6}\big(f(a_i) + 4f(a_i + \frac{h}{2}) + f(a_{i+1})\big)\right|\\
&\leq n\frac{h^5}{2880}M_4 = \frac{1}{2880}\frac{(b-a)^5}{n^4}M_4
\end{aligned}$$

NB. Si f est un polynôme de degré 3, on constate que $M_4 = 0$ donc $S_n(f) = \int_a^b f(x)dx$ et la formule d'intégration est exacte bien que f ne soit pas égale à son polynôme d'interpolation P. Ceci explique que l'erreur soit en n^4 plutôt qu'en n^3 (comme on aurait pu s'y attendre d'après les formules de degré 0 et 1).