

La méthode d'intégration de Simpson

Marc Lorenzi

11 mai 2023

1 La méthode

1.1 Interpolation de Lagrange

Soit $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$.

Soit P_f le polynôme de degré inférieur ou égal à 2 qui prend la même valeur que f aux points $-1, 0, 1$. Introduisons les *polynômes élémentaires de Lagrange*

$$\begin{aligned}L_{-1} &= \frac{1}{2}X(X-1) \\L_0 &= 1 - X^2 \\L_1 &= \frac{1}{2}X(X+1)\end{aligned}$$

Ces polynômes vérifient pour tous $x, y \in \{-1, 0, 1\}$, $L_x(y) = \delta_{xy}$ où le *symbole de Kronecker* δ_{xy} vaut 1 si $x = y$ et 0 sinon. Voici les courbes de L_{-1} , L_0 et L_1 .

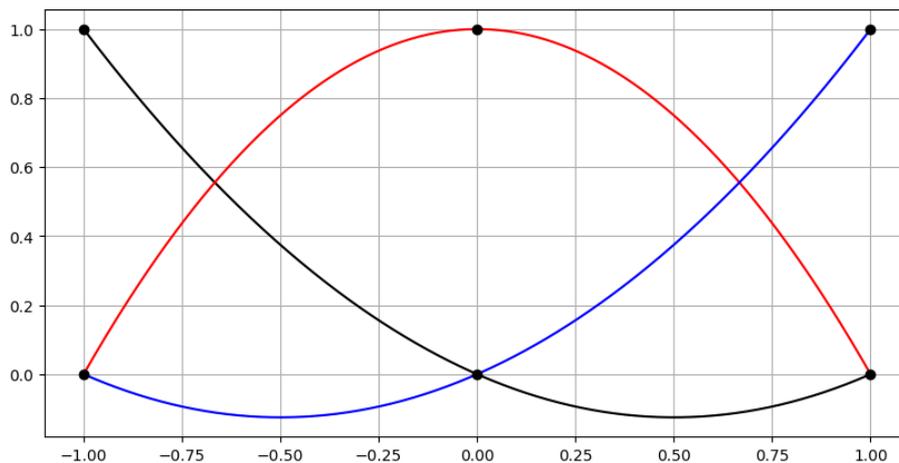


FIGURE 1 – Les polynômes élémentaires de Lagrange

Le polynôme P_f est alors facile à exprimer.

$$P_f = f(-1)L_{-1} + f(0)L_0 + f(1)L_1$$

Voici les courbes de f (en noir) et P_f (en rouge) pour $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $f(x) = x^4$.

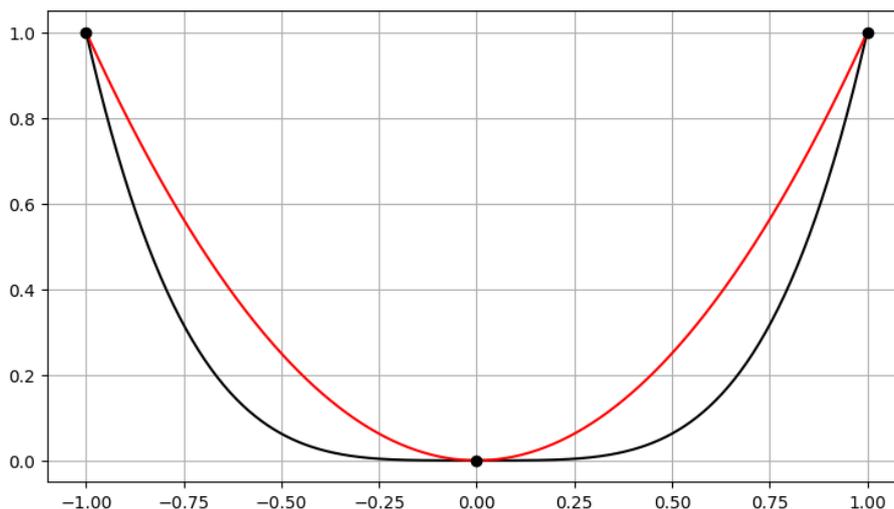


FIGURE 2 – Interpolation de Lagrange

1.2 Intégrons P_f

Que vaut $\int_{-1}^1 P_f(x) dx$? On a

$$\int_{-1}^1 L_{-1}(x) dx = \left[\frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{4}x^2 \right]_{-1}^1 = \frac{1}{3}$$

$$\int_{-1}^1 L_0(x) dx = \left[x - \frac{1}{3}x^3 \right]_{-1}^1 = \frac{4}{3}$$

$$\int_{-1}^1 L_1(x) dx = \left[\frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{4}x^2 \right]_{-1}^1 = \frac{1}{3}$$

De là,

$$\int_{-1}^1 P_f(x) dx = \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1))$$

On peut espérer que sous certaines conditions, l'intégrale de P_f soit « proche » de l'intégrale de f .

2 L'erreur commise

Pour toute fonction $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, nous noterons dorénavant

$$I(f) = \frac{1}{3}(f(-1) + 4f(0) + f(1))$$

2.1 Simpson et les polynômes

Notons, pour tout $k \in \mathbb{N}$, $P_k = X^k$.

Pour $k = 0, 1, 2$, P_k est son propre polynôme d'interpolation. On a donc $\int_{-1}^1 P_k(x) dx = I(P_k)$. On a aussi

$$\int_{-1}^1 P_3(x) dx = \int_{-1}^1 x^3 dx = 0$$

D'autre part,

$$I(P_3) = \frac{1}{3}(P_3(-1) + 4P_3(0) + P_3(1)) = 0$$

Le fait que P_3 soit intégré exactement est la clé de l'efficacité de la méthode de Simpson.

La famille $(P_k)_{0 \leq k \leq 3}$ est une base de $\mathbb{R}_3[X]$. Par linéarité de l'intégrale et de I , on a donc pour tout $P \in \mathbb{R}_3[X]$,

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = I(P)$$

Remarquons que

$$\frac{2}{5} = \int_{-1}^1 P_4(x) dx \neq I(P_4) = \frac{2}{3}$$

La méthode de Simpson est ce que l'on appelle une *méthode de quadrature d'ordre 3*, parce que l'entier 3 est le plus grand entier m tel que la méthode donne une valeur exacte pour tous les polynômes de $\mathbb{R}_m[X]$.

2.2 Le noyau de Peano

Les techniques que nous allons utiliser dans ce paragraphe pour la méthode de Simpson se généralisent à un grand nombre d'autres méthodes d'intégration approchée.

Notation. Pour tout $x \in \mathbb{R}$, $x_+ = \max(x, 0)$.

Soit $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe \mathcal{C}^4 .

Soit $x \in [-1, 1]$. Écrivons la formule de Taylor avec reste intégral pour f entre -1 et x à l'ordre 3.

$$f(x) = P(x) + R(x)$$

où

$$P(x) = \sum_{k=0}^3 \frac{f^{(k)}(-1)}{k!} (x+1)^k$$

et

$$R(x) = \frac{1}{6} \int_{-1}^x (x-t)^3 f^{(4)}(t) dt$$

Remarquons que pour tout $t \in [-1, 1]$, si $t \leq x$ alors $x-t = (x-t)_+$ et si $t \geq x$, $(x-t)_+ = 0$. On peut donc écrire

$$R(x) = \frac{1}{6} \int_{-1}^1 (x-t)_+^3 f^{(4)}(t) dt$$

Tout d'abord, par le théorème de Fubini,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 R(x) dx &= \frac{1}{6} \int_{-1}^1 \left(\int_{-1}^1 (x-t)_+^3 f^{(4)}(t) dt \right) dx \\ &= \frac{1}{6} \int_{-1}^1 \left(\int_{-1}^1 (x-t)_+^3 dx \right) f^{(4)}(t) dt \end{aligned}$$

Par la linéarité de l'intégrale,

$$\begin{aligned} I(R) &= \frac{1}{3}(R(-1) + 4R(0) + R(1)) \\ &= \frac{1}{6} \int_a^b \left(\frac{1}{3} [(-1-t)_+^3 + 4(-t)_+^3 + (1-t)_+^3] \right) f^{(4)}(t) dt \end{aligned}$$

Comme $P \in \mathbb{R}_3[X]$,

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = I(P)$$

et donc

$$\int_{-1}^1 f(x) dx - I(f) = \int_{-1}^1 R(x) dx - I(R) = \frac{1}{6} \int_{-1}^1 G(t) f^{(4)}(t) dt$$

où

$$G(t) = \int_{-1}^1 (x-t)_+^3 dx - \frac{1}{3} [(-1-t)_+^3 + 4(-t)_+^3 + (1-t)_+^3]$$

La fonction $G : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ est le *noyau de Peano*. Remarquons que pour tout $t \in [-1, 1]$,

$$\int_{-1}^1 (x-t)_+^3 dx = \int_t^1 (x-t)^3 dx = \frac{1}{4} [(x-t)^4]_t^1 = \frac{1}{4} (1-t)^4$$

Remarquons aussi que pour tout $t \in [-1, 1]$, $(-1-t)_+ = 0$ et $(1-t)_+ = 1-t$. On a ainsi pour tout $t \in [-1, 1]$,

- Si $t \leq 0$,

$$\begin{aligned} G(t) &= \frac{1}{4} (1-t)^4 - \frac{1}{3} (-4t^3 + (1-t)^3) \\ &= \frac{1}{12} (t+1)^3 (3t-1) \end{aligned}$$

- Si $t \geq 0$,

$$\begin{aligned} G(t) &= \frac{1}{4}(1-t)^4 - \frac{1}{3}(1-t)^3 \\ &= \frac{1}{12}(t-1)^3(3t+1) \end{aligned}$$

Retenons

Pour tout $t \in [-1, 1]$,

$$G(t) = \frac{1}{12}(t - \varepsilon)^3(3t + \varepsilon)$$

où $\varepsilon = 1$ si $t \in [0, 1]$ et $\varepsilon = -1$ sinon.

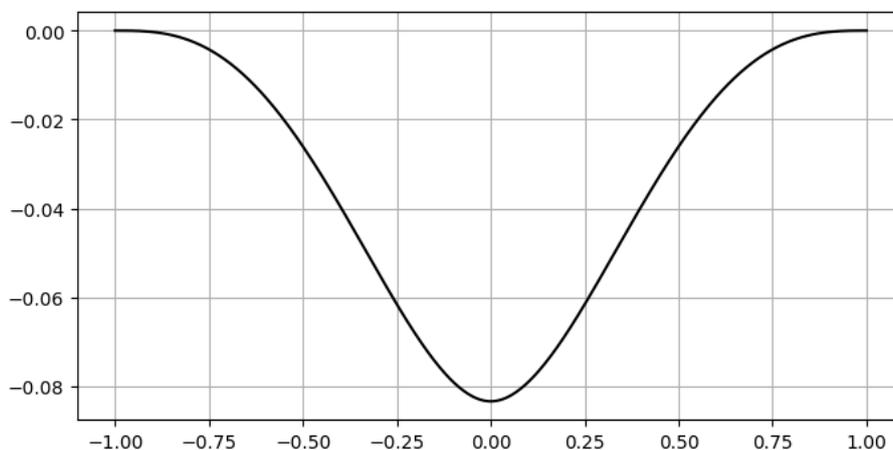


FIGURE 3 – Le noyau de Peano

Proposition 1. G est de classe \mathcal{C}^2 sur $[-1, 1]$.

Démonstration. G est clairement de classe \mathcal{C}^∞ sur $[-1, 0[$ et sur $]0, 1]$. Lorsque t tend vers 0 (à gauche ou à droite), $G(t)$ tend vers $-\frac{1}{12} = G(0)$, donc G est continue en 0. Développons G . Pour tout $t \in [-1, 1]$,

$$G(t) = \frac{1}{1}t^4 - \frac{2\varepsilon}{3}t^3 + \frac{1}{2}t^2 - \frac{1}{12}$$

Pour tout $t \neq 0$,

$$G'(t) = t^3 - 2\varepsilon t^2 + t$$

Cette quantité tend vers 0 lorsque t tend vers 0. Ainsi, G est de classe \mathcal{C}^1 sur $[-1, 1]$ et $G'(0) = 0$.

Pour tout $t \neq 0$,

$$G''(t) = 3t^2 - 4\varepsilon t + 1$$

Cette quantité tend vers 1 lorsque t tend vers 0. Ainsi, G est de classe \mathcal{C}^2 sur $[-1, 1]$ et $G'''(0) = 1$. \square

Remarque. G n'est pas de classe \mathcal{C}^3 . En effet, pour tout $t \neq 0$,

$$G'''(t) = 6t - 4\varepsilon$$

Cette quantité tend vers 4 lorsque t tend vers 0 par valeurs inférieures, et vers -4 lorsque t tend vers 0 par valeurs supérieures. La fonction G est donc trois fois dérivable à gauche et à droite en 0, mais les valeurs des dérivées directionnelles sont distinctes.

Proposition 2. *La fonction G est paire et négative.*

Démonstration. Il suffit de regarder l'expression que nous avons trouvée pour $G(t)$. \square

Le fait que G soit de signe constant va être d'une grande importance.

2.3 L'erreur commise

Rappelons que

$$\int_{-1}^1 f(x) dx - I(f) = \int_{-1}^1 R(x) dx - I(R) = \frac{1}{6} \int_{-1}^1 G(t) f^{(4)}(t) dt$$

La fonction G est de signe constant et $f^{(4)}$ est continue. On peut appliquer la première formule de la moyenne. Il existe $\xi \in [-1, 1]$ tel que

$$\frac{1}{6} \int_{-1}^1 G(t) f^{(4)}(t) dt = \frac{1}{6} f^{(4)}(\xi) \int_{-1}^1 G(t) dt$$

Par la parité de G , $\int_{-1}^1 G = 2 \int_0^1 G$. Il nous reste à calculer cette dernière intégrale. En utilisant l'expression développée de $G(t)$ pour $t \in [0, 1]$,

$$\begin{aligned} \int_0^1 G(t) dt &= \int_0^1 \left(\frac{1}{4}t^4 - \frac{2}{3}t^3 + \frac{1}{2}t^2 - \frac{1}{12} \right) dt \\ &= \frac{1}{20} - \frac{1}{6} + \frac{1}{6} - \frac{1}{12} \\ &= -\frac{1}{30} \end{aligned}$$

De là,

$$\frac{1}{6} \int_{-1}^1 G(t) f^{(4)}(t) dt = \frac{1}{6} f^{(4)}(\xi) \int_{-1}^1 G(t) dt = -\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Nous avons prouvé le résultat suivant.

Proposition 3. Soit $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe \mathcal{C}^4 . Il existe $\xi \in [-1, 1]$ tel que

$$\int_{-1}^1 f(x) dx - I(f) = -\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Exemple. Soit $f : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $f(x) = x^4$. On a

$$\int_{-1}^1 f(x) dx - I(f) = \frac{2}{5} - \frac{2}{3} = -\frac{4}{15}$$

Par ailleurs, $f^{(4)}$ est constante, égale à 24, et pour tout $\xi \in [0, 1]$,

$$-\frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) = -\frac{4}{15}$$

3 Segments quelconques

Soient a et b deux réels tels que $a < b$. On note

$$c = \frac{a+b}{2} \text{ et } \delta = \frac{b-a}{2}$$

On se donne une fonction $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ de classe \mathcal{C}^4 .

3.1 Paramétrage

La fonction affine $\varphi : [-1, 1] \rightarrow [a, b]$ définie pour tout $t \in [-1, 1]$ par

$$\varphi(t) = c + \delta t$$

est une bijection. Considérons la fonction $\widehat{f} : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$\widehat{f} = f \circ \varphi$$

La fonction \widehat{f} est de classe \mathcal{C}^4 . On a

$$\widehat{f}' = \varphi' \times f' \circ \varphi = \delta f' \circ \varphi$$

De même, $\widehat{f}'' = \delta^2 f'' \circ \varphi$, $\widehat{f}''' = \delta^3 f''' \circ \varphi$ et $\widehat{f}^{(4)} = \delta^4 f^{(4)} \circ \varphi$.

3.2 Intégration

Par le changement de variable $x = \varphi(t)$, on a

$$\int_a^b f(x) dx = \delta \int_{-1}^1 f(\varphi(t)) dt = \delta \int_{-1}^1 \widehat{f}(t) dt$$

Par la proposition 3, il existe $\zeta \in [-1, 1]$ tel que

$$\int_{-1}^1 \widehat{f}(t) dt = I(\widehat{f}) - \frac{1}{90} \widehat{f}^{(4)}(\zeta) = I(\widehat{f}) - \frac{\delta^4}{90} f^{(4)}(\xi)$$

où $\xi = \varphi(\zeta) \in [a, b]$. Notons maintenant que

$$I(\widehat{f}) = \frac{1}{3}(\widehat{f}(-1) + 4\widehat{f}(0) + \widehat{f}(1)) = \frac{1}{3}(f(a) + 4f(c) + f(b))$$

On a donc

$$\int_a^b f = \frac{\delta}{3}(f(a) + 4f(c) + f(b)) - \frac{\delta^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Nous noterons dorénavant

$$I(f, a, b) = \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(c) + f(b))$$

En remarquant que $90 \times 2^5 = 2880$, nous avons démontré le résultat suivant.

Proposition 4. Soit $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe \mathcal{C}^4 . Il existe $\xi \in [a, b]$ tel que

$$\int_a^b f(x) dx = I(f, a, b) - \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

4 Itération de la méthode de Simpson

4.1 Subdivisions

Soit $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe \mathcal{C}^4 . Soit $n \geq 1$. Considérons la subdivision régulière $\sigma = (x_0, \dots, x_n)$ du segment $[a, b]$ définie, pour tout $k \in \llbracket 0, n \rrbracket$, par

$$x_k = a + k \frac{b-a}{n}$$

Pour tout $k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket$, appliquons la proposition 4 à f sur l'intervalle $[x_k, x_{k+1}]$.

On a

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx = I(f, x_k, x_{k+1}) - \frac{(b-a)^5}{2880n^5} f^{(4)}(\xi_k)$$

où $\xi_k \in [x_k, x_{k+1}]$. De là,

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} I(f, x_k, x_{k+1}) - \frac{(b-a)^5}{2880n^4} S$$

où

$$S = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f^{(4)}(\xi_k)$$

Le réel S est un barycentre à coefficients positifs de valeurs prises par $f^{(4)}$. Il est donc compris entre deux valeurs prises par $f^{(4)}$. Comme $f^{(4)}$ est continue sur $[a, b]$, le théorème des valeurs intermédiaires montre qu'il existe $\xi \in [a, b]$ tel que $S = f^{(4)}(\xi)$.

Nous noterons dorénavant

$$I_n(f, a, b) = \sum_{k=0}^{n-1} I(f, x_k, x_{k+1})$$

Nous avons prouvé le résultat suivant.

Proposition 5. *Soit $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de classe C^4 . Soit $n \geq 1$. Il existe $\xi \in [a, b]$ tel que*

$$\int_a^b f(x) dx = I_n(f, a, b) - \frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{(4)}(\xi)$$

L'erreur E_n commise en approchant $\int_a^b f$ par $I_n(f, a, b)$ est donc en $O\left(\frac{1}{n^4}\right)$. En notant $M = \max_{[a,b]} |f^{(4)}|$, on a

$$|E_n| \leq \frac{M(b-a)^5}{2880n^4}$$

Exemple. Prenons $f : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $f(x) = \sin x$. On a dans ce cas $M = 1$ et

$$|E_n| \leq \frac{\pi^5}{2880n^4}$$

Le majorant de l'erreur est inférieur à 10^{-10} dès que

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{10^{10}\pi^5}{2880}} \simeq 180.6$$

et donc dès que $n \geq 181$. Une simulation numérique donne effectivement une erreur de 6.3×10^{-11} .

4.2 La formule

En reprenant les notations du paragraphe précédent, on a pour tout $k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket$,

$$x_{k+1} - x_k = \frac{b-a}{n}$$

De là, en notant c_k le milieu du segment $[x_k, x_{k+1}]$,

$$I(f, x_k, x_{k+1}) = \frac{b-a}{6n} (f(x_k) + 4f(c_k) + f(x_{k+1}))$$

Lorsqu'on additionne les réels $I(f, x_k, x_{k+1})$, les $f(c_k)$ sont affectés d'un facteur 4. Les $f(x_k)$ sont quant à eux affectés d'un coefficient 2, sauf $f(x_0)$ et $f(x_n)$. On obtient en fin de compte

$$I_n(f, a, b) = \frac{b-a}{6n} \left(f(x_0) + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + 4 \sum_{k=0}^{n-1} f(c_k) + f(x_n) \right)$$

Sous forme développée, l'expression entre parenthèses ci-dessus s'écrit

$$f(x_0) + 4f(c_0) + 2f(x_1) + 4f(c_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + 4f(c_{n-1}) + f(x_n)$$

4.3 L'erreur en pratique

Lorsqu'on met en pratique la méthode de Simpson, il faut tenir compte des erreurs dues aux arrondis dans les calculs avec les flottants. Nous nous contenterons ici de reprendre l'exemple de la fonction $f : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $f(x) = \sin x$. Comme nous l'avons déjà vu, on a

$$|E_n| \leq \frac{\pi^5}{2880n^4}$$

De nombreux langages de programmation (C, Python, etc.) utilisent pour représenter les flottants la norme IEEE-754. Pour ne citer que Python, le nombre de chiffres significatifs des flottants est environ 16. Il est donc illusoire de vouloir faire mieux que « 15 chiffres après la virgule » dans un calcul approché. Dans l'exemple qui nous intéresse, le majorant de l'erreur est inférieur à 10^{-15} dès que

$$n \geq \sqrt[4]{\frac{10^{15}\pi^5}{2880}} \simeq 3211$$

Une simulation numérique en Python donne pour $n = 3211$ une erreur effective de 3.6×10^{-15} , c'est à dire une erreur plus grande que l'erreur théorique. Les erreurs d'arrondi se font donc sentir. Le graphique ci-dessous a été obtenu avec Python. On y a représenté l'erreur en pratique (en noir) et le majorant de $|E_n|$ (en rouge) en fonction de n , en coordonnées logarithmiques. Que peut-on y observer? Tout d'abord, ce qui ressemble à peu près à une droite de pente -4 . Puis, lorsque n approche 2×10^3 , l'erreur est de l'ordre de 10^{-15} et une courbe en « zigzag » apparaît. Les erreurs d'arrondis prennent alors le dessus et l'erreur réelle devient plus grande que le majorant théorique.

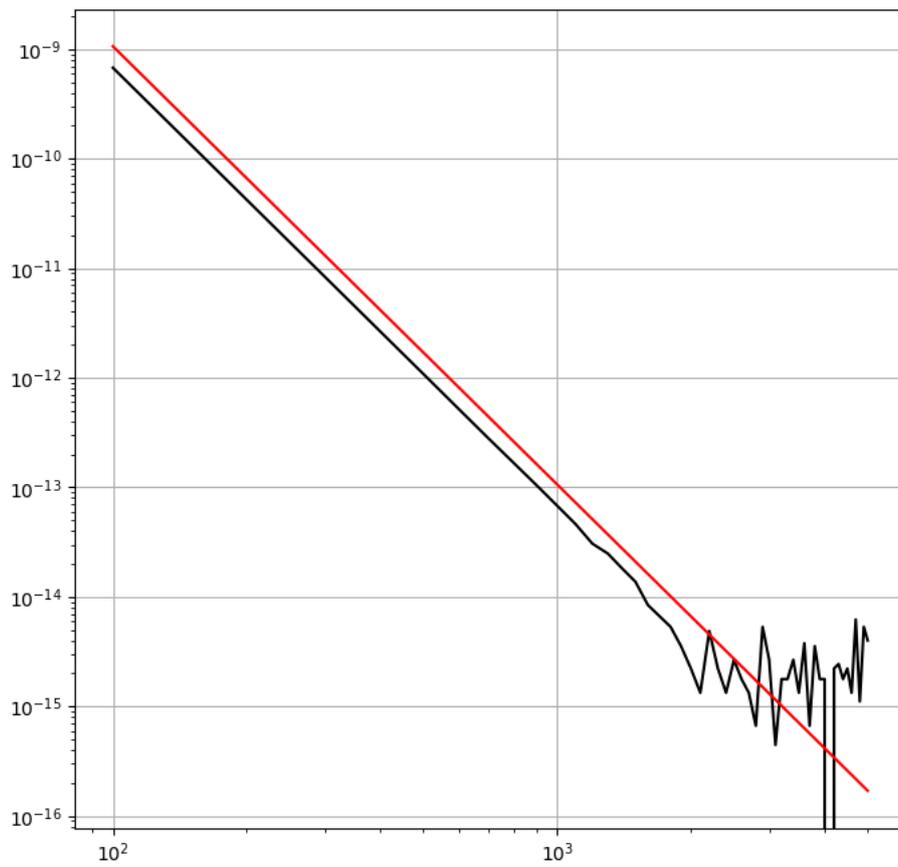


FIGURE 4 – L'erreur numérique en pratique