Formules de quadrature (Centrale PC 2021)

Durée : libre

Dans tout ce sujet, I est un intervalle de $\mathbb{R}$ d'intérieur non vide et w est une fonction continue et strictement positive de I dans $\mathbb{R}$; on dit que w est *un poids* sur I.
Étant donné une fonction continue $f : \mathrm{I} \to \mathbb{R}$ telle que fw est intégrable sur I, on cherche à approcher l'intégrale $\displaystyle\int_{\mathrm{I}} f(x)w(x)\,\mathrm{d}x$ par une expression de la forme

$$\mathrm{I}_n(f) = \sum_{j=0}^{n} \lambda_j f(x_j)$$

où $n \in \mathbb{N}$, $(\lambda_0, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{R}^{n+1}$ et $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ sont $n+1$ points distincts dans I.
Une telle expression $\mathrm{I}_n(f)$ est appelée *formule de quadrature* et on note

$$e(f) = \int_{\mathrm{I}} f(x)w(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{j=0}^{n} \lambda_j f(x_j)$$

l'*erreur de quadrature* associée. On remarque que e est une forme linéaire sur l'espace vectoriel des fonctions f de I dans $\mathbb{R}$ telles que fw est intégrable sur I.
On rappelle qu'un polynôme est dit unitaire si son coefficient dominant est 1.
Étant donné un entier $m \in \mathbb{N}$, on note $\mathbb{R}_m[X]$ l'espace vectoriel des polynômes à coefficients réels de degré inférieur ou égal à m.
On dit qu'une formule de quadrature $\mathrm{I}_n(f)$ est *exacte sur* $\mathbb{R}_m[X]$ si,

$$\forall \mathrm{P} \in \mathbb{R}_m[X], \quad e(\mathrm{P}) = 0$$

ce qui signifie que, pour tout polynôme P de degré inférieur ou égal à m,

$$\int_{\mathrm{I}} \mathrm{P}(x)w(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n} \lambda_j \mathrm{P}(x_j)$$

Enfin, on appelle *ordre d'une formule de quadrature* $\mathrm{I}_n(f)$ le plus grand entier $m \in \mathbb{N}$ pour lequel la formule de quadrature $\mathrm{I}_n(f)$ est exacte sur $\mathbb{R}_m[X]$.
Les parties II et III s'appuient sur la partie I et sont indépendantes entre elles.

I Généralités sur les formules de quadrature

I. A – Exemples élémentaires

Dans cette sous-partie, on se place dans le cas $\mathrm{I} = [0,1]$ et $\forall x \in \mathrm{I}$, $w(x) = 1$. On cherche donc à approcher $\displaystyle\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$ lorsque f est une fonction continue de $[0,1]$ dans $\mathbb{R}$.

Q 1. Déterminer l'ordre de la formule de quadrature $\mathrm{I}_0(f) = f(0)$ et représenter graphiquement l'erreur associée $e(f)$.

Q 2. Faire de même avec la formule de quadrature $\mathrm{I}_0(f) = f(1/2)$.

Q 3. Déterminer les coefficients $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ pour que la formule $\mathrm{I}_2(f) = \lambda_0 f(0) + \lambda_1 f(1/2) + \lambda_2 f(1)$ soit exacte sur $\mathbb{R}_2[X]$. Cette formule de quadrature est-elle d'ordre 2 ?

I. B – Construction de formules d'ordre quelconque

On revient au cas général.
Soit $n \in \mathbb{N}$. On considère $n+1$ points distincts dans I, notés $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, et une fonction continue f de I dans $\mathbb{R}$.

Q 4. Montrer que l'application linéaire $\varphi : \left| \begin{array}{ccc} \mathbb{R}_n[X] & \to & \mathbb{R}^{n+1} \\ \mathrm{P} & \mapsto & (\mathrm{P}(x_0), \mathrm{P}(x_1), \dots, \mathrm{P}(x_n)) \end{array} \right.$ est un isomorphisme.

Q 5. Montrer que, pour tout $i \in [\![1,n]\!]$, il existe un unique polynôme $\mathrm{L}_i \in \mathbb{R}_n[X]$ tel que

$$\forall j \in [\![1,n]\!], \quad \mathrm{L}_i(x_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } j \neq i, \\ 1 & \text{si } j = i. \end{cases}$$

Q 6. Montrer que $(\mathrm{L}_0,\dots,\mathrm{L}_n)$ est une base de $\mathbb{R}_n[X]$.
Cette base est appelée *base de Lagrange associée aux points* $(x_0,\dots,x_n)$.

Q 7. On suppose que, pour tout $k\in\mathbb{N}$, $x\mapsto x^k w(x)$ est intégrable sur I. Montrer que la formule de quadrature $\mathrm{I}_n(f)=\sum_{j=0}^{n}\lambda_j f(x_j)$ est exacte sur $\mathbb{R}_n[X]$ si, et seulement si,

$$\forall j\in[\![1,n]\!],\quad \lambda_j=\int_{\mathrm{I}}\mathrm{L}_j(x)w(x)\,\mathrm{d}x$$

Q 8. On se place dans le cas $\mathrm{I}=[0,1]$ et $\forall x\in\mathrm{I}$, $w(x)=1$. Déterminer la base de Lagrange associée aux points $(0,1/2,1)$ et retrouver ainsi les coefficients de la formule de quadrature $\mathrm{I}_2(f)$ de la question 3.

I. C – Noyau de Peano et évaluation de l'erreur

Dans cette sous-partie, on suppose que l'intervalle I est un segment : $\mathrm{I}=[a,b]$, avec $a<b$.
Pour tout entier naturel m, on considère la fonction $\varphi_m:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}$ définie par

$$\forall(x,t)\in\mathbb{R}^2,\quad \varphi_m(x,t)=\begin{cases}(x-t)^m & \text{si } x\geqslant t,\\ 0 & \text{si } x<t.\end{cases}$$

On observe que φ_m est continue si $m\geqslant 1$ et discontinue si $m=0$.
On considère une formule de quadrature $\mathrm{I}_n(f)=\sum_{j=0}^{n}\lambda_j f(x_j)$.
On note $m\in\mathbb{N}$ l'ordre de cette formule et on cherche à évaluer l'erreur associée :

$$e(f)=\int_a^b f(x)w(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{j=0}^{n}\lambda_j f(x_j)$$

On suppose que f est de classe $\mathscr{C}^{m+1}$ sur I.

Q 9. À l'aide de la formule de Taylor avec reste intégral, montrer que $e(f)=e(\mathrm{R}_m)$, où R_m est définie par

$$\forall x\in[a,b],\quad \mathrm{R}_m(x)=\frac{1}{m!}\int_a^b\varphi_m(x,t)f^{(m+1)}(t)\,\mathrm{d}t$$

Q 10. En déduire que, si $m\geqslant 1$,

$$e(f)=\frac{1}{m!}\int_a^b\mathrm{K}_m(t)f^{(m+1)}(t)\,\mathrm{d}t$$

où la fonction $\mathrm{K}_m:[a,b]\to\mathbb{R}$ est définie par

$$\forall t\in[a,b],\quad \mathrm{K}_m(t)=e\big(x\mapsto\varphi_m(x,t)\big)=\int_a^b\varphi_m(x,t)w(x)\,\mathrm{d}x-\sum_{j=0}^{n}\lambda_j\varphi_m(x_j,t)$$

On pourra utiliser le résultat admis suivant : pour toute fonction continue $g:[a,b]^2\to\mathbb{R}$, on a

$$\int_a^b\left(\int_a^b g(x,t)dt\right)\mathrm{d}x=\int_a^b\left(\int_a^b g(x,t)\,\mathrm{d}x\right)\mathrm{d}t$$

La fonction K_m est appelée *noyau de Peano associé à la formule de quadrature.*
On admet que cette expression de $e(f)$ reste valable pour $m=0$.

I. D – Exemple : méthode des trapèzes

Dans cette sous-partie, on suppose que I est un segment et $\forall x\in\mathrm{I}$, $w(x)=1$.
On se place d'abord dans le cas $\mathrm{I}=[0,1]$ et on considère la formule de quadrature

$$\mathrm{I}_1(g)=\frac{g(0)+g(1)}{2}$$

qui est d'ordre $m=1$ (on ne demande pas de le montrer).

Q 11. Calculer le noyau de Peano associé $t \mapsto \mathrm{K}_1(t)$ et montrer que, pour tout fonction g de classe $\mathscr{C}^2$ de $[0,1]$ dans $\mathbb{R}$, on a la majoration suivante de l'erreur de quadrature associée :

$$|e(g)| \leqslant \frac{1}{12} \sup_{x\in[0,1]} |g''(x)|$$

On se place maintenant dans le cas d'un segment quelconque $\mathrm{I} = [a,b]$ (avec $a < b$), qu'on subdivise en $n+1$ points $a_0, \ldots, a_n$ équidistants :

$$\forall i \in [\![1,n]\!], \quad a_i = a + ih$$

où $h = \dfrac{b-a}{n}$ est le pas de la subdivision.
On considère alors la formule de quadrature

$$\mathrm{T}_n(f) = \frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(a_i) + f(a_{i+1})}{2}$$

appelée *méthode des trapèzes*. L'erreur de quadrature associée est notée :

$$e_n(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - \mathrm{T}_n(f)$$

Q 12. Représenter graphiquement $\mathrm{T}_n(f)$.

Q 13. On suppose que f est une fonction de classe $\mathscr{C}^2$ de $[a,b]$ dans $\mathbb{R}$. Montrer que

$$e_n(f) = \frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^{n-1} e(g_i)$$

où e est l'erreur associée à la formule de quadrature I_1 étudiée à la question 11 et les $g_i : [0,1] \to \mathbb{R}$ sont des fonctions à préciser.

Q 14. En déduire la majoration d'erreur

$$|e_n(f)| \leqslant \frac{(b-a)^3}{12n^2} \sup_{x\in[a,b]} |f''(x)|$$

II Polynômes orthogonaux et applications

Dans la suite, on note E l'ensemble des fonctions f continues de I dans $\mathbb{R}$ telles que $f^2 w$ est intégrable sur I.

II. A – Étude d'un produit scalaire

Q 15. Montrer que, pour toutes fonctions f et g de E, le produit fgw est intégrable sur I.
On pourra utiliser l'inégalité $\forall (a,b) \in \mathbb{R}^2$, $|ab| \leqslant \frac{1}{2}(a^2+b^2)$, après l'avoir justifiée.

Q 16. Montrer que E est un $\mathbb{R}$-espace vectoriel.

Pour toutes fonctions f et g de E, on pose

$$\langle f \mid g \rangle = \int_{\mathrm{I}} f(x)g(x)w(x)\,\mathrm{d}x$$

Q 17. Montrer qu'on définit ainsi un produit scalaire sur E.

Dans la suite, on munit E de ce produit scalaire et on note $\|\cdot\|$ la norme associée.

II.B – Polynômes orthogonaux associés à un poids

On suppose que, pour tout entier $k \in \mathbb{N}$, la fonction $x \mapsto x^k w(x)$ est intégrable sur I. Cela entraine par linéarité de l'intégrale que E contient toutes les fonctions polynomiales.
On admet qu'il existe une unique suite de polynômes $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ telle que

(a) pour tout $n \in \mathbb{N}$, p_n est unitaire ;

(b) pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\deg(p_n) = n$;

(c) la famille $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est orthogonale pour le produit scalaire $\langle \cdot \mid \cdot \rangle$, autrement dit $\langle p_i \mid p_j \rangle = 0$, pour $i \neq j \in \mathbb{N}$.

On dit que les (p_n) sont les *polynômes orthogonaux associés au poids w.*
On s'intéresse aux racines des polynômes p_n.
On rappelle que $\mathring{\mathrm{I}}$ désigne l'intérieur de I, c'est-à-dire l'intervalle I privé de ses éventuelles extrémités.
On a donc $\mathring{\mathrm{I}} =]a,b[$, où $a = \inf(\mathrm{I}) \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ et $b = \sup(\mathrm{I}) \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$.
Soit $n \in \mathbb{N}^*$. On note $x_1, \dots, x_k$ les racines distinctes de p_n qui sont dans $\mathring{\mathrm{I}}$ et $m_1, \dots, m_k$ leurs multiplicités respectives. On considère le polynôme

$$q(\mathrm{X}) = \prod_{i=1}^{k} (\mathrm{X} - x_i)^{\varepsilon_i}, \quad \text{avec } \varepsilon_i = \begin{cases} 1 & \text{si } m_i \text{ est impair} \\ 0 & \text{si } m_i \text{ est pair.} \end{cases}$$

Q 18. En étudiant $\langle p_n \mid q \rangle$, montrer que p_n possède n racines distinctes dans $\mathring{\mathrm{I}}$.

II.C – Applications : méthodes de quadrature de Gauss

Considérons une formule de quadrature

$$\mathrm{I}_n(f) = \sum_{j=0}^{n} \lambda_j f(x_j)$$

où $n \in \mathbb{N}$, $\lambda_0, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ et $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ sont $n+1$ points distincts dans I.
On suppose que les coefficients $(\lambda_j)_{0\leqslant j\leqslant n}$ sont choisis comme à la question 7 :

$$\forall j \in [\![1, n]\!], \quad \lambda_j = \int_{\mathrm{I}} \mathrm{L}_j(x) w(x)\,\mathrm{d}x$$

où $(\mathrm{L}_0, \dots, \mathrm{L}_n)$ est la base de Lagrange associée aux points $(x_0, \dots, x_n)$ (définie dans la partie I).
Ainsi, la formule $\mathrm{I}_n(f)$ est d'ordre $m \geqslant n$. Nous allons montrer que dans ces conditions, il existe un unique choix des points $(x_i)_{0\leqslant i\leqslant n}$ qui permet d'obtenir l'ordre m le plus elevé possible.

Q 19. En raisonnant avec le polynôme $\displaystyle\prod_{i=0}^{n} (\mathrm{X} - x_i)$, montrer que $m \leqslant 2n + 1$.

Q 20. Montrer que $m = 2n+1$ si et seulement si les x_i sont les racines de p_{n+1}.

II.D – Exemple 1

On se place ici dans le cas où $\mathrm{I} = [-1, 1]$ et $w(x) = 1$.
On est donc bien dans les conditions d'application des résultats précédemment obtenus.

Q 21. Déterminer les quatre premiers polynômes orthogonaux (p_0, p_1, p_2, p_3) associés au poids w.

Q 22. En déduire explicitement une formule de quadrature d'ordre 5 (on déterminera les points x_j et les coefficients λ_j).

II.E – Exemple 2

Dans cette sous-partie, $\mathrm{I} =]-1, 1[$ et $w(x) = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$.

Q 23. Montrer que, pour tout entier $k \in \mathbb{N}$, la fonction $x \mapsto x^k w(x)$ est intégrable sur I.
Cela entraine que E contient toutes les fonctions polynomiales.

Dans la suite, on considère, pour tout entier $n \in \mathbb{N}$, la fonction $\mathrm{Q}_n : \left| \begin{array}{rcl} [-1,1] & \to & \mathbb{R} \\ x & \mapsto & \cos(n \arccos(x)) \end{array} \right.$

Q 24. Calculer $\mathrm{Q}_0, \mathrm{Q}_1$ et pour tout $n \in \mathbb{N}$, exprimer simplement Q_{n+2} en fonction de Q_{n+1} et Q_n.

Q 25. En déduire que, pour tout $n \in \mathbb{N}$, Q_n est polynomiale et déterminer son degré et son coefficient dominant.

Dans la suite, on notera également Q_n le polynôme de $\mathbb{R}[\mathrm{X}]$ qui coïncide avec $x \mapsto \mathrm{Q}_n(x)$ sur $[-1, 1]$.

Q 26. On note $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la suite de polynômes orthogonaux associés au poids w. Montrer que

$$\begin{cases} p_0 = \mathrm{Q}_0 \\ \forall n \in \mathbb{N}^*, \quad p_n = \dfrac{1}{2^{n-1}}\mathrm{Q}_n. \end{cases}$$

Q 27. Pour $n \in \mathbb{N}$, déterminer explicitement les points $(x_j)_{0\leqslant j\leqslant n}$ de I telle que la formule de quadrature $\mathrm{I}_n(f) = \sum_{j=0}^{n} \lambda_j f(x_j)$ soit d'ordre maximal.

III Accélération de la méthode des trapèzes

On dit qu'une fonction S définie sur une partie de $\mathbb{C}$ est *développable en série entière au voisinage de 0* s'il existe un disque ouvert D non vide de centre 0 et une suite complexe $(\alpha_n)_{n\in\mathbb{N}}$ telle que $\forall z \in \mathrm{D}, \quad \mathrm{S}(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n z^n$.

III.A – Nombres b_m et polynômes B_m

On considère une série entière $\sum_{n\geqslant 0} \alpha_n z^n$, de rayon de convergence $\mathrm{R} \neq 0$ et avec $\alpha_0 = 1$. On note S la somme de cette série entière sur son disque de convergence : pour tout $z \in \mathbb{C}$ vérifiant $|z| < \mathrm{R}$, on a

$$\mathrm{S}(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n z^n$$

Q 28. Montrer qu'il existe un réel $q > 0$ tel que $\forall n \in \mathbb{N}, |\alpha_n| \leqslant q^n$.

Q 29. On suppose que $\frac{1}{\mathrm{S}}$ est développable en série entière au voisinage de 0 et on note $\sum_{n\geqslant 0} \beta_n z^n$ son développement. Calculer β_0 et, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$, exprimer β_n en fonction de $\alpha_1, \ldots, \alpha_n, \beta_1, \ldots, \beta_{n-1}$.
En déduire que

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad |\beta_n| \leqslant (2q)^n$$

Q 30. Montrer que $\frac{1}{\mathrm{S}}$ est développable en série entière au voisinage de 0.

Q 31. En utilisant ce qui précède, montrer qu'il existe une unique suite complexe $(b_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et un réel $r > 0$ tels que, pour tout $z \in \mathbb{C}$,

$$0 < |z| < r \implies \frac{z}{e^z - 1} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{b_n}{n!} z^n$$

Q 32. En effectuant un produit de Cauchy, montrer que $b_0 = 1$ et, pour tout entier $n \geqslant 2$,

$$\sum_{p=0}^{n-1} \binom{n}{p} b_p = 0$$

Q 33. En déduire la valeur de b_1, b_2, b_3 et b_4.

Q 34. En utilisant un argument de parité, montrer que $b_{2p+1} = 0$ pour tout entier $p \geqslant 1$.

Dans la suite du problème, on considère les polynômes B_m définis par

$$\forall m \in \mathbb{N}, \quad \mathrm{B}_m(x) = \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} b_k x^{m-k}$$

On remarque que chaque polynôme B_m est unitaire de degré m et que, pour tout $m \in \mathbb{N}$, $\mathrm{B}_m(0) = b_m$.

Q 35. Déterminer B_0, B_1, B_2 et B_3.

Q 36. Montrer que, pour tout entier $m \geqslant 2$, $\mathrm{B}_m(1) = b_m$, puis que, pour tout entier $m \geqslant 1$, $\mathrm{B}'_m = m\mathrm{B}_{m-1}$.

III. B – Développement asymptotique de l'erreur dans la méthode des trapèzes

Dans cette sous-partie, on utilise les nombres b_m et les polynômes B_m définis dans la sous-partie III.A pour établir un développement asymptotique à tout ordre de l'erreur de quadrature associée à la méthode des trapèzes (déjà étudiée dans la partie I), pour une fonction suffisament régulière.
Pour tout réel x, on note $\lfloor x \rfloor$ sa partie entière.
On fixe un entier $n \in \mathbb{N}^*$ et on considère une fonction $g : [0, n] \to \mathbb{R}$ de classe $\mathscr{C}^\infty$.

Q 37. Montrer que

$$\int_0^n g(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{g(k)+g(k+1)}{2} - \int_0^n \mathrm{B}_1(x - \lfloor x \rfloor) g'(x)\,\mathrm{d}x$$

Q 38. En déduire que pour tout entier $m \geqslant 2$,

$$\int_0^n g(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{g(k)+g(k+1)}{2} + \sum_{p=2}^{m} \frac{(-1)^{p-1} b_p}{p!} (g^{(p-1)}(n) - g^{(p-1)}(0)) + \frac{(-1)^m}{m!} \int_0^n \mathrm{B}_m(x - \lfloor x \rfloor) g^{(m)}(x)\,\mathrm{d}x$$

On considère maintenant une fonction $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ de classe $\mathscr{C}^\infty$ et la formule de quadrature déjà étudiée à la partie I :

$$\mathrm{T}_n(f) = h \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(a_i) + f(a_{i+1})}{2}$$

(méthode des trapèzes), où $h = \dfrac{b-a}{n}$ et $\forall i \in [\![1, n]\!]$, $a_i = a + ih$

Q 39. Montrer que, pour tout entier $m \geqslant 1$,

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \mathrm{T}_n(f) - \sum_{p=1}^{m} \frac{\gamma_{2p}}{n^{2p}} + \rho_{2m}(n)$$

où les coefficients γ_{2p} sont donnés par

$$\gamma_{2p} = \frac{(b-a)^{2p} b_{2p}}{(2p)!} (f^{(2p-1)}(b) - f^{(2p-1)}(a))$$

et $\rho_{2m}(n)$ est un reste intégral vérifiant la majoration

$$|\rho_{2m}(n)| \leqslant \frac{\mathrm{C}_{2m}}{n^{2m}}$$

où C_{2m} est une constante à préciser ne dépendant que de m, a et b.

On a donc établi, pour tout entier $m \geqslant 1$, le développement asymptotique

$$\mathrm{T}_n(f) \underset{n \to +\infty}{=} \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x + \frac{\gamma_2}{n^2} + \frac{\gamma_4}{n^4} + \cdots + \frac{\gamma_{2m}}{n^{2m}} + \mathrm{O}\left(\frac{1}{n^{2(m+1)}}\right)$$

où les coefficients γ_{2p} sont indépendants de n.