Quadrature de Gauss-Legendre

Baptiste Dugué

Leçons concernées (2024) :
- 144 : Racines d'un polynôme. Fonctions symétriques élémentaires. Exemples et applications
- 159 : Formes linéaires et dualité en dimension finie. Exemples et applications.
- 209 : Approximation d'une fonction par des fonctions régulières. Exemples d'applications.
- 236 : Illustrer par des exemples quelques méthodes de calcul d'intégrales de fonctions d'une ou plusieurs variables.
- 218 : Formules de Taylor. Exemples et applications.

L'objectif de ce développement mixte est de présenter la théorie élémentaire derrière une méthode de calcul approché d'intégrales, la méthode de quadrature de Gauss. Dans les faits, il y a plusieurs variantes pour cette méthode dans lesquelles on peut choisir de faire intervenir des fonctions de poids pour garantir de bonnes propriétés. Ce ne sont pas des choses auxquelles je me suis intéressé cette année donc je n'en parle pas ici et je ne mets "pas de poids", ou plutôt je prends un poids constant, ce qui justifie de parler ici plus spécifiquement de "méthode de Gauss-Legendre".

Même s'il n'est à mon avis pas très difficile, ce développement requiert pas mal de mise en place, et je pense qu'il est ambitieux de tout présenter en 15 minutes. À vous de choisir quoi raconter, quoi développer, quoi admettre en fonction de la leçon dans laquelle vous présentez tout ça (notamment en fonction de si vous préparez un oral d'algèbre ou d'analyse).

Soit $n \in \mathbb{N}^*$ un entier naturel. On munit l'ensemble $\mathbb{R}_n[X]$ des polynômes à coefficients réels de degré inférieur ou égal à n du produit scalaire où pour tous polynômes $P, Q \in \mathbb{R}_n[X]$, on a :

$$< P, Q >= \int_{-1}^{1} P(t)Q(t)dt.$$

Soit $(P_k)_{0\leq k\leq n}$ la base orthonormée de $\mathbb{R}_n[X]$ obtenue en appliquant le procédé de Gram-Schmidt à la base canonique $(1, X, \ldots, X^n)$ [1].

On va d'abord montrer comment calculer l'intégrale d'un polynôme quelconque (mais de degré pas trop grand quand même) à partir de simples évaluations dudit polynôme et du calcul de l'intégrale de polynômes interpolateurs. Bien entendu, ceci est en soi complètement inutile, puisque tout le monde sait intégrer exactement un polynôme sans toute cette machinerie. Le vrai intérêt de tout ça apparaîtra dans la deuxième partie du développement où l'on proposera une application au calcul approché de l'intégrale sur $[-1, 1]$ d'une fonction $\mathscr{C}^{2n}$ quelconque.

Lemme 1. *Le polynôme P_n possède n racines distinctes dans $]-1, 1[$.*

....

Démonstration. Notons $\rho = \{\alpha \text{ racine de } P_n \text{ de multiplicité impaire}, \alpha \in]-1, 1[\}$, et montrons que le cardinal de ρ vaut n. On pose $R_n := \prod_{\alpha\in\rho} X - \alpha$. Par construction, les polynômes P_n et R_n ne sont pas identiquement nuls sur $]-1, 1[$, donc leur produit P_nR_n non plus, et celui-ci y est a fortiori de signe constant puisque l'on peut écrire

$$P_nR_n = \prod_{\alpha\in\rho}(X - \alpha)^{2k_\alpha} Q_1Q_2$$

où les k_α sont des entiers, ce qui fait que le terme $\prod_{\alpha\in\rho}(X - \alpha)^{2k_\alpha}$ est positif sur $]-1, 1[$ comme produit de polynômes positifs puisque carrés, où Q_1 est un polynôme égal au produit des $(X - \beta)^{k_\beta}$ pour les β racines de multiplicités k_β paires de P_n dans $]-1; 1[$, qui est donc aussi un polynôme positif sur $]-1; 1[$, et de Q_2 un polynôme ne s'annulant pas sur $]-1, 1[$, donc de signe constant par le théorème des valeurs intermédiaires.

1. Les polynômes ainsi obtenus sont appelés polynômes de Legendre, d'où le nom de ce développement.

En particulier, on a donc $< P_n, R_n >\neq 0$, donc $R_n \notin P_n^\perp$. Or, par construction (algorithme de Gram-Schmidt), on a $P_n^\perp = \mathbb{R}_{n-1}[X]$, et donc comme P_n est de degré n, R_n l'est aussi nécessairement, et donc on a bien $\sharp\rho = n$. □

....

Notons donc $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ les racines de P_n, $L_1, \dots, L_n$ les polynômes interpolateurs de Lagrange associés à cette famille (i.e. les polynômes de degré $n-1$ tels que pour tous indices i, j, on ait $L_i(\alpha_j) = \delta_{i,j}$) et pour tout $i \in \{1, \dots, n\}$, $\lambda_i = \int_{-1}^1 L_i(t)dt$.

Proposition 2. *Pour tout polynôme $P \in \mathbb{R}_{2n-1}[X]$, on a*

$$\int_{-1}^1 P(t)dt = \sum_{i=1}^n \lambda_i P(\alpha_i).$$

....

Démonstration. On va découper la preuve en trois étapes en commençant d'abord par traiter les cas de polynômes de degrés inférieurs à $n-1$, puis de degré n, avant de traiter le cas général.

Tout part d'un argument de dualité : les évaluations $(ev_{\alpha_1}, \dots, ev_{\alpha_n})$ forment une base du dual de $\mathbb{R}_{n-1}[X]$, de base préduale les $(L_1, \dots, L_n)$.

Pour montrer le résultat sur $\mathbb{R}_{n-1}[X]$, on considère simplement l'application linéaire

$$\varphi : \left| \begin{array}{ccc} \mathbb{R}_{n-1}[X] & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ P & \longmapsto & \int_{-1}^1 P(t)dt \end{array} \right.$$

que l'on décompose selon la base que l'on s'est donnée plus haut : $\varphi = \sum_{j=1}^n \beta_j ev_{\alpha_j}$. On trouve facilement la valeur des β_i :

$$\lambda_i = \varphi(L_i) = \sum_{j=1}^n \beta_j L_i(\alpha_j) = \beta_i.$$

D'où finalement $\varphi(P) = \sum_{i=1}^n \lambda_i P(\alpha_i)$ pour tout $P \in \mathbb{R}_{n-1}[X]$

Maintenant, on sait aussi que la formule est vérifiée pour P_n : on a en effet [2]

$$\int_{-1}^1 P_n(t)dt =< P_n, 1 >=< P_n, P_0 >= 0,$$

par orthogonalité de la famille obtenue avec Gram-Schmidt, et $\sum_{i=1}^n \lambda_i P_n(\alpha_i) = 0$ par construction des α_i. Comme P_n est de degré n, finalement par linéarité la formule est vérifiée sur tout $\mathbb{R}_n[X]$.

Soit maintenant $P \in \mathbb{R}_{2n-1}[X]$. On effectue la division euclidienne de P par P_n : $P = P_n Q_n + R_n$. On a $\deg(Q_n) = n-1$ donc $Q_n \in P_n^\perp$, et $R_n \in \mathbb{R}_{n-1}[X]$, d'où

$$\int_{-1}^1 P(t)dt = \int_{-1}^1 P_n(t)Q_n(t)dt + \int_{-1}^1 R_n(t)dt =< P_n, Q_n > +\varphi(R_n) = \sum_{i=1}^n \lambda_i R_n(\alpha_i).$$

Petit coup de baguette magique pour écrire $R_n = P - P_n Q_n$, et on trouve ainsi en se rappelant que $P_n(\alpha_i) = 0$:

$$\int_{-1}^1 P(t)dt = \sum_{i=1}^n \lambda_i (P(\alpha_i) - P_n(\alpha_i)Q_n(\alpha_i)) = \sum_{i=1}^n \lambda_i P(\alpha_i).$$

Youpi, on a fini ! Mais avant de passer à la suite, prenons le temps de noter un petit outil surprise qui nous aidera plus tard : les λ_i sont tous strictement positifs. En effet, on a pour tout i, $L_i^2 \in \mathbb{R}_{2n-1}[X]$, donc $0 < \int_{-1}^1 L_i^2(t)dt = \sum_{j=1}^n \lambda_j L_i^2(\alpha_j) = \lambda_i$. □

....

2. Gram-Schmidt ne modifie pas le premier vecteur de la base !

On s'attaque maintenant au cœur du développement, ou du moins au résultat utile en pratique, l'approximation de la valeur d'une intégrale d'une fonction suffisamment régulière.

Théorème 3. *Pour $f \in \mathscr{C}^{2n}([-1,1],\mathbb{R})$, on note $I(f) := \int_{-1}^{1} f(t)dt$ et $S_n(f) := \sum_{i=1}^{n} \lambda_i f(\alpha_i)$. Alors*

$$|I(f) - S_n(f)| \leq \frac{4M}{(2n+1)!}, \text{ avec } M := \max_{x\in[-1,1]} |f^{(2n)}(x)|.$$

....

Démonstration. On part de la formule de Taylor-Lagrange pour f. Pour un certain c dans $]-1;1[$, on a :

$$f(x) = \sum_{k=0}^{2n-1} (f^{(k)}(0)\frac{x^k}{k!}) + \frac{x^{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(c).$$

Notons $P_n(x) := \sum_{k=0}^{2n-1} f^{(k)}(0)\frac{x^k}{k!}$ (c'est donc un polynôme de degré $2n-1$) et $u(x) := \frac{x^{2n}}{(2n)!} f^{(2n)}(c)$. Par la proposition précédente, on a donc

$$|I(f) - S_n(f)| = |\underbrace{I(P_n)}_{= S_n(P_n) \text{ par la proposition}} + I(u) - S_n(P_n) - S_n(u)| = |I(u) - S_n(u)| \leq |I(u)| + |S_n(u)|.$$

On va donc chercher à majorer $|I(u)|$ et $|S_n(u)|$. Pour $|I(u)|$ c'est facile, on majore brutalement :

$$|I(u)| = |\int_{-1}^{1} u(t)dt| \leq \int_{-1}^{1} |u(t)|dt \leq \frac{M}{(2n)!} 2 \int_0^1 t^{2n} dt = \frac{2M}{(2n+1)!}.$$

Vu le résultat final, on se doute qu'on veut trouver la même majoration pour $|S_n(u)|$. En avant Guingamp !

Par inégalité triangulaire, on a

$$|S_n(u)| = |\sum_{i=1}^{n} \lambda_i u(\alpha_i)| \leq \sum_{i=1}^{n} |\lambda_i u(\alpha_i)|.$$

Or, pour tout i, on a $\lambda_i > 0$ (c'est notre fameux outil surprise !), donc en notant X^{2n} l'élévation à la puissance $2n$:

$$|S_n(u)| \leq \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \frac{M}{(2n)!} \alpha_i^{2n} = \frac{M}{(2n)!} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \alpha^{2n} = \frac{M}{(2n)!} S_n(X^{2n}).$$

On cherche donc maintenant à majorer $S_n(X^{2n})$. Nous, on sait dire des choses sur des polynômes de degrés plus petits, et en particulier S_n est construit à l'aide des racines de P_n. On se ramène donc à ce cas en posant la division euclidienne par P_n. Notons $X^{2n} = P_n Q + R$ avec $\deg(R) \leq n-1$. On a alors

$$S_n(X^{2n}) = \underbrace{S_n(P_n Q)}_{=0} + \underbrace{S_n(R)}_{= I(R)}.$$

Or $I(R) = I(X^{2n}) - I(P_n Q) = \frac{2}{2n+1} - I(P_n Q)$. Montrons que la quantité $I(P_n Q)$ est positive. Par construction, le polynôme $P_n Q$ est unitaire (le terme dominant est le même que celui de X^{2n}) et P_n et Q sont de même degré, donc si a_n est le terme dominant de P_n, on a la division euclidienne suivante :

$$Q = \frac{1}{a_n^2} P_n + S \text{ avec } \deg(S) \leq n-1.$$

On en déduit donc $I(P_n Q) = \frac{1}{a_n^2} I(P_n^2) + \underbrace{I(P_n S)}_{= S_n(P_n S) = 0} = \frac{1}{a_n^2} I(\underbrace{P_n^2}_{\text{continue}, \geq 0}) > 0.$

Ainsi, $S_n(X^{2n}) = I(R) \leq \frac{2}{2n+1}$, et finalement, $|S_n(u)| \leq \frac{2M}{(2n+1)!}$.

En regroupant les deux inégalités, on arrive bien à celle annoncée dans le théorème, youpi ! :-) □

....

Sources : Carnet de voyage en Algébrie pour la partie sur la dualité, Carnet de voyage en Analystan pour la méthode de quadrature (attention, il y a pas mal de coquilles...)