Méthode de quadrature de Gauss

Référence : [Dem06].

Soit ω une fonction poids sur l'intervalle $]\alpha,\beta[$. On considère une méthode d'intégration du type :

$$\int_\alpha^\beta f(x)dx \simeq \sum_{j=0}^{l} \lambda_j f(x_j)$$

où $x_j \in]\alpha,\beta[$ et f est une fonction au moins continue sur $]\alpha,\beta[$ à valeurs dans $\mathbb{R}$.
On note $\mathcal{P}_l$ l'espace vectoriel des fonctions polynômes sur $\mathbb{R}$ à coefficients réels de degré inférieur ou égal à l.

Théorème 0.1 *Il existe un et un seul choix des points x_j et des coefficients λ_j de sorte que la méthode soit d'ordre $N = 2l+1$. De plus les points x_j appartiennent à $]\alpha,\beta[$ et sont les racines du $(l+1)$-ième polynôme orthogonal pour le poids ω.*
De plus, on a une formule exacte pour l'erreur si $f \in C^{2l+2}([\alpha,\beta])$, il existe $\xi \in]\alpha,\beta[$ tel que :

$$E(f) = \frac{f^{(2l+2)}(\xi)}{(2l+2)!}\int_\alpha^\beta \pi_{l+1}^2(x)\omega(x)dx$$

Démonstration

Unicité
Supposons qu'on ait des points x_j et des coefficients λ_j pour lesquels la méthode est d'ordre supérieur ou égal à $2l+1$.
Posons :

$$\pi_{l+1}(x) = \prod_{j=0}^{l}(x - x_j)$$

Pour tout $p \in \mathcal{P}_l$, on a $\deg(p\pi_{l+1}) \leq 2l+1$, donc :

$$\int_\alpha^\beta p(x)\pi_{l+1}(x)\omega(x)dx = \sum_{j=0}^{l}\lambda_j p(x_j)\pi_{l+1}(x_j) = 0$$

car $\forall j = 0,\ldots,l$, x_j est racine de π_{l+1}.
Ceci entraîne que π_{l+1} est orthogonal à $\mathcal{P}_l$ (pour le produit scalaire associé à ω) et comme π_{l+1} est unitaire par définition, c'est donc le $(l+1)$-ième polynôme orthogonal associé au poids ω (par unicité de tels polynômes).
Soit $L_i \in \mathcal{P}_l$ définis par :

$$\begin{aligned} L_i(x_j) &= 1 \quad \text{si } i = j\,; \\ L_i(x_j) &= 0 \quad \text{si } i \neq j. \end{aligned}$$

Les coefficients λ_i sont alors nécessairement donnés par :

$$\lambda_i = \sum_{j=0}^{l}\lambda_j L_i(x_j) = \int_\alpha^\beta L_i(x)\omega(x)dx$$

Ces coefficients sont donc eux aussi uniques.

Existence

$\rightsquigarrow$ **Montrons l'existence et que la méthode est d'ordre $\geq l$.** On sait que le polynôme orthogonal $\pi_{l+1} \in \mathcal{P}_{l+1}$ possède $l+1$ racines distinctes dans $]\alpha, \beta[$. Soient $x_0, \ldots, x_l$ ces racines et soient :

$$\lambda_j = \int_\alpha^\beta L_i(x)\omega(x)dx$$

Si $f \in C^0([\alpha, \beta])$ le polynôme d'interpolation de Lagrange est :

$$p_l(x) = \sum_{j=0}^{l} f(x_j)L_j(x)$$

par définition des coefficients λ_j, on a donc :

$$\int_\alpha^\beta p_l(x)\omega(x)dx = \int_\alpha^\beta \sum_{j=0}^{l} f(x_j)L_j(x)\omega(x)dx = \sum_{j=0}^{l} \lambda_j f(x_j)$$

(via l'interversion d'une somme finie et d'une intégrale sur un segment).
Ainsi si $f \in \mathcal{P}_l$, alors $p_l = f$ donc la méthode est d'ordre supérieur ou égal à l.
$\rightsquigarrow$ **Montrons que la méthode est d'ordre $\geq 2l+1$.** Si $f \in \mathcal{P}_{2l+1}$, la division euclidienne de f par π_{l+1} donne :

$$f(x) = q(x)\pi_{l+1}(x) + r(x)$$

avec $\deg q \leq l$ et $\deg r \leq l$.
Comme π_{l+1} est orthogonal à $\mathcal{P}_l$, il vient :

$$\int_\alpha^\beta q(x)\pi_{l+1}(x)\omega(x)dx = 0$$

D'où :

$$\int_\alpha^\beta f(x)\omega(x)dx = \int_\alpha^\beta r(x)\omega(x)dx = \sum_{j=0}^{l} \lambda_j r(x_j)$$

Comme $f(x_j) = r(x_j)$ (car x_j racines de π_{l+1}), on a $E(f) = 0$.
$\rightsquigarrow$ **Montrons que l'ordre n'est pas $> 2l+1$.** Pour cela, montrons que le noyau de Peano K_{2l+1} est positif et qu'on a l'égalité du théorème.
D'après un lemme sur la forme de l'erreur, on sait que, comme $f \in C^{2l+2}([\alpha, \beta])$:

$$E(f) = \frac{1}{(2l+1)!}\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)f^{(2l+2)}(t)dt$$

Inversement, si $\phi \in C^0([\alpha, \beta])$, on a :

$$\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)\phi(t)dt = (2l+1)!E(\Phi)$$

où Φ est une primitive d'ordre $2l+2$ de ϕ.
Supposons par l'absurde qu'il existe $t_0 \in [\alpha, \beta]$ tel que $K_{2l+1}(t_0) < 0$.
On pose $K_{2l+1}^- = \max(-K_{2l+1}, 0) \in C^0([\alpha, \beta])$ la partie négative de la fonction K_{2l+1} et soit ϕ un polynôme qui approche $K_{2l+1}^- + \epsilon$ uniformément à ϵ près sur $[\alpha, \beta]$.
On a donc en particulier :

$$0 \leq K_{2l+1}^- < \phi < K_{2l+1}^- + 2\epsilon$$

ie

$$\left|\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)\phi(t)dt - \int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)K_{2l+1}^-(t)dt\right| \leq 2\epsilon\int_\alpha^\beta |K_{2l+1}(t)|dt$$

Comme :

$$\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)K_{2l+1}^-(t)dt = -\int_\alpha^\beta (K_{2l+1}(t))^2dt < 0$$

on en déduit pour ϵ petit :

$$\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)\phi(t)dt < 0$$

par définition de ϕ.
Soit Φ une primitive d'ordre $2l+2$ de ϕ. Φ est un polynôme. Écrivons la division euclidienne de Φ par π_{l+1}^2 :

$$\Phi(x) = \pi_{l+1}^2(x)q(x) + r(x)$$

avec $\deg r \leq \deg \pi_{l+1}^2 - 1 = l+1+l+1-1 = 2l+1$.
Ainsi $E(r) = 0$ d'où :

$$E(\Phi) = E(\pi_{l+1}^2 q) = \int_\alpha^\beta \pi_{l+1}^2(x)q(x)\omega(x)dx - 0$$

car π_{l+1} admet les x_j comme racines.
La formule de la moyenne nous donne alors l'existence de $\theta \in]\alpha,\beta[$ tel que :

$$E(\Phi) = q(\theta)\int_\alpha^\beta \pi_{l+1}^2(x)\omega(x)dx$$

et par ailleurs :

$$E(\Phi) = \frac{1}{(2l+1)!}\int_\alpha^\beta K_{2l+1}(t)\phi(t)dt < 0$$

On va maintenant obtenir une contradiction en montrant que $q(\theta) > 0$.
Considérons le polynôme $g(x) = \Phi(x) - r(x) - \pi_{l+1}^2(x)q(\theta) = \pi_{l+1}^2(x)(q(x)-q(\theta))$. g admet $x_0,\ldots,x_l$ comme zéros de multiplicités 2 et θ de multiplicité ≥ 1, ie au moins $2l+3$ zéros.
Ainsi d'après le théorème de Rolle, on sait qu'il existe η entre les points x_j et θ tel que $g^{(2l+2)}(\eta) = 0$.
Par suite :

$$0 = g^{(2l+2)}(\eta) = \Phi^{(2l+2)}(\eta) - (2l+2)!q(\theta) = \phi(\eta) - (2l+2)!q(\theta)$$

et comme $\phi(\eta) > 0$ (par définition de ϕ), on en déduit que $q(\theta) > 0$, ce qui fournit une contradiction !
Donc $K_{2l+1} \geq 0$ et le corollaire sur l'erreur nous donne :

$$E(f) = \frac{1}{(2l+2)!}f^{(2l+2)}(\xi)E(x \mapsto x^{2l+2})$$

Comme π_{l+1} est unitaire, on a $x^{2l+2} = \pi_{l+1}^2(x) + r(x)$ où $r \in \mathcal{P}_{2l+1}$, donc :

$$E(x \mapsto x^{2l+2}) = E(\pi_{l+1}^2) = \int_\alpha^\beta \pi_{l+1}^2(x)\omega(x)dx$$

ce qui conclut la démonstration.

Lemmes utilisés

Définition 0.1 (Poids) *Un poids ω sur $]\alpha,\beta[$ est une fonction continue, strictement positive telle que $\int_\alpha^\beta \omega(x)dx$ converge.*

Définition 0.2 (Ordre d'une méthode) *On dit qu'une méthode de quadrature est d'ordre N si la formule approchée est exacte pour tout $f \in \mathcal{P}_N$ et inexacte pour au moins un $f \in \mathcal{P}_{N+1}$.*

Proposition 0.2 (Formule de la moyenne) *Soit $\omega \geq 0$ une fonction intégrable sur $]\alpha,\beta[$ telle que $\int_\alpha^\beta \omega(x)dx$ converge. Alors pour tout $f \in C^0([\alpha,\beta])$, il existe $\xi \in]\alpha,\beta[$ tel que :*

$$\int_\alpha^\beta f(x)\omega(x)dx = f(\xi)\int_\alpha^\beta \omega(x)dx$$

Démonstration Soient m et M respectivement le minimum et le maximum de la fonction f sur $[\alpha, \beta]$.
Comme $\omega \geq 0$, on a :

$$m \int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx \leq \int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx \leq M \int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx$$

Si $\int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx = 0$, le résultat est vrai pour ξ quelconque.
Supposons donc que $\int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx > 0$ et soit alors q le quotient :

$$q = \frac{\int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx}{\int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx} \in [m, M] \quad \text{d'après la première inégalité ;}$$

Le théorème des valeurs intermédiaires montre que $f(]\alpha, \beta[)$ est un intervalle ayant pour bornes m, M. Ainsi :

- Si $q \in]m, M[$, alors il existe $\xi \in]\alpha, \beta[$ tel que $q = f(\xi)$;
- Si $q = m$ et si $f(\xi) > m$ pour tout $\xi \in]\alpha, \beta[$, alors :

$$\int_{\alpha}^{\beta} (f(x) - m)\omega(x)dx > 0$$

  puisque $\int_{\alpha}^{\beta} \omega(x)dx > 0$; ce qui est contradictoire, il existe donc $\xi \in]\alpha, \beta[$ tel que $f(\xi) = m$.
- Si $q = M$, on procède de la même façon que pour le cas précédent.

Définition 0.3 (Erreur) *L'erreur due à une méthode est donnée par :*

$$E(f) = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)\omega(x)dx - \sum_{j=0}^{l} \lambda_j f(x_j)$$

Théorème 0.3 (Formule de l'erreur) *On suppose que la méthode est d'ordre $N \geq 0$. Si f est de classe C^{N+1} sur $[\alpha, \beta]$ alors :*

$$E(f) = \frac{1}{N!} \int_{\alpha}^{\beta} K_N(t) f^{(N+1)}(t)dt$$

où K_N est une fonction sur $[\alpha, \beta]$, appelée noyau de Peano associé à la méthode, définie par :

$$K_N(t) = E(x \mapsto (x-t)_+^N)$$

pour $t \in [\alpha, \beta]$.

Démonstration On observe d'abord que $f \longmapsto E(f)$ est une forme linéaire sur $C^0([\alpha, \beta])$.
Si $g : (x, t) \longmapsto g(x, t)$ est une fonction intégrable sur $[\alpha, \beta] \times I$, le théorème de Fubini implique :

$$E\left(x \mapsto \int_{t \in I} g(x, t)dt\right) = \int_{t \in I} E(x \mapsto g(x, t))dt$$

La formule de Taylor reste intégral nous donne :

$$f(x) = p_N(x) + \int_{\alpha}^{\beta} \frac{1}{N!}(x-t)_+^N f^{(N+1)}(t)dt$$

Comme $p_N \in \mathcal{P}_N$, on a $E(p_N) = 0$ par hypothèse, d'où :

$$\begin{aligned}
E(f) &= E\left(x \mapsto \int_{\alpha}^{\beta} \frac{1}{N!}(x-t)_+^N f^{(N+1)}(t)dt\right) \\
&= \int_{\alpha}^{\beta} E\left(x \mapsto \frac{1}{N!}(x-t)_+^N f^{(N+1)}(t)dt\right) \\
&= \int_{\alpha}^{\beta} \frac{1}{N!} f^{(N+1)}(t) E\left(x \mapsto (x-t)_+^N\right) dt \\
&= \frac{1}{N!} \int_{\alpha}^{\beta} f^{(N+1)}(t) E\left(x \mapsto (x-t)_+^N\right) dt
\end{aligned}$$

Corollaire 0.3.1 *On a la majoration :*

$$E(f) \leq \frac{1}{N!} \|f^{(N+1)}\|_\infty \int_\alpha^\beta |K_N(t)| dt$$

Corollaire 0.3.2 *On suppose que K_N est de signe constant. Alors pour tout $f \in C^{N+1}([\alpha, \beta])$, il existe $\xi \in]\alpha, \beta[)$ tel que :*

$$E(f) = \frac{1}{N!} f^{(N+1)}(\xi) \int_\alpha^\beta K_N(t) dt$$

De plus :

$$\int_\alpha^\beta K_N(t) dt = \frac{1}{N+1} E(x \mapsto x^{n+1})$$

donc :

$$E(f) = \frac{1}{(N+1)!} f^{(N+1)}(\xi) E(x \mapsto x^{n+1})$$

Démonstration La première formule résulte du théorème et de la formule de la moyenne appliquée à la fonction $f^{(N+1)}$ et au poids $\omega = K_N$ (ou $\omega = -K_N$ si $K_N \leq 0$).
La deuxième égalité s'obtient en prenant $f(x) = x^{N+1}$ qui donne $f^{(N+1)}(x) = (N+1)!$.
La troisième découle des deux premières.

Cadre : Soit $]a, b[$ un intervalle ouvert borné ou non dans $\mathbb{R}$.
On se donne un poids sur $]a, b[$, ie une fonction $\omega :]a, b[\longrightarrow]0, +\infty[$ continue. On suppose en outre que pour tout $n \in \mathbb{N}$, l'intégrale $\int_a^b |x|^n \omega(x) dx$ est convergente, c'est le cas par exemple si $]a, b[$ est borné et si $\int_a^b \omega(x) dx$ converge.
Sous ces hypothèses, on considère l'espace vectoriel E des fonctions continues sur $]a, b[$ telles que :

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 \omega(x) dx} < +\infty$$

Grâce aux hypothèses faites sur E, E contient l'espace vectoriel des fonctions polynômes.
L'espace E est muni du produit scalaire naturel :

$$< f, g >= \int_a^b f(t) g(t) \omega(t) dt$$

et $\|.\|_2$ est la norme associée à ce produit scalaire.

Théorème 0.4 *Il existe une suite de polynômes unitaires $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tels que $\deg p_n = n$, orthogonaux deux à deux pour le produit scalaire de E. Cette suite est unique. Les polynômes p_n sont appelés polynômes orthogonaux pour le poids ω.*

Démonstration On construit p_n par récurrence à l'aide de Gram-Schmidt.
On a $p_0(x) = 1$ puisque p_0 doit être unitaire.
Supposons $p_0, p_1, \ldots, p_{n-1}$ déjà construits. Comme $\deg p_i = i$, ces polynômes forment une base de $\mathcal{P}_{n-1}$, on peut donc chercher p_n sous la forme :

$$p_n = x^n - \sum_{j=0}^{n-1} \lambda_{j,n} p_j(x)$$

La condition $< p_n, p_k >= 0$ pour $k = 0, \ldots, n-1$ donne :

$$< p_n, p_k >= 0 =< x^n, p_k > - \sum_{j=0}^{n-1} \lambda_{j,n} < p_j, p_k >=< x^n, p_k > - \lambda_{k,n} \|p_k\|_2^2$$

On a donc un et un seul choix possible, à savoir :

$$\lambda_{k,n} = \frac{< x^n, p_k >}{\|p_k\|_2^2}$$

Théorème 0.5 *Pour tout poids ω sur $]a, b[$, le polynôme p_n possède n racines distinctes dans l'intervalle $]a, b[$.*

Démonstration Soient $x_1, \ldots, x_k$ les zéros distincts de p_n dans $]a, b[$ et $m_1, \ldots, m_k$ leurs multiplicités respectives.
On a $m_1 + \ldots + m_k \leq \deg p_n = n$.
Posons :

$$\begin{aligned} \epsilon_i &= 0 \quad \text{si } m_i \text{ est pair ;} \\ \epsilon_i &= 1 \quad \text{si } m_i \text{ est impair.} \end{aligned}$$

et :

$$q(x) = \prod_{i=1}^{k} (x - x_i)^{\epsilon_i}$$

on a $\deg q \leq k \leq n$.
Le polynôme $p_n \times q$ admet dans $]a, b[$ les zéros x_i avec multiplicités paires $m_i + \epsilon_i$, donc $p_n \times q$ est de signe constant dans $]a, b[\backslash \{x_1, \ldots, x_k\}$. Par conséquent :

$$< p_n, q >= \int_a^b p_n(x) q(x) \omega(x) dx \neq 0$$

Comme p_n est orthogonal à $\mathcal{P}_{n-1}$, on a nécessairement $\deg q = n$, donc $k = n$ et $m_1 = \ldots = m_k = 1$.

Références

[Dem06] Jean-Pierre Demailly. *Analyse umérique et équations différentielles.* EDP sciences, 2006.