Integration et dérivation numérique.

Said EL HAJJI

Université Mohammed V - Agdal.
Faculté des Sciences
Département de Mathématiques et Informatique

Groupe d'Analyse Numérique et Optimisation Rabat
http://www.fsr.ac.ma/ANO/

Outline

1. Introduction :
2. Dérivation.
   - Dérivée première.
   - Formule générale en trois points.
   - Dérivées d'ordre supérieur.
   - Etude de l'erreur commise.
3. Méthodes numériques d'intégration.
   - Formules fermées.
   - Etude générale de l'erreur commise.
   - Formules composées.

Outline

1. Introduction :
2. Dérivation.
   - Dérivée première.
   - Formule générale en trois points.
   - Dérivées d'ordre supérieur.
   - Etude de l'erreur commise.
3. Méthodes numériques d'intégration.
   - Formules fermées.
   - Etude générale de l'erreur commise.
   - Formules composées.

Outline

Introduction

Si f est une fonction dérivable sur $[a, b]$, la dérivée en $c \in]a, b[$ est définie par:

$$f'(c) = \lim_{h \to 0} \frac{\Delta f(c)}{h}$$

$$\text{où } \Delta f(c) \; = f(c+h) - f(c)$$

Si f est une fonction continue sur $[a, b]$, l'integrale de f sur $[a, b]$ est définie par

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h \to 0} R(h)$$

$$\text{où } \; R(h) = \sum_{k=1}^{n} f(a+kh).h$$

$R(h)$ est la somme de Riemann avec $h = \frac{b-a}{n}$.

Introduction

- Il existe des fonctions simples comme $\frac{\sin x}{x}$ ou $\sqrt{\cos^2 x + 3\sin^2 x}$ qui n'ont pas de primitive connue.
- f peut-être connue seulement en quelques points et sa formule est inconnue (exp: résultats experimentaux,...),

Comment peut-on integrer de telles fonctions entre a et b?

Introduction

Si $P(x)$ est une approximation de f dans l'intervalle $[a, b]$, nous nous proposons d'étudier les approximations:

$$f'(y) \approx P'(y) \qquad y \in [a, b]$$

$$et$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P(x)dx.$$

Outline

Dérivée première.

La dérivation numérique nous permet de trouver une estimation de la dérivée ou de la pente d'une fonction, en utilisant seulement un ensemble discret de points.

Soit f une fonction connue seulement par sa valeur en $(n+1)$ points donnés $x_i \;\; i = 0, 1, ..., n$ distincts.
On suppose connue la valeur de la fonction en x_{i-1}, x_i et x_{i+1}; on pose $f(x_{i-1}) = y_{i-1}, f(x_i) = y_i$ et $f(x_{i+1}) = y_{i+1}$.
Si on suppose que l'espace entre deux points successifs est constant, donc on pose $h = x_i - x_{i-1} = x_{i+1} - x_i$.

Dérivée première.

Alors les formules standarts en deux points sont:

Formule de difference progressive :

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}.$$

Formule de difference régressive :

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}.$$

Formule de difference centrale:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}.$$

Dérivée première.

Exemple :

Pour illustrer les trois formules, considérons les données suivantes:
$(x_0, y_0) = (1, 2); (x_1, y_1) = (2, 4); (x_2, y_2) = (3, 8); (x_3, y_3) = (4, 16)$ et $(x_4, y_4) = (5, 32)$.
Nous voulons estimer la valeur de $f'(x_2)$.

1. Progressive: $f'(x) \approx \frac{f(x_3)-f(x_2)}{x_3-x_2} = \frac{16-8}{4-3} = 8.$
2. Regressive : $f'(x) \approx \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x1} = \frac{8-4}{3-2} = 4.$
3. Centrale : $f'(x) \approx \frac{f(x_3)-f(x_1)}{x_3-x1} = \frac{16-4}{4-2} = 6.$

Les données ont été calculé pour la fonction $f(x) = 2^x$.
$f'(x) = 2^x \ln(2)$ et pour $x = 3$ $f'(3) = 2^3 \ln(2) = 5.544$.

Dérivée première.

Remarque:
En utilisant la formule de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\eta).$$
$$x \leq \eta \leq x+h$$

Formule progressive:

$$h = x_{i+1} - x_i$$
$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{h}{2} f''(\eta)$$
$$x_i \leq \eta \leq x_{i+1}$$

Dérivée première.

l'erreur est $\frac{h}{2}f''(\eta)$ donc en $O(h)$.
Cette formule peut être trouvée aussi en utilisant le polynôme d'interpolation de Lagrange pour les points $(x_i, f(x_i))$ et $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$. Formule regressive:

$$h = x_i - x_{i-1}$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + \frac{h}{2}f''(\eta)$$

$$x_{i-1} \leq \eta \leq x_i$$

Dérivée première.

La formule de différence centrale de la dérivée en x_i peut être trouvée en utilisant la formule de Taylor d'ordre 3 avec $h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) + \frac{h^3}{3!}f'''(\eta_1)$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2}f''(x_i) - \frac{h^3}{3!}f'''(\eta_2)$$

$$x_i \leq \eta_1 \leq x_{i+1}, \; x_{i-1} \leq \eta_2 \leq x_i$$

Dérivée première.

si on suppose que f''' est continue sur $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ on peut ecrire la formule suivante:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + \frac{h^2}{6} f'''(\eta)$$

$$x_{i-1} \leq \eta \leq x_{i+1}$$

l'erreur est $\frac{h^2}{6} f'''(\eta)$ donc en $O(h^2)$. La formule de différence centrale peut aussi être trouvée à partir du polynôme d'intérpolation de Lagrange en 3 points.

Dérivée première.

On peut interpoler les données par un polynome au lieu d'utiliser la droite, nous obtenons alors les formules de différence qui utilisent plus de deux points. On suppose que le pas h est constant.

Formule de différence progressive utilisant trois points:

$$f'(x_i) \approx \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{x_{i+2} - x_i}$$

Formule de différence régressive utilisant trois points:

$$f'(x_i) \approx \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{x_i - x_{i-2}}$$

Dérivée première.

Exemple : Formules de différence en trois points:
En utilisant les données de l'exemple précédent, on trouve:
$f'(x_i) \approx \frac{-32+4(16)-3(8)}{2} = 4$ progressive.
$f'(x_i) \approx \frac{3(8)-4(4)+2}{2} = 5$ regressive.

Outline

Formule générale en trois points.

La formule d'approximation en 3 points de la dérivée première, basée sur le polynôme d'interpolation de Lagrange, n'utilise pas des points équidistants.
Etant donné trois points $(x_1, y_1); (x_2, y_2)$ et (x_3, y_3) avec $x_1 < x_2 < x_3,$ la formule suivante permet d'approcher la dérivée en un point $x \in [x_1, x_3].$ Les dérivées aux points x_i sont les suivantes:

Formule générale en trois points.

$$f'(x_1) = \frac{2x_1 - x_2 - x_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} y_1 + \frac{x_1 - x_3}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} y_2 + \frac{x_1 - x_2}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} y_3;$$

$$f'(x_2) = \frac{x_2 - x_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} y_1 + \frac{2x_2 - x_1 - x_3}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} y_2 + \frac{x_2 - x_1}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} y_3;$$

$$f'(x_3) = \frac{x_3 - x_2}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} y_1 + \frac{x_3 - x_1}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} y_2 + \frac{2x_3 - x_2 - x_1}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} y_3;$$

Formule générale en trois points.

Le polynôme de Lagrange est donnée par

$$P(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 + L_3(x)y_3$$

où

$$L_1(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}$$

$$L_3(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}$$

Formule générale en trois points.

L'approximation de la dérivée première est donnée par $f'(x) \approx P'(x)$, qui peut s'ecrire

$$P'(x) = L_1'(x)y_1 + L_2'(x)y_2 + L_3'(x)y_3$$

où

$$L_1'(x) = \frac{2x - x_2 - x_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}$$

$$L_2'(x) = \frac{2x - x_1 - x_3}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}$$

$$L_3'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}$$

donc

$$f'(x) = \frac{2x - x_2 - x_3}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}y_1 + \frac{2x - x_1 - x_3}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)}y_2 + \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)}$$

Outline

Dérivées d'ordre supérieur.

Les formules de dérivées d'ordre supérieur, peuvent être trouvées à partir des dérivées du polynôme de Lagrange ou en utilisant les formules de Taylor.
Par exemple, étant donné 3 points x_{i-1}, x_i, x_{i+1} équidistants, la formule de la dérivée seconde est donnée par:

$$f''(x_i) = \frac{1}{h^2}[f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})]$$

l'erreur est en $O(h^2)$.

Dérivées d'ordre supérieur.

Dérivée seconde à partir du polynôme de Taylor.

$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\eta_1)$

$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\eta_2)$

$x \leq \eta_1 \leq x+h$ et $x-h \leq \eta_2 \leq x$.

$$f''(x) \simeq \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2}$$

l'erreur est en $O(h^2)$.

Dérivées d'ordre supérieur.

Pour obtenir les formules de la troisième et la quatrième dérivée, on prend une combinaison linéaire des développement de Taylor, pour $f(x+2h), f(x+h), f(x-h)$ et $f(x-2h)$.
La table suivante donne différentes formules centrales toutes en $O(h^2)$:

$$f'(x_i) \simeq \frac{1}{2h}\left[f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})\right]$$

$$f''(x_i) \simeq \frac{1}{h^2}\left[f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})\right]$$

$$f'''(x_i) \simeq \frac{1}{2h^3}\left[f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})\right]$$

$$f^{(4)}(x_i) \simeq \frac{1}{h^4}\left[f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})\right].$$

Dérivées d'ordre supérieur.

En utilisant les polynômes d'interpolation de Lagrange les dérivées d'ordre p sont calculées par:

$$f^{(p)}(\alpha) \sim \sum_{i=0}^{n} A_i(\alpha) f(x_i)$$

où

$$A_i(\alpha) = L_i^{(p)}(\alpha) \quad p \leq n$$

$$\sum_{i=0}^{n} A_i(\alpha) x_i^k = 0 \quad 0 \leq k \leq p-1$$

$$\sum_{i=0}^{n} A_i(\alpha) x_i^k = k(k-1)...(k-p+1)\alpha^{k-p} \quad p \leq k \leq n.$$

Dérivées d'ordre supérieur.

Remarque :

La fomule est exacte pour les polynômes de degrés $\leq n$.

Le système linéaire donnant les $A_i(\alpha)$ a un déterminant de type Vandermonde différent de zéro si les x_i sont distincts.

Les $A_i(\alpha)$ sont indépendants de f et peuvent être calculés une fois pour toutes.

Outline

Etude de l'erreur commise.

D'aprés le chapitre précédent, si f est connue en $(n+1)$ points $x_i, i=0,...,n$ alors $f(x)=P_n(x)+e(x)$, où $e(x)$ est l'erreur d'interpolation. En dérivant on obtient

$$f'(x) = P_n'(x) + e'(x) = \sum_{i=0}^{i=n} A_i(x).f(x_i) + e'(x)$$

et

$$e'(x) = \frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(n+1)!}L(x).f^{(n+1)}(\xi_x)\right) = \frac{d}{dx}(L(x).f[x_0,...,x_n,x])$$
$$= \frac{1}{(n+1)!}L'(x).f^{(n+1)}(\xi_x) + \frac{1}{(n+1)!}L(x).\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right)$$

Etude de l'erreur commise.

Remarque

L'erreur de dérivation est nulle si f est un polynôme de degré inférieur ou égale à n.

Si on prend pour x un point x_i, le second terme de la dérnière somme s'annule, sinon il faut connaître $\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}\left(\xi_x\right)\right)$, ce qui est difficile car la fonction $x \to \xi_x$ étant inconnue.

Etude de l'erreur commise.

On peut donner une forme si f est $n+2$ fois dérivable en utilisant la notion de différence. En effet

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}\left(f^{(n+1)}(\xi_x)\right) &= \frac{d}{dx}(f[x_0,...,x_n,x]) \\ &= \lim_{h\to 0}\frac{f[x_0,...,x_n,x+h]-f[x_0,...,x_n,x]}{h} \\ &= \lim_{h\to 0} f[x_0,...,x_n,x,x+h] \\ &= \lim_{h\to 0}\frac{1}{(n+2)!}f^{(n+2)}(\theta_{x,h}).\end{aligned}$$

On constate qu'on devra se contenter d'une estimation

$$\mid e(x) \mid \leq \frac{1}{(n+1)!} \mid L'(x) \mid M_{n+1} + \frac{1}{(n+2)!} \mid L(x) \mid M_{n+2}.$$

Méthodes numériques d'intégration

Soit $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, une fonction continue donnée. On désire approcher numériquement la quantité $\int_a^b f(x)dx$.

Outline

Formules fermées.

On appelle ainsi les formules quand la fonction f est continue sur lintervalle $[a, b]$.
Les points d'interpolation x_i verifient
$a = x_0 < x_1 < ... < x_{n-1} < x_n = b.$

Formule des rectangles.

La formule des rectangles est une formule dite à un point $x_0 = a$. Le polynôme d'interpolation associé est $P_0(x) = f(a)$ et $L(x) = x - a$ pour tout x appartenant à $[a, b]$. D'où

$$I(f) \simeq I(P_0) = f(a)(b - a).$$

L'interprétation graphique consiste donc à remplacer $\int_a^b f(x)dx$ par l'aire du rectangle de base $[a, b]$ et de hauteur $f(a)$.

Formule des trapèzes.

La formule des trapèzes est une formule à 2 points : $x_0 = a$ et $x_1 = b$. Le polynôme de Lagrange associé à ces deux points est $P_1(x) = f(a)\left(\frac{x-b}{a-b}\right) + f(b)\left(\frac{x-a}{b-a}\right)$.D'où

$$I(f) \simeq I(P_1) = \int_a^b P_1(x)dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a).$$

Formule de Simpson.

La formule de Simpson est une formule à trois points $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ et $x_2 = b$: . Le polynôme associé à ces trois points est $P_2(x) = f(a)L_0(x) + f(\frac{a+b}{2})L_1(x) + f(b)L_3(x)$. Notons que

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - b)}{(a - x_1)(a - b)} \Rightarrow \int_a^b L_0(x)dx = \frac{(b - a)}{6},$$

$$L_1(x) = \frac{(x - a)(x - b)}{(x_1 - a)(x_1 - b)} \Rightarrow \int_a^b L_1(x)dx = \frac{4(b - a)}{6},$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - a)}{(b - x_1)(b - a)} \Rightarrow \int_a^b L_2(x)dx = \frac{(b - a)}{6},$$

On tire donc la formule suivante:

$$I(f) \simeq I(P_2) = \frac{(b - a)}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a + b}{2}) + f(b)\right].$$

Formules ouvertes.

On appelle ainsi les formules quand la fonction f est continue sur l'intervalle $]a, b[$. Les points d'interpolation x_i verifient $a < x_0 < x_1 < ... < x_{n-1} < x_n < b$.

Formule de Steffensen.

Il en existe une infinité.

- Une à 1 points avec $x_0 = \frac{a+b}{2}$:

$$I(f) \simeq (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$

Cette formule est exacte pour tout polynôme de degré 1.

- Une à 2 points avec $x_0 = \frac{2a+b}{3}$ et $x_1 = \frac{a+2b}{3}$:

$$I(f) \simeq \frac{b-a}{2}\left(f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + f\left(\frac{2b+a}{3}\right)\right).$$

Cette formule est exacte pour tout polynôme de degré 1.

Formule de Steffensen.

- Une à 3 points avec $x_0 = \frac{3a+b}{4}$ et $x_1 = \frac{a+b}{2}$ et $x_2 = \frac{3b+a}{4}$:

$$I(f) \simeq \frac{b-a}{6}\left(4f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 2f\left(\frac{a+b}{2}\right) - 2f\left(\frac{a+3b}{4}\right)\right).$$

Cette formule est exacte pour tous les polynômes de degré 2.

Outline

Etude générale de l'erreur commise

Estimer l'erreur $E(f) = I(f) - I(P_n)$ avec précision??.
Si f est suffisamment dérivable, on a

$$E(f) = I(f - P_n) = \int_a^b \left[\frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x) L(x) \right] dx.$$

Etude générale de l'erreur commise

Théorème : Supposons que $E(f) = 0$ pour les polynômes de degré au plus n et que la fonction $f \in C^{n+1}([a,b])$. On dit alors que la méthode est d'ordre $n+1$. Si on pose $M_{n+1} = \max_{x \in [a,b]} \mid f^{(n+1)}(x) \mid$, Une première estimation de l'erreur est

$$\mid E(f) \mid \leq \frac{1}{(n+1)!} M_{n+1} \int_a^b \mid L(x) \mid dx.$$

Etude générale de l'erreur commise

Théorème : En plus des hypothèses du Th précédent, on suppose que le polynôme $L(x)$ ne change pas de signe sur $[a, b]$, alors en utilisant le Th de la moyènne pour $E(f)$, on obtient

$$E(f) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\eta) \int_a^b L(x)dx.$$

$$\eta \in [a, b]$$

Etude générale de l'erreur commise

En utilisant ce dernier Théorème on peut estimer les erreurs des méthodes vues ci-dessus.

- **Pour la formule du rectangle on a:**

$$E(f) = f'(\eta)\int_a^b (x-a)dx = f'(\eta)\frac{(b-a)^2}{2} \qquad \eta \in [a,b]$$

cette méthode est d'ordre 1.

- **Pour la formule du trapèze on a:**

$$E(f) = \frac{1}{2}f''(\eta)\int_a^b (x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\eta)}{12}(b-a)^3$$

la méthode de Trapèze est dordre 2.

Etude générale de l'erreur commise

- **Pour la formule de Simpson on a:**

$$E(f) = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{90}\left[\frac{b-a}{2}\right]^5,$$

la méthode de Simpson est dordre 4.

Etude générale de l'erreur commise

Exemple :
$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$,
$a = 0, \frac{a+b}{2} = \frac{1}{2}, b = 1, f(0) = 1, f(\frac{1}{2}) = .7788, f(1) = .36788.$

1. Rectangle: $I \simeq f(0) = 1.$
2. Trapèze: $I \simeq \left[\frac{f(0)+f(1)}{2}\right] = .68393.$
3. Simpson: $I \simeq \frac{1}{6}\left[f(0) + 4f(\frac{1}{2}) + f(1)\right] = .74718.$
4. La valeur de I à 5 décimales est $.74718.$

Outline

Formules composées.

Plutôt que d'augmenter le degré du polynôme d'interpolation, on peut obtenir une formule d'integration en découpant l'intervalle d'intégration en sous-intervalles et en appliquant des formules simples sur chacun des sous-intervalles.

Formule de trapèze.

Si n est entier, posons

$$h = \frac{b-a}{n}, x_k = a + kh,\ k = 0, ..., n.$$

alors

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \right)$$
$$= \sum_{k=0}^{n-1} \left[\left(\frac{f(x_k) + f(x_{k+1})}{2} \right) h - \frac{h^3}{12} f''(\eta_k) \right],$$

où $\eta_k \in [x_k, x_{k+1}], k = 0, ..., n-1$

Formule de trapèze.

Développant et regroupant les termes qui apparaissent 2 fois, on obtient

$$I(f) = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b)\right] - \frac{h^3}{12}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k)$$

En appliquant le Th des valeurs intermédiaires, on peut réécrire l'erreur sous la forme

$$E(f) = -\frac{nh^3}{12}f''(\eta) = -\frac{(b-a)}{12}f''(\eta)h^2.$$

Formule de trapèze.

Ceci nous donne la formule du trapèze composée pour laquelle l'approximation est donnée par:

$$T_n(f) = \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + f(b)\right]$$

et l'erreur par

$$ET(f) = -\frac{(b-a)}{12} f''(\eta)h^2.$$

Formule de Simpson composée.

Supposons que n soit pair, groupant les intervalles 2 à 2 et appliquant la formule de Simpson sur $[x_i, x_{i+2}]$, on obtient

$$I(f) = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4\sum_{k \ \ impair} f(a+kh) + 2\sum_{k \ \ pair} f(a+kh) + f(b)\right] - \frac{n}{2}\frac{f^{(4)}(}{90}$$

Ceci nous conduit à la formule de Simpson composée pour laquelle l'approximation est donnée par

$$S_n(f) = \frac{h}{3}\left[f(a) + 4\sum_{k \ \ impair} f(a+kh) + 2\sum_{k \ \ pair} f(a+kh) + f(b)\right]$$

et l'erreur par

$$ES(f) = -f^{(4)}(\eta)\frac{(b-a)}{180}h^4.$$

Formule de Simpson composée.

Exemple : Déterminer $\int_0^1 e^{-x^2} dx$.
Si n désigne le nombre des intervalles utilisés.

n	$T_n(f)$	$ET(f)$
2	.73137	.015
4	.74298	3.84×10^{-3}
8	.74658	9.58×10^{-4}
16	.74676	1.39×10^{-4}
32	.74680	5.98×10^{-5}

Si nous désirons obtenir 6 décimales exactes, il nous faut déterminer h tel que

$$\max_{0 \leq \eta \leq 1} \mid f''(\eta) \mid \frac{h^2}{12} \leq 5 \times 10^{-7}, \qquad (1)$$

Formule de Simpson composée.

Pour une partition régulière $x_k = kh, h = \frac{1}{n}$; donc nous cherchons n tel que

$$n^2 \geq \frac{1}{12} \max_{0\leq\eta\leq 1} \mid f''(\eta) \mid \frac{1}{5 \times 10^{-7}}.$$

or $f''(x) = e^{-x^2}(4x^2 - 2)$ et $f'''(x) = e^{-x^2}4x(3 - 2x^2)$. Puisque $f'''(x)$ ne change pas de signe sur $[0; 1]$,

$$\max_{0\leq\eta\leq 1} \mid f''(\eta) \mid = \max\left\{\mid f''(0) \mid, \mid f''(1) \mid\right\} = 2.$$

Formule de Simpson composée.

On voit que (1) sera satisfaite si

$$n^2 \geq \frac{10^6}{3}, \qquad n > 578.$$

Remarque Dans le choix de la précision demandée, il faut tenir compte des erreurs d'arrondi et de l'accumutation des erreurs