Calcul scientifique en Fortran 90
TP Quadrature

Préambule

L'objectif de ce TP est de programmer et de comparer quelques formules de quadratures vues dans le cours d'analyse numérique.
Plus précisément, on souhaite évaluer :

$$\mathcal{I}(f) = \int_a^b f(x)dx,$$

où f est une fonction connue, définie sur $[a, b]$ un intervalle borné de $\mathbb{R}$.
Pour approcher $\mathcal{I}(f)$, on commence par choisir une formule de quadrature élémentaire à q points $\mathcal{Q}$:

$$\mathcal{Q}(g) = \sum_{l=1}^{q} \omega_l g(t_l) \simeq \int_{-1}^{1} g(t)dt,$$

où $\Omega = (\omega_l)_{l=1,q}$ sont les poids de quadrature et $T = (t_l)_{l=1,q}$ sont les points de quadrature.
On considère ensuite la formule composée sur n sous-intervalles. Pour cela, $[a, b]$ est découpé en n sous-intervalles de même longueur : $[a, b] = \bigcup_{i=0}^{n}[a_i, a_{i+1}]$ avec $a_i = a + ih$ en utilisant la convention $a_0 = a$ et $a_n = b$ et en posant $h = \dfrac{b-a}{n}$ la longueur de chaque sous-intervalle. Puis on applique la formule élémentaire sur chaque sous-intervalle pour obtenir :

$$\mathcal{Q}_n(f) = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \mathcal{Q}(f \circ T_i),$$

où T_i est l'application affine qui envoie $[-1, 1]$ dans $[a_i, a_{i+1}]$.
Au final on a donc :

$$\mathcal{Q}_n(f) = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{l=1}^{q} \omega_l f\big(a_i + \frac{h}{2}(1 + t_l)\big). \tag{1}$$

Première partie

1. Écrire un programme `Quad` qui calcule la valeur approchée de $\mathcal{I}(f)$ en utilisant une formule de quadrature composée à l'aide de la formule (1).
   Plus précisémment, pour commencer :
   - f doit être programmée comme une fonction interne au programme,
   - n, a et b sont demandés à l'utilisateur,
   - utiliser une structure de type `Select Case` pour prévoir de choisir entre plusieurs formules de quadrature,
   - les poids et points de quadrature élémentaire seront définis comme des vecteurs au profil dynamique,
   - ne programmer pour cette question que la méthode des rectangles à gauche comme cas par défaut,
   - afficher à l'écran la valeur de $Q_n(f)$.

   Pour rappel, la méthode des rectangles à gauche est donnée par $\omega_0 = 2$ et $t_0 = -1$.
   On prendra soin de **valider** le programme.
2. Tester votre programme pour calculer $\int_1^2 \frac{dx}{x}$.
3. Ajouter les méthodes du point milieu et des trapèzes au programme :
   - Point-milieu : $\omega_0 = 2$ et $t_0 = 0$.
   - Trapèzes : $\Omega = (1, 1)$ et $T = (-1, 1)$.

Deuxième partie

On souhaite maintenant étudier l'erreur des formules programmées.

1. Écrire une fonction `ErrQuad` qui a pour arguments d'entrée `a, b, n` et un entier `meth` et qui calcule l'erreur absolue de la formule de quadrature composée associée à la méthode `meth`.
   Indications :
   - Cette fonction doit être interne à un programme principal `EtudeErrQuad`, qui contient également une fonction interne associée à f,
   - Le code de la première partie peut (doit) être réutilisé autant que faire se peut,
   - La valeur exacte de $\mathcal{I}(f)$ doit être définie et remplie dans une variable globale.

   N'oubliez pas de **valider** le programme.
2. En utilisant la fonction `ErrQuad`, remplir dans le programme `EtudeErrQuad` un tableau contenant l'erreur de la formule de quadrature choisie par l'utilisateur (demander de donner `meth` en donnant des indications) pour `n=`

$2^0, 2^1, \ldots, 2^{nmax}$ où `nmax` est un entier à définir (on choisira `nmax=10` pour commencer).

3. Faire en sorte que le programme écrive un fichier `erreur_rectg.dat` contenant 2 colonnes, la première avec les différentes valeurs de h, la seconde avec les erreurs correspondantes.
4. Pour tracer la courbe à partir du fichier ainsi obtenu, on peut utiliser Gnuplot. Pour ce faire, dans une autre fenêtre, placez-vous dans le répertoire contenant le fichier à tracer puis lancer Gnuplot en tapant `gnuplot`.
   Une fenêtre de commande s'ouvre alors avec une invite `gnuplot>`
   Voici quelques commandes pour Gnuplot :
   - Pour tracer la courbe, tapez `plot 'erreur_rectg.dat' w lp`.
   - Pour se placer en coordonnées logarithmiques, tapez `set logscale xy`.
   - Pour quitter, tapez `quit`.
   - Pour avoir de la documentation sur une commande, tapez `help` suivi de la commande (ex : `help plot`).

   Tracer la courbe de l'erreur de la méthode des rectangles à gauche **en coordonnées logarithmiques**. Que peut-on en dire ? Est-ce normal ?
5. Tracer également sur le même graphe l'erreur de la méthode des trapèzes et du point-milieu.
   Indication : pour tracer plusieurs courbes sur le même graphe, on peut utiliser la même commande `plot` en séparant par des virgules, par ex.
   `plot 'erreur_rectg.dat' w lp, 'erreur_ptmil.dat' w lp`
6. Rajouter la courbe des erreurs des méthodes de Simpson et de Gauss à 2 et 3 points :
   - Simpson : $\Omega = (1/3, 4/3, 1/3)$ et $T = (-1, 0, 1)$.
   - Gauss à 2 pts : $\Omega = (1, 1)$ et $T = (-\sqrt{3}/3, \sqrt{3}/3)$.
   - Gauss à 3 pts : $\Omega = (5/9, 8/9, 5/9)$ et $T = (-\sqrt{3/5}, 0, \sqrt{3/5})$.

   N'oubliez pas de bien valider chaque formule. Que peut-on dire ?
7. Tracer également les courbes d'erreurs en fonction du nombre d'évaluations de f nécessaires. Que dire ?
8. Pour chaque méthode, déterminer le nombre de sous-intervalles nécessaires pour obtenir une erreur de $10^{-6}, 10^{-9}$ puis 10^{-12}. Qu'observe-t-on ?

Troisième partie $\star$

Reprendre l'étude de la deuxième partie pour calculer :

$$\mathcal{I}(f) = \int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} dx,$$

que se passe-t-il ?

Quatrième partie $\star\star$

On souhaite maintenant calculer une valeur approchée de :

$$\mathcal{I} = \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1}.$$

En utilisant des séries entières, on peut montrer que $\mathcal{I} = \dfrac{\pi^4}{15}$.

1. Une méthode pour calculer ce genre d'intégrales consiste à intégrer de 0 à X en utilisant une quadrature composée de Gauss(-Legendre), puis de X à l'infini en utilisant une formule de Gauss-Laguerre.
   Écrire un programme `QuadInf`, basé sur les programmes des questions précédentes, qui permet de faire celà. Pour rappel, les deux premières formules de Gauss-Laguerre sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-t} f(t)dt &\simeq 2f(1) \text{ (formule à 1 pt)},\\ &\simeq \frac{1}{4}\Big[(2+\sqrt{2})f(2-\sqrt{2}) + (2-\sqrt{2})f(2+\sqrt{2})\Big] \text{ (formule à 2 pts)}.\end{aligned}$$

2. Étudier l'erreur de la méthode en fonction de X, des choix des formules de quadrature et du nombre de sous-intervalles dans le premier morceau d'intégrale.
3. Que peut-on dire ?