
Compléments sur l'approximation d'intégrales

Miguel Rodrigues

Le but de ces notes est de faire quelques rappels sur le calcul approché d'intégrales.

Le matériel discuté ici peut être trouvé dans les livres classiques de l'analyse numérique de l'approximation des équations différentielles [CM92, CM97] ou d'analyse numérique en général [Fil13, Dem16, Sch04].

1 Principe général

1.1 Cadre fonctionnel

On se donne Ω l'adhérence d'un ouvert [1] de $\mathbf{R}^d$, $d \in \mathbf{N}^*$, et μ une mesure de Radonpositive et finie sur Ω. On s'intéresse principalement au cas où μ est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, c'est-à-dire au cas où μ est à densité, $\mathrm{d}\mu(x) = \omega(x)\,\mathrm{d}x$, avec ω positive ou nulle et intégrable (pour la mesure de Lebesgue).

On veut choisir des suites de **nœuds de quadrature** $((x_j^{(n)})_{0\leq j\leq N_n})_{n\in\mathbf{N}}$ et des **poids de quadrature** $((\omega_j^{(n)})_{0\leq j\leq N_n})_{n\in\mathbf{N}}$ pour assurer que pour tout f continu sur Ω, à support compact

$$\int_\Omega f(x)\,\mathrm{d}\mu(x) \;=\; \lim_{n\to\infty}\sum_{j=0}^{N_n}\omega_j^{(n)}\,f(x_j^{(n)})\,,$$

avec des taux de convergence sous des hypothèses plus fortes sur f.

Remarque 1 *Rappelons que le théorème de Riesz (ou de Riesz–Markov–Kakutani) identifie les mesures de Radon avec les formes linéaires sur les fonctions continues à support compact, la correspondance se faisant par l'intégration, ou dit autrement avec les distributions d'ordre* 0. *Ainsi, dans les termes de l'analyse fonctionnelle, une méthode de quadature cherche à approcher* μ *par une suite* $(\mu^{(n)})_{n\in\mathbf{N}}$ *de combinaisons linéaires finies de masses de Dirac,* $\mu^{(n)} = \sum_{j=0}^{N_n}\omega_j^{(n)}\,\delta_{x_j^{(n)}}$, *au sens de la convergence faible-$*$. C'est essentiellement*[2] *cette notion qui est impliquée pour les lois des variables aléatoires dans la définition de la convergence en loi des variables aléatoires.*

La loi forte des grands nombres assure qu'avec des poids constants et des nœuds tirés indépendamment selon μ la convergence a lieu presque sûrement. C'est le fondement de la *méthode de Monte-Carlo* (essentiellement due à Metropolis et Ulam). Le théorème centrale limite assure qu'au sens des estimations d'erreurs des estimateurs statistiques la vitesse de convergence est en $1/\sqrt{N_n}$. Nous allons nous focaliser sur les méthodes déterministes mais il est bon de savoir les comparer. La version multi-dimensionnelle de la méthode des trapèzes avec points équidistants, rappelée ci-dessous, converge avec une erreur en

1. On pourrait de la même manière traiter le cas des variétes à bord.
2. À la différence près que pour les mesures finies on teste contre les fonctions continues bornées.

l'inverse du carré de la plus grande distance entre les points, c'est-à-dire en $(N_n)^{-2/d}$. Si on met de côté le fait que les estimations statistiques sont moins fiables que les estimations déterministes, la méthode de Monte-Carlo devient donc avantageuse à partir de la dimension 5. En dimension grande il vaut mieux tirer des points au hasard que chercher à quadriller finement.

1.2 Estimations d'erreur

Dans la suite de cette section, pour toute mesure ν de Radon positive et finie sur Ω, on notera $I_\nu(\cdot)$ la fonctionelle intégrale par rapport à ν. Pour analyser l'erreur de quadrature $I_\mu(f)-I_{\mu^{(n)}}(f)$, et construire les méthodes, on passe le plus souvent par l'appariement avec une famille de sous-espaces vectoriels de fonctions μ-intégrables et continues [3] $(V_n)_{n\in\mathbf{N}}$.

Si $I_{\mu^{(n)}}$ calcule exactement I_μ sur V_n, c'est-à-dire que

$$\forall f \in V_n\,, \quad I_\mu(f) = I_{\mu^{(n)}}(f)\,,$$

alors, pour tout f μ-intégrable et continu, on a

$$\begin{aligned}\Big| I_\mu(f) - I_{\mu^{(n)}}(f) \Big| &\le \inf_{g\in V_n} \Big(\|f-g\|_{L^1(\mu)} + |I_{\mu^{(n)}}(f) - I_{\mu^{(n)}}(g)| \Big) \\ &\le \inf_{\substack{g\in V_n\,, \\ \forall 0\le j\le N_n,\ g(x_j^{(n)})=f(x_j^{(n)})}} \|f-g\|_{L^1(\mu)}\,.\end{aligned}$$

La dernière estimation décompose l'analyse en deux étapes :

1. d'une part la vérification de l'exactitude sur un espace V_n ;
2. d'autre part l'estimation d'erreur d'interpolation dans V_n.

Notons que lorsque μ est une mesure finie on peut majorer la norme $L^1(\mu)$ par n'importe quelle norme $L^p(\mu)$, $1\le p\le\infty$,

$$\|f-g\|_{L^1(\mu)} \;\le\; (\mu(\Omega))^{1-\frac{1}{p}}\,\|f-g\|_{L^p(\mu)}\,.$$

On utilisera typiquement cette dernière borne avec $p=\infty$ pour des espaces de fonctions polynomiales par morceaux et avec $p=2$ pour des espaces de fonctions trigonométriques.

Le plus souvent on construit la méthode de quadrature pour assurer l'exactitude sur des espaces d'interpolation choisis au préalable.

Nous allons nous concentrer sur le cas où Ω est un intervalle de $\mathbf{R}$. On peut en déduire le cas multi-dimensionnel par récurrence, en découpant Ω en tranches de co-dimension 1 (via le théorème de Fubini). En dimension grande, cela demande cependant un nombre de nœuds de quadrature très élevé et, comme rappelé ci-dessus, l'on peut alors préférer utiliser une méthode stochastique comme la méthode de Monte-Carlo.

Nous allons par ailleurs nous contenter d'analyser en détails le cas où μ est la mesure de Lebesgue (et donc Ω est un segment). La théorie est essentiellement identique dans le cas général mais la pratique bénéficie grandement du fait que la mesure de Lebesgue est invariante par translation et homogène (de degré $-d$) sous dilatation. Autoriser un μ général permet d'inclure des ensembles non bornés (par exemple pour des mesures gaussiennes ou exponentielles), ou de calculer des intégrales avec des singularités (comme dans les problèmes de périodes de pendules). On notera qu'il est important de factoriser l'éventuelle singularité dans la mesure parce que l'estimation d'interpolation consomme de la régularité.

3. Nous allons aussi considérer le cas où les $(V_n)_{n\in\mathbf{N}}$ contiennent des fonctions discontinues parce que constantes par morceaux, mais il faudra alors préciser comment définir $f(x_j^{(n)})$, pour $f\in V_n$.

2 Méthodes interpolatoires polynomiales par morceaux

Nous allons d'abord nous focaliser sur le cas où les espaces $(V_n)_{n\in\mathbf{N}}$ sont des espaces de fonctions polynomiales par morceaux. On parle alors de méthodes composées parce qu'elles concatènent des méthodes exactes sur des espaces de fonctions polynomiales, appelées méthodes élémentaires.

Pour définir une telle méthode, on choisit une méthode de quadrature fixe sur $[0,1]$

$$I_{\text{él}}(g) = \sum_{k=0}^{m} \omega_k \, g(x_k) \, .$$

Considérons alors $\Omega = [a,b]$, $a \le b$. Pour tout $n \in \mathbf{N}^*$, on va se donner $a^{(n)} = (a_j^{(n)})_{0\le j\le n}$ une subdivision de $[a,b]$, c'est-à-dire

$$a = a_0^{(n)} < a_1^{(n)} < \cdots < a_{n-1}^{(n)} < a_n^{(n)} = b \, ,$$

de pas maximal

$$h_{a^{(n)}} := \max_{0\le j\le n-1} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)}) \, .$$

On définit alors

$$\begin{aligned} I_{\text{comp},\, a^{(n)}}(f) &:= \sum_{j=0}^{n-1} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)}) \, I_{\text{él}}\big(g_{f, a_j^{(n)}, a_{j+1}^{(n)}}\big) \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{m} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)}) \, \omega_k \, f(x_{j,k}^{(n)}) \end{aligned}$$

où

$$x_{j,k}^{(n)} := a_j^{(n)} + x_k \, (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)}) \, ,$$

et, pour $a \le \alpha < \beta \le b$,

$$g_{f,\alpha,\beta} : \ [0,1] \to \mathbf{R}, \quad t \mapsto f(\alpha + t\,(\beta - \alpha)) \, .$$

Assez souvent on considère des subdivisions à pas constant, c'est-à-dire que $a_j^{(n)} = a + j \, \frac{(b-a)}{n}$.

Il est naturel de mesurer la vitesse de convergence d'une méthode construite par morceaux en terme du pas maximal. Pour une fonction f, on dit que la méthode *converge au moins à l'ordre* $r > 0$ s'il existe $C_r(f)$ tel que pour tout n,

$$\left| \int_a^b f(x)\mathrm{d}x - I_{\text{comp},\, a^{(n)}}(f) \right| \le C_r(f) \, h_{a^{(n)}}^r \, .$$

La proposition qui suit découle de la discussion ci-dessus et des estimations d'erreur d'interpolation avec

$$C_{m_0+1}(f) := (b-a) \, \frac{\max_{[a,b]} |f^{(m_0+1)}|}{(m_0+1)!} \, .$$

Proposition 2 *Si la méthode élémentaire à* $(m+1)$ *points est exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à* m_0*, pour un* $m_0 \in \mathbf{N}$ *avec* $m_0 \ge m$*, alors la méthode composée associée converge au moins à l'ordre* $m_0 + 1$ *pour tout* $f \in \mathcal{C}^{m_0+1}([a,b])$.

En utilisant les formules intégrales pour les erreurs d'interpolation, on obtient aussi une formule intégrale pour l'erreur d'interpolation.

Attention : les ordres de convergence différent de 1 par rapport à l'ordre d'exactitude des méthodes élémentaires. Une partie significative de la littérature pour l'agrégation définit l'ordre (sans précision) comme l'ordre d'exactitude sur les polynômes.

Reste à étudier le degré d'exactitude des méthodes élémentaires.

Théorème 3 *1. Une méthode élémentaire à $(m+1)$ points exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à m vérifie*

$$\omega_k = \int_0^1 \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq k}}^{m} \frac{x - x_\ell}{x_k - x_\ell} \, \mathrm{d}x \, .$$

2. Réciproquement une méthode élémentaire avec de tels poids est exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à m, et si de plus m est pair et les $x_0, \cdots, x_m$ sont symétriques par rapport à $\frac{1}{2}$, elle est exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $m+1$.

3. Une méthode élémentaire à $(m+1)$ points ne peut pas être exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à m_0, quand $m_0 > 2m+1$.

4. En choisissant comme nœuds de quadrature les zéros du polynôme orthogonal de Legendre sur $[0,1]$ de degré $m+1$, et en définissant les poids comme ci-dessus, on obtient une méthode élémentaire exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $2m+1$.

Faisons quelques commentaires avant de démontrer le théorème.

1. Les méthodes associées aux zéros des polynômes orthogonaux de Legendre sont appelées méthodes de Gauss-Legendre. Pour d'autres choix de mesures, ces méthodes portent le nom des polynômes orthogonaux associés : Gauss-Hermite pour les mesures gaussiennes, Gauss-Laguerre pour les mesures exponentielles, Gauss-Tchebychev pour la mesure $\mathrm{d}x/\sqrt{1-x^2}$ sur $[-1,1]$,... Pour ces autres poids, elles sont plutôt utilisées directement comme méthode de quadrature plutôt que comme méthode élémentaire dans une méthode composée. Leur convergence devrait donc être plutôt analysée dans la limite où $m \to \infty$. Malheuresement, à l'exception, dans une certaine mesure, de la méthode de Gauss-Tchebychev, elles ne peuvent pas être réellement utilisées avec des ordres très élevés faute de connaître explicitement les zéros des polynômes orthogonaux.
2. Les méthodes basées sur des méthodes élémentaires avec des points-équirépartis sont appelées méthodes de Newton-Cotes.
3. L'obstruction sur l'ordre d'exactitude est naturelle puisque l'espace des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à $2m+1$ est de dimension $2(m+1)$ et que l'on dispose de $2(m+1)$ paramètres (nœuds et poids).

Démonstration. Le premier point découle de la proporiété d'exactitude appliquée à l'intégrande.

La première partie du second point provient du fait que les polynômes de Lagrange $L_k := \prod_{\substack{\ell=0 \\ \ell \neq k}}^{m} \frac{X - x_\ell}{x_k - x_\ell}$, $0 \leq k \leq m$, forment une base de l'espace des polynômes de degré au plus m. Pour démontrer le second point, il suffit de montrer que la symétrie supplémentaire assure que la méthode est également exacte pour une fonction polynomiale de degré $m+1$ (puisqu'alors le polynôme complétera la base de $\mathbf{R}_m[X]$ en une base de $\mathbf{R}_{m+1}[X]$). Or, dans ce cas, par symétrie, on a, pour $0 \leq k \leq m$,

$$L_k\left(\frac{1}{2} - \left(X - \frac{1}{2}\right)\right) = \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq k}}^{m} \frac{X - (\frac{1}{2} - (x_\ell - \frac{1}{2}))}{x_k - x_\ell} = \prod_{\substack{\ell=0\\ \ell\neq k}}^{m} \frac{X - x_{m-\ell}}{(\frac{1}{2} - (x_k - \frac{1}{2})) - x_{m-\ell}} = L_{m-k}(X)$$

de sorte que $\omega_k = \omega_{m-k}$. D'où l'on déduit

$$\sum_{k=0}^{m} \omega_k \left(x_k - \frac{1}{2}\right)^{m+1} = 0 = \int_0^1 \left(x - \frac{1}{2}\right)^{m+1} \mathrm{d}x\,.$$

Le troisième point s'obtient en testant l'exactitude avec le polynôme $\prod_{k=0}^m (X - x_k)^2$ dont l'intégrale est strictement positive.

Supposons maintenant les hypothèses du quatrième point. Notons P_m le[4] polynôme de Legendre de degré $m+1$. En particulier P_m est orthogonal à tout polynôme de degré au plus m. On en déduit que la méthode élémentaire est exacte pour tout polynôme de la forme $Q\,P_m$, avec $Q \in \mathbf{R}_m[X]$. Puisqu'elle est également exacte sur $\mathbf{R}_m[X]$, de la division euclidienne par P_m on déduit qu'elle est exacte sur $\mathbf{R}_{2m+1}[X]$. ■

Listons les choix les plus courants.

1. Méthode des **rectangles à gauche**.

$$I_{\text{él}}(g) = g(0)\,, \qquad I_{\text{comp},\,a^{(n)}}(f) = \sum_{j=0}^{n-1} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)})\, f(a_j^{(n)})\,.$$

La méthode converge au moins à l'ordre 1 pour $f \in \mathcal{C}^1$.

2. Méthode des **rectangles à droite**.

$$I_{\text{él}}(g) = g(1)\,, \qquad I_{\text{comp},\,a^{(n)}}(f) = \sum_{j=0}^{n-1} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)})\, f(a_{j+1}^{(n)})\,.$$

La méthode converge au moins à l'ordre 1 pour $f \in \mathcal{C}^1$.

3. Méthode des **trapèzes**.

$$I_{\text{él}}(g) = \frac{1}{2}\, g(0) + \frac{1}{2}\, g(1)\,,$$
$$I_{\text{comp},\,a^{(n)}}(f) = \frac{1}{2}(a_1^{(n)} - a_0^{(n)})\, f(a) + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{2}\,(a_{j+1}^{(n)} - a_{j-1}^{(n)})\, f(a_j^{(n)}) + \frac{1}{2}(a_n^{(n)} - a_{n-1}^{(n)})\, f(b)\,.$$

La méthode converge au moins à l'ordre 2 pour $f \in \mathcal{C}^2$.

4. Méthode du **point milieu**.

$$I_{\text{él}}(g) = g\left(\frac{1}{2}\right)\,, \qquad I_{\text{comp},\,a^{(n)}}(f) = \sum_{j=0}^{n-1} (a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)})\, f\left(\frac{a_j^{(n)} + a_{j+1}^{(n)}}{2}\right)\,.$$

La méthode converge au moins à l'ordre 2 pour $f \in \mathcal{C}^2$.

4. Que l'on considère une normalisation par la norme L^2 ou par le coefficient dominant ne joue aucun rôle dans l'argument.

5. Méthode de **Simpson**.

$$
\begin{aligned}
I_{\text{él}}(g) &= \frac{1}{6}\, g\,(0) + \frac{4}{6}\, g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6}\, g\,(1)\ , \\
I_{\text{comp},\, a^{(n)}}(f) &= \frac{1}{6}(a_1^{(n)} - a_0^{(n)})\, f(a) + \frac{1}{6}(a_n^{(n)} - a_{n-1}^{(n)})\, f(b) \\
&\quad + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{6}\,(a_{j+1}^{(n)} - a_{j-1}^{(n)})\, f(a_j^{(n)}) + \sum_{j=0}^{n-1} \frac{4}{6}\,(a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)})\, f\left(\frac{a_j^{(n)} + a_{j+1}^{(n)}}{2}\right) .
\end{aligned}
$$

La méthode converge au moins à l'ordre 4 pour $f \in \mathcal{C}^4$.

Les désavantages de la méthode des trapèzes sur celle du point milieu en terme de nombres de points dans la méthode élémentaire sont essentiellement effacés par le fait que les points sont utilisés dans deux morceaux.

Lorsque les fonctions sont moins régulières, l'ordre obtenu est effectivement limité par la régularité.

Attention : on rappelle que les ordres donnés ici sont des ordre de convergence, ils différent de 1 par rapport à l'ordre d'exactitude des méthodes élémentaires.

3 Méthode des rectangles pour les fonctions périodiques

Nous allons maintenant montrer que la méthode des rectangles avec des points équidistants sur un segment $[a, b]$ est en un certain sens d'ordre infini pour les fonctions $f \in \mathcal{C}^\infty(\mathbf{R})$, qui sont $(b-a)$-périodiques. Par translation et dilation, on peut se ramener au cas $[a, b] = [0, 2\pi]$, ce que nous ferons désormais.

L'analyse de convergence utilise des espaces de polynômes trigonométriques. La partie « exactitude » de l'analyse est fournie par le lemme suivant.

Lemme 4 *Pour tout $n \in \mathbf{N}^*$, on a*

$$
\int_0^{2\pi} f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{2\pi}{n}\, f\left(\frac{2\pi}{n}\, j\right) ,
$$

pour toute fonction

$$
f \in \operatorname{Vect}\left(\left\{ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k\, \cdot}\ ;\ k \in \mathbf{Z} \setminus (n\, \mathbf{Z}^*) \right\}\right) .
$$

Démonstration. Il suffit de montrer l'exactitude sur les monômes trigonométriques. Or on a bien

$$
\sum_{j=0}^{n-1} \frac{2\pi}{n} = 2\pi = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}x\,,
$$

ce qui traite le cas $k = 0$, et, quand $k/n \notin \mathbf{Z}$,

$$
\sum_{j=0}^{n-1} \frac{2\pi}{n}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k\, \frac{2\pi}{n}\, j} = \frac{2\pi}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\, \frac{2k\pi}{n}}\right)^j = \frac{2\pi}{n}\, \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\, \frac{2k\pi}{n}\, n} - 1}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\, \frac{2k\pi}{n}} - 1} = 0 = \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\, k\, x}\,\mathrm{d}x\,.
$$

∎

En combinant avec une analyse d'erreur de l'interpolation trigonométrique — pour laquelle on renvoie aux compléments sur l'analyse de Fourier —, on obtient le théorème suivant.

Théorème 5 *Soit $r \in \mathbf{N}^*$. Alors il existe C_r tel que si $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ est 2π-périodique, de classe $\mathcal{C}^{r-1}$, et $\mathcal{C}^r$ par morceaux, l'on ait, pour tout $n \in \mathbf{N}^*$,*

$$\left| \int_0^{2\pi} f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{2\pi}{n} f\left(\frac{2\pi}{n} j\right) \right| \leq C_r \left(\frac{2\pi}{n}\right)^r \|f^{(r)}\|_{L^2([0,2\pi])} .$$

Les conditions sur f assurent la nullité des termes de bord apparaissant dans les intégrations par partie permettant de relier les coefficients de Fourier de f avec ceux de $f^{(r)}$. Elles sont par exemple vérifiées par la périodisation (avec période 2π) d'une fonction $g \in \mathcal{C}^r([0, 2\pi])$ vérifiant

$$\forall 0 \leq j \leq (r-1)\,,\ g^{(j)}(0) = g^{(j)}(2\pi)\,,$$

La condition sur l'égalité des dérivées au bord assure que quand on étend g périodiquement on obtient bien une fonction f dans $H^r_{\mathrm{loc}}(\mathbf{R})$. Elle assure aussi que g appartient bien à $H^r_{\text{pér}}([0, 2\pi])$, l'adhérence dans $H^r([0, 2\pi])$ des polynômes trigonométriques 2π-périodiques. De fait cet espace coïncide avec les fonctions de $H^r_{\mathrm{loc}}(\mathbf{R})$, 2π-périodiques.

En cas de défaut de raccord des dérivées, on observe que l'erreur est limitée par ce défaut de regularité.

Références

[CM92] M. Crouzeix and A.-L. Mignot. *Analyse numérique des équations différentielles.* Masson, 1992.

[CM97] M. Crouzeix and A.-L. Mignot. *Exercices d'analyse numérique des équations différentielles.* Masson, 1997.

[Dem16] J.-P. Demailly. *Analyse numérique et équations différentielles.* ÉDP Sciences, 2016.

[Fil13] F. Filbet. *Analyse numérique - Algorithme et étude mathématique.* Dunod, 2013.

[Sch04] M. Schatzman. *Analyse numérique.* Dunod, 2004.