

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, Dem16] ou d'analyse numérique en général [Fil13, Sch04].

1 Principe général

On se donne Ω l'adhérence d'un ouvert¹ de \mathbf{R}^d , $d \in \mathbf{N}^*$, et μ une mesure de Borel positive 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, $d\mu(x) = \omega(x) dx$, avec ω positive ou nulle et intégrable.

On cherche à approcher μ par une suite $(\mu^{(n)})_{n \in \mathbf{N}}$ de combinaison linéaire finie de masses de Dirac, $\mu^{(n)} = \sum_{j=0}^{N_n} \omega_j^{(n)} \delta_{x_j^{(n)}}$, au sens de la convergence faible-*. Autrement dit 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 borné uniformément continu sur Ω

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

avec des taux de convergence sous des hypothèses plus fortes sur f . Dans la suite pour toute mesure ν de Borel positive et finie sur Ω , on notera $I_{\nu}(\cdot)$ la fonctionnelle 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 bornées uniformément continues² $(V_n)_{n \in \mathbf{N}}$. 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 bornée uniformément continue, on a

$$\left| I_{\mu}(f) - I_{\mu^{(n)}}(f) \right| \leq \inf_{\substack{g \in V_n, \\ \forall 0 \leq j \leq N_n, g(x_j^{(n)}) = f(x_j^{(n)})}} \|f - g\|_{L^1(\mu)}.$$

En effet, si g est comme dans l'inf, on a

$$I_{\mu^{(n)}}(f) = I_{\mu^{(n)}}(g) = I_{\mu}(g).$$

1. On pourrait de la même manière traiter le cas des variétés à bord.

2. 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 $f \in V_n$.

Cette estimation décompose l'analyse en deux étapes : d'une part la vérification de l'exactitude sur un espace V_n , d'autre part l'estimation d'erreur d'interpolation dans V_n . Notons que puisque μ est une mesure finie on peut majorer la norme $L^1(\mu)$ par n'importe quelle norme $L^p(\mu)$, $1 \leq p \leq \infty$,

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

On utilisera typiquement cette dernière borne avec $p = \infty$.

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 multidimensionnel 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 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 pendules).

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

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

de pas maximal

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

On définit alors

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

avec

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

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 ,

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I_{\text{comp}, a^{(n)}}(f) \right| \leq C_r(f) h_a^r(n).$$

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 1 *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 $m_0 \geq m$, 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 diffèrent 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 2 1. *Une méthode élémentaire à $(m+1)$ points exacte sur les fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à m vérifie*

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

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, \dots, 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 $dx/\sqrt{1-x^2}$ 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 $m \rightarrow \infty$. Malheureusement, à l'exception 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 propriété 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 complètera 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 $0 \leq k \leq m$,

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

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

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

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 le³ 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**.

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

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

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

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

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

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

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**.

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

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

5. Méthode de **Simpson**.

$$I_{\text{él}}(g) = \frac{1}{6}g(0) + \frac{4}{6}g\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{1}{6}g(1),$$

$$I_{\text{comp}, a^{(n)}}(f) = \frac{1}{6}(a_1^{(n)} - a_0^{(n)})f(a) + \frac{1}{6}(a_n^{(n)} - a_{n-1}^{(n)})f(b)$$

$$+ \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{6}(a_{j+1}^{(n)} - a_{j-1}^{(n)})f(a_j^{(n)}) + \sum_{j=0}^{n-1} \frac{4}{6}(a_{j+1}^{(n)} - a_j^{(n)})f\left(\frac{a_j^{(n)} + a_{j+1}^{(n)}}{2}\right).$$

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 diffèrent 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 3 *Pour tout $n \in \mathbf{N}^*$, on a*

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

pour toute fonction

$$f \in \text{Vect} \left(\left\{ e^{ik \cdot}; k \in \mathbf{Z} \setminus (n\mathbf{Z}^*) \right\} \right).$$

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

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

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

$$\sum_{j=0}^{n-1} \frac{2\pi}{n} e^{ik \frac{2\pi}{n} j} = \frac{2\pi}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \left(e^{i \frac{2k\pi}{n}} \right)^j = \frac{2\pi}{n} \frac{e^{i \frac{2k\pi}{n} n} - 1}{e^{i \frac{2k\pi}{n}} - 1} = 0 = \int_0^{2\pi} e^{ikx} dx.$$

■

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 4 *Soit $r \in \mathbf{N}^*$. Alors il existe C_r tel que si $f \in \mathcal{C}^r([0, 2\pi])$ avec*

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

l'on ait, pour tout $n \in \mathbf{N}^$,*

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

La condition sur l'égalité des dérivées au bord 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 $f^{(r)}$. C'est également la condition assurant que si on étend f périodiquement (avec période 2π) on obtient bien une fonction dans $H_{\text{loc}}^r(\mathbf{R})$. Enfin c'est la condition assurant que f appartient bien à $H_{\text{pér}}^r([0, 2\pi])$, l'adhérence dans $H^r([0, 2\pi])$ des polynômes trigonométriques 2π -périodiques. De fait cet espace coïncide avec les fonctions de $H_{\text{loc}}^r(\mathbf{R})$, 2π -périodiques.

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

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.