

# Intégration numérique d'ordre élevé de fonctions régulières ou singulières sur un intervalle

Philippe HELLUY <sup>a</sup>, Sylvain MAIRE <sup>a</sup>, Patrick RAVEL <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire modélisation numérique et couplage, institut des sciences de l'ingénieur de Toulon et du Var, B.P. 56, 83162 La Valette du Var cedex, France  
Courriel : helluy@isitv.univ-tln.fr, maire@isitv.univ-tln.fr

<sup>b</sup> Laboratoire de physique industrielle et traitement de l'information, CRBA URA CNRS 1465, faculté de pharmacie, 34060 Montpellier cedex 1, France  
Courriel : ravel@pharma.univ-montpl.fr

(Reçu le 3 juillet 1998, accepté après révision le 28 septembre 1998)

---

**Résumé.** Nous présentons une méthode d'intégration numérique d'ordre élevé pour des fonctions singulières ou non sur un intervalle. Cette méthode s'avère très utile dans la mise en œuvre des méthodes d'éléments finis frontière, pour intégrer la fonction de Green.  
© Académie des Sciences/Elsevier, Paris

## *High order numerical integration of regular or singular functions on an interval*

**Abstract.** A high order numerical integration method is presented for regular or singular integrands over an interval. This method appears to be very useful to compute the integrals of the Green function in the numerical resolution of boundary integral equations. © Académie des Sciences/Elsevier, Paris

---

## *Abridged English Version*

It is important, for the numerical resolution of boundary integral equations, to construct numerical integration methods for regular or singular functions on an interval.

Generally, classical Gauss formula are used in the domain of regularity of the integrand, and a special treatment is performed near the singularities to preserve high order. This treatment can lead to very tedious computations: elimination of the singularity, changes of variables, computation of special Gauss points and weights which depend on the nature of the singularity...

We present here a very simple numerical quadrature method which is of high order both for regular and singular integrands. This method is based on the fact that the trapezoidal rule (or the rectangular

---

Note présentée par Philippe G. CIARLET.

rule) is of high order for regular periodic functions. The high order can be preserved with the help of a change of variables even when the integrand is no more periodic. This fact has been first discovered by Iri, Moriguti and Takasawa in [3]. It is also described in [1]. For more references, *see* also [4], [5].

In this note we study the case of a polynomial change of variable. We perform error estimates both for regular or singular integrands, and we prove numerically that our estimates are optimal.

Our presentation is organised as follow:

We first recall some well-known results about the trapezoidal rule (*see* formula (1)) applied to periodic functions. Those results are summarized in Theorem 1 where the error estimate (3) is proved for functions verifying (2). This estimate is based on the important expansion (4).

We then extend the method to non-periodic functions. First, a polynomial change of variables is constructed. The polynomial has to verify (5) and (6) and is given by formula (7). Then the trapezoidal rule is applied to  $P(f(t))P'(t)$  (*see* (8)), and it defines what we call the periodisation method. We are able to show the error estimate (9).

Finally, we extend our method to singular integrands of the form (10) and are able to prove estimate (12). When the order of the singularity increases the order of the periodisation method decreases and a higher order of the polynomial  $P$  has to be used. But the order is still higher than one (case of the classical Gauss method applied to singular integrands).

Our numerical results confirm the previous theory.

This method will be used to solve boundary integral equations in a forthcoming paper of Helluy, Maire and Ravel [2].

## 1. Ordre de la méthode des rectangles

Soit  $f$  une fonction définie sur  $[0, 1]$ , de classe  $C^1$  et soit  $J_N(f)$  ( $N$  entier  $> 0$ ) l'approximation par la méthode des rectangles à gauche de  $I(f) = \int_0^1 f(t)dt$

$$J_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} f\left(\frac{j}{N}\right). \quad (1)$$

En général, cette méthode d'intégration numérique est d'ordre 1, c'est-à-dire que l'erreur  $E_N(f) = I(f) - J_N(f)$  décroît comme  $\frac{1}{N}$  quand  $N$  tend vers  $+\infty$ . Cependant, si  $f$  est plus régulière et si ses dérivées d'ordre impair vérifient certaines propriétés, la méthode est d'ordre plus élevé. Nous rappelons ce résultat dans le théorème suivant.

THÉORÈME 1. – Soit  $k$  un entier  $\geq 2$ , et soit  $f$  une fonction de classe  $C^{2k}$  sur l'intervalle  $[0, 1]$ . On suppose que

$$f^{(2i-1)}(0) = f^{(2i-1)}(1) \text{ pour } 1 \leq i \leq k-1, \quad (2)$$

alors il existe une constante  $C_k > 0$ , indépendante de  $f$ , telle que

$$|E_N(f)| \leq C_k \sup_{x \in [0,1]} |f^{(2k)}(x)| \frac{1}{N^{2k}}. \quad (3)$$

*Démonstration.* – Par développement en série de Fourier de  $f$  et intégrations par parties successives, on peut montrer que

$$J_N(f) = I(f) + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} \frac{f^{(2i-1)}(1) - f^{(2i-1)}(0)}{(2\pi lN)^{2i}} + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^{k-1} \int_0^1 f^{(2k)}(t) \frac{1 - \cos(2\pi lNt)}{(2\pi lN)^{2k}} dt; \quad (4)$$

la condition (2) implique donc que

$$|E_N(f)| \leq 2 \left( \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{1}{(2\pi l)^{2k}} \right) \sup_{x \in [0,1]} |f^{(2k)}(x)| \frac{1}{N^{2k}},$$

d'où le résultat. □

*Remarque.* – La démonstration ci-dessus utilise la convergence normale de la série de Fourier de  $f$ . Ceci explique que l'estimation soit fautive pour  $k = 1$ .

## 2. Intégration des fonctions régulières sur $[0, 1]$ par la méthode de périodisation

Dans ce paragraphe nous introduisons la méthode dite de périodisation. Un changement de variable bien choisi va nous permettre de nous ramener au cas précédent, même lorsque la fonction  $f$  de classe  $C^{2k}$  ( $k \geq 2$ ) sur  $[0, 1]$  ne vérifie plus les conditions (2) sur ses dérivées d'ordre impair.

Pour cela nous commençons par construire un polynôme  $P$  vérifiant les propriétés suivantes :

$$P(0) = 0, \quad P(1) = 1, \quad (5)$$

$$P^{(i)}(0) = P^{(i)}(1) = 0, \quad 1 \leq i \leq 2k - 2. \quad (6)$$

LEMME 1. – Il existe un unique polynôme  $P$  de degré  $4k - 3$  vérifiant (5) et (6). Ce polynôme est strictement croissant sur  $[0, 1]$ . Il est donné par la formule

$$P(x) = \frac{\int_0^x t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt}{\int_0^1 t^{2k-2}(1-t)^{2k-2} dt}. \quad (7)$$

La méthode de périodisation consiste alors à remarquer que  $I(f) = \int_0^1 f(P(u))P'(u)du = I(g)$ , où  $g$  est la fonction

$$g(u) = f(P(u))P'(u).$$

Par construction de  $P$ , il se trouve que  $g$  et un certain nombre de ses dérivées s'annulent en 0 et 1. Il suffit donc d'appliquer la méthode des rectangles composite à  $g$  pour construire une méthode d'intégration d'ordre élevé :

LEMME 2. – Soit  $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction de classe  $C^{2k}$ . Soit  $P$  le polynôme donné par (7). Alors la fonction  $g$  définie sur  $[0, 1]$  par  $g(u) = f(P(u))P'(u)$  vérifie

$$g^{(j)}(0) = g^{(j)}(1) = 0 \text{ pour } 0 \leq j \leq 2k - 3$$

COROLLAIRE 1. – Soit  $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  une fonction de classe  $C^{2k}$ . Soit  $P$  le polynôme donné par (7). On pose

$$H_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} P' \left( \frac{j}{N} \right) f \left( P \left( \frac{j}{N} \right) \right), \quad (8)$$

alors il existe une constante  $G_k$  ne dépendant que de  $k$  telle que

$$|I(f) - H_N(f)| \leq G_k \sup_{x \in [0,1]} \sum_{i=0}^{2k} \left| f^{(i)}(x) \right| \frac{1}{N^{2k}}. \quad (9)$$

### 3. Généralisation à des fonctions singulières aux bornes de l'intervalle d'intégration

Un des avantages de la méthode de périodisation est qu'elle continue à fonctionner avec des fonctions admettant une singularité intégrable en une borne d'intégration. Supposons par exemple que  $f$  est de la forme

$$f(x) = \frac{h(x)}{x^\alpha} \quad (10)$$

sur l'intervalle  $[0, 1]$ , avec  $h$  de classe  $C^\infty$ ,  $h(0) \neq 0$  et  $0 \leq \alpha < 1$ . En posant

$$P(x) = \frac{\int_0^x t^{2m-2}(1-t)^{2m-2} dt}{\int_0^1 t^{2m-2}(1-t)^{2m-2} dt} \text{ avec } m \geq k, \quad (11)$$

on a

$$g(u) = f(P(u))P'(u) = \frac{h(P(u))P'(u)}{P(u)^\alpha},$$

par conséquent, la dérivée d'ordre  $2k$  de  $g(u)$  est équivalente en 0 à  $\lambda u^{2m-2-\alpha(2m-1)-2k}$ . Au vue de la formule (4), et à condition que  $m$  soit assez grand, on pourra obtenir une méthode d'ordre  $2k$ . Cette idée est précisée dans le théorème suivant

THÉORÈME 2. – Soit  $f$  une application comme dans (10) et  $P$  le polynôme défini par (11), alors il existe une constante  $C_\varepsilon > 0$  telle que

$$|I(f) - H_N(f)| \leq C_\varepsilon \frac{1}{N^{(2m-1)(1-\alpha)-\varepsilon}} \text{ pour tout } \varepsilon > 0. \quad (12)$$

Si la singularité en 0 est de type logarithmique, alors il suffit de remplacer  $\alpha$  par 0 dans l'estimation ci-dessus.

Démonstration. – On se ramène d'abord par un développement limité en 0 à l'intégration de  $1/x^\alpha$ . D'autre part on a:  $1 - \cos(2\pi l N t) = 2 \sin^2(\pi l N t) \sim 2(\pi l N t)^2$  au voisinage de 0, et la fonction  $f^{(2k)}(t) \frac{1 - \cos(2\pi l N t)}{(2\pi l N)^{2k}}$  sera intégrable sur  $[0, 1]$  si et seulement si l'exposant de  $t$  au voisinage de 0, qui est ici  $2m - 2 - \alpha(2m - 1) - 2k + 2$  est  $> -1$ . Si la partie entière de  $2m(1 - \alpha) + \alpha + 1$  est paire, on peut donc poser  $2k = E((2m - 1)(1 - \alpha)) + 2$  où  $E(\cdot)$  désigne la fonction partie entière. Posons alors  $2\beta = 2k - (2m - 1)(1 - \alpha) + \varepsilon$ . On peut choisir  $\varepsilon \geq 0$  assez petit tel que  $0 < 2\beta < 2$ . On a alors

$$\begin{aligned} \left| f^{(2k)}(t) \right| \frac{1 - \cos(2\pi l N t)}{(2\pi l N)^{2k}} &= \left| f^{(2k)}(t) \right| |\sin|^{2\beta}(\pi l N t) \frac{|\sin|^{2-2\beta}(\pi l N t)}{(2\pi l N)^{2k}} \\ &\leq C \left| f^{(2k)}(t) \right| |t|^{2\beta} \frac{|\sin|^{2-2\beta}(\pi l N t)}{N^{2k-2\beta}} \end{aligned}$$

pour  $\varepsilon > 0$ ,  $|f^{(2k)}(t)||t|^{2\beta}$  est dans  $L^1(]0, 1[)$  ce qui prouve l'estimation. Si la partie entière de  $2m(1 - \alpha) + \alpha + 1$  est impaire, un raisonnement analogue conduit au même résultat. Pour la singularité logarithmique, la démonstration est identique.  $\square$

#### 4. Applications numériques

##### 4.1. Ordre de la méthode de périodisation pour des fonctions régulières

Dans ce paragraphe, nous appliquons la méthode de périodisation pour diverses valeurs de  $k$  et pour la fonction  $f(x) = \exp(x)$  sur l'intervalle  $[0, 1]$ . Nous avons fait varier le nombre de points d'intégration  $N$  de 100 à 400, notre but étant de vérifier que l'estimation d'erreur (9) est optimale. Nous cherchons pour chaque  $k$  à montrer numériquement que

$$|I(f) - H_N(f)| \sim \frac{C_k}{N^\gamma}$$

et à déterminer  $C_k$  et  $\gamma$ . Cette détermination se fait en traçant le logarithme de l'erreur en fonction de  $\log N$  et en évaluant la pente de la courbe obtenue. Pour être exploitables, ces calculs ont dû être réalisés avec une précision de plusieurs centaines de chiffres significatifs.

On obtient les résultats suivants

$k$	$C_k$	$\gamma$	$2k$	$ I(f) - H_{10}(f) $	$ I(f) - H_{20}(f) $
2	$1.8571 \times 10^0$	3.9998	4	$0.18395 \times 10^{-3}$	$0.11588 \times 10^{-4}$
3	$3.7144 \times 10^1$	5.9998	6	$0.36831 \times 10^{-4}$	$0.57954 \times 10^{-6}$
4	$1.1098 \times 10^3$	7.9988	8	$0.10514 \times 10^{-4}$	$0.42957 \times 10^{-7}$
5	$4.8341 \times 10^4$	9.9961	10	$0.48090 \times 10^{-5}$	$0.45825 \times 10^{-8}$
10	$3.6130 \times 10^{14}$	19.976	20	$0.62706 \times 10^{-3}$	$0.81798 \times 10^{-9}$

L'estimation d'erreur que nous avons obtenue est donc clairement optimale. On observe une croissance importante des constantes  $C_k$  quand  $k$  augmente.

Cette méthode a pour vocation d'être utilisée sous sa forme composite et donc en général,  $N$  sera compris entre 5 et 20.

Pour ces valeurs de  $N$ , un bon choix de  $k$  semble être  $5 \leq k \leq 10$ .

##### 4.2. Ordre de la méthode de périodisation pour des fonctions admettant une singularité en 0

Nous effectuons les mêmes calculs qu'au paragraphe précédent, mais cette fois-ci pour  $f_1(x) = \frac{1}{x^{1/3}}$  et  $f_2(x) = \ln(x)$ .

Nous obtenons les résultats suivants pour la fonction  $f_1$

$m$	$C_m$	$\gamma$	$(2m - 1)(1 - \alpha)$	$ I(f) - H_{10}(f) $	$ I(f) - H_{20}(f) $
2	1.2158	2.0101	2	$0.11651 \times 10^{-1}$	$0.29039 \times 10^{-2}$
3	0.85385	3.3333	3.3333	$0.31289 \times 10^{-3}$	$0.35418 \times 10^{-4}$
5	39.567	6.0606	6	$0.24947 \times 10^{-4}$	$0.45152 \times 10^{-6}$
10	$0.46417 \times 10^6$	12.400	12.667	$0.38427 \times 10^{-5}$	$0.13577 \times 10^{-9}$

P. Helluy et al.

et les résultats suivants pour la fonction  $f_2$

$m$	$C_m$	$\gamma$	$(2m - 1)$	$ I(f) - H_{10}(f) $	$ I(f) - H_{20}(f) $
2	3.2220	3.0303	3	$0.30240 \times 10^{-2}$	$0.36694 \times 10^{-3}$
3	34.022	5.0505	5	$0.30579 \times 10^{-3}$	$0.93371 \times 10^{-5}$
5	30485.0	9.0909	9	$0.14231 \times 10^{-4}$	$0.42332 \times 10^{-7}$
10	$1.7347 \times 10^{14}$	19.057	19	$0.47492 \times 10^{-5}$	$0.91855 \times 10^{-11}$

L'estimation d'erreur (12) semble donc optimale.

Pour des valeurs de  $N$  de l'ordre de 10, un bon choix de  $m$  est ici aussi  $5 \leq m \leq 10$ .

### Références bibliographiques

- [1] Davis P., Rabinowitz P., Methods of numerical integration, second edition, Comp. Sci. and Applied Math., Academic Press, 1984.
- [2] Helluy P., Maire S., Ravel P., (to appear).
- [3] Iri M., Moriguti S., Takazawa Y., On a certain quadrature formula (in Japanese), Kokyuroku of Res., Inst. for Math. Sci., Kyoto Univ., Vol. 91, 1970, pp. 82–118.
- [4] Murota K., Iri M., Parameter tuning and repeated application of the IMT-type transformation in numerical quadrature, Numer. Math. 38 (1982) 347–363.
- [5] Takahasi H., Mori M., Quadrature formulas obtained by variable transformation, Numer. Math. 21 (1973) 206–219.