Intégration numérique

Alain Yves LE ROUX, Université Bordeaux 1

1 Définition du problème

Soit f une fonction mesurable, définie sur $]a,b[$. On veut évaluer

$$\int_a^b f(x)\,dx \quad .$$

Remarque : On peut , par un éventuel chagement de variable, se ramener au cas d'un intervalle $]a,b[$ borné. On va se placer dans le cas où f est bornée sur $]a,b[$ et continue par morceaux. De plus, on exclut le calcul direct de l'intégrale...

On découpe l'intervalle en N mailles de longueur $h = \dfrac{b-a}{N}$ et on pose $x_i = a + ih$, pour $i = 0, 1, ..N$. On a ainsi $x_0 = a$ et $x_N = b$.
On écrit

$$\int_a^b f(x)\,dx \;=\; \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx \;,$$

et en posant dans chaque maille $x = x_i + \dfrac{1+t}{2}h$, de façon à se ramener à une intégrale sur $]-1,1[$, il vient

$$\int_a^b f(x)\,dx \;=\; \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{2} \int_{-1}^{1} f(x_i + \frac{1+t}{2}h)\,dt \;. \tag{1.1}$$

Il suffit maintenant de construire des formules d'approximation d'intégrales sur $]-1,1[$.

2 Formules d'intégration sur $]-1,1[$

Soit g une fonction continue sur $[-1,1]$. On veut évaluer

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt$$

Typeset by the TEX-preprocessor PreTEX

par une formule qui soit exacte lorsque g est un polynôme de degré déterminé, en utilisant des valeurs de g en certains points. Bien entendu, on va chercher a atteindre le plus haut degré possible, pour assurer la précision, avec un minimum de points, pour réduire le temps calcul. Et le résultat sera un compromis entre les deux exigences.

2.1 Formules à un point :

Soit $t_0 \in [-1, 1]$. On propose une formule de la forme

$$\int_{-1}^{1} g(t)\, dt \;=\; \alpha\, g(t_0) \;\; . \tag{2.1}$$

On veut que la formule soit vraie pour les constantes : il faut prendre $\alpha = 2$. Si on consdère maintenant un polynôme de degré 1, on a $g(t) = g(0) + g'(0)t$, et

$$\int_{-1}^{1} g(t)\, dt \;=\; 2\, g(0) \;\; , \tag{2.2}$$

d'où, en prenant $t_0 = 0$, $\alpha = 2$, on obtient une formule exacte pour les polynômes de degré 1.

Proposition 2.1 *On suppose $g \in C^2([-1,1])$ et on pose $A_2(g) = \sup\limits_{-1<\theta<1} \left| g''(\theta) \right|$; alors*

$$\left| \int_{-1}^{1} g(t)dt \;-\; 2g(0) \right| \;\le\; \frac{A_2(g)}{3} \quad . \tag{2.3}$$

Démonstration : On a $g(t) = g(0) + tg'(0) + \frac{t^2}{2} g''(\theta(t))$, où $-1 < \theta(t) < 1$. Donc

$$\left| \int_{-1}^{1} g(t)dt \;-\; 2g(0) \right| \;\le \left| \int_{-1}^{1} \frac{t^2}{2}\, g''(\theta(t))dt \right| \le \frac{A_2(g)}{3} \quad ,$$

d'où le résultat.□

On revient maintenant à l'intégrale sur $[a, b]$ par (1.1).
On suppose $f \in C^2([a,b])$ et on pose $M_2(f) = \sup\limits_{a<\xi<b} \left| f''(\xi) \right|$.

Proposition 2.2 *La formule*

$$\int_a^b f(x)dx \;\approx\; h \sum_{i=0}^{N-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) \;\; , \tag{2.4}$$

est exacte pour les polynômes de degré 1, et pour $f \in C^2([-1,1])$, on a l'estimation

$$\left| \int_a^b f(x)dx \;-\; h \sum_{i=0}^{N-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) \right| \;\le\; (b-a)\, \frac{h^2}{24}\, M_2(f) \;\; . \tag{2.5}$$

Démonstration : On a à partir de (2.3),

$$\left| \int_a^b f(x)dx \;-\; h \sum_{i=0}^{N-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) \right| \;\le\; \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{A_2(g_i)}{3} \; ,$$

en posant $g_i(t) = f(x_i + \frac{1+t}{2}h)$. De plus, en dérivant deux fois, on a

$$A_2(g_i) \;\leq\; \frac{h^2}{4}\; M_2(f) \;\;,$$

d'où le résultat en remarquant que $\sum_{i=1}^{N-1} h = (b-a)$.$\square$

Remarque : La formule demande N évaluations de la fonction f et l'erreur est d'ordre deux pour les fonctions de classe C^2. En ne prenant pas l'évaluation en milieu de maille, on aurit le même nombre d'évaluations mais seulement une erreur d'ordre un.

2.2 Formules à deux points

On étudie maintenant des formules de la forme

$$\int_{-1}^{1} g(t)\; dt \;=\; \alpha g(t_0) + \beta g(t_1) \;\;, \tag{2.6}$$

avec $\alpha \neq 0,\; \beta \neq 0$ et $-1 \leq t_0 \leq t_1 \leq 1$.

On a le choix entre fixer a priori les paramètres t_0 et t_1, ou au contraire les déterminer de façon à assurer la validité de la formule pour les polynômes de degré le plus élevé possible.

Le choix a priori de $t_0 = -1$ et de $t_1 = 1$ conduit à la *formule des trapèzes*

$$\int_a^b \; f(x)\; dx \;\approx\; T_h(f) = \frac{h}{2}\; f(a) + h \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + \frac{h}{2} f(b) \;\; . \tag{2.7}$$

En effet, en prenant dans (2.6), $g(t) = 1$ puis $g(t) = t$, on obtient $\alpha + \beta = 2, \alpha = \beta$, d'où $\alpha = \beta = 1$. On aura le même ordre de précision que dans le cas précédent, avec $N+1$ évaluations de f.

Dans le cas de la détermination optimale de t_0 et de t_1, on obtient les équations suivantes :
pour $g(t) = 1$, $\alpha + \beta = 2$,
pour $g(t) = t$, $\alpha t_0 + \beta t_1 = 0$,
pour $g(t) = (t - t_0)(t - t_1)$, $\frac{2}{3} + 2t_0 t_1 = 0$, pour $g(t) = t(t-t_0)(t-t_1)$, $-\frac{2}{3}(td0 + t_1) = 0$.
On en déduit immédiatement

$$t_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}\;,\; t_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\;,\; \alpha = \beta = 1. \tag{2.8}$$

et la formule est exacte pour les polynômes de degré ≤ 3. Ces points $t_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ et $t_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ sont appelés *points de Gauss*. Ceci conduit à la formule :

$$\int_a^b \; f(x)dx \;\;\approx\;\; G_h(f) \;\;=\;\; \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \left(f(x_i + \frac{h}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}) + f(x_i + \frac{h}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}) \right) \tag{2.9}$$

2.3 Formules à trois points

On cherche des formules de la forme

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \;=\; \alpha g(t_0)+\beta g(t_1)+\gamma g(t_2) \;\;,$$

avec $t_0 < t_1 < t_2,\ \alpha \neq 0,\ \beta \neq 0,\ \gamma \neq 0$. Pour le choix a priori : $t_0=-1,\ t_1=0,\ t_1=1$, on obtient les équations suivantes :

pour $g(t)=1$, $\quad \alpha+\beta+\gamma=2$,
pour $g(t)=t$, $\quad -\alpha+\gamma=0$,
pour $g(t)=t^2$, $\quad \alpha+\gamma=\frac{2}{3}$.

On obtient $\alpha=\gamma=\frac{1}{3},\ \beta=\frac{4}{3}$ et cette formule est vraie (au moins) pour les polynômes de degré ≤ 2. Cependant, pour $g(t)=t^3$, on vérifie aussi que la formule est exacte. Ce n'est pas le cas pour $g(t)=t^4$. En conclusion, la formule

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \;=\; \frac{1}{3}\left(g(-1)+4g(0)+g(1)\right) \;\;, \tag{2.10}$$

est exacte pour les polynômes de degré ≤ 3.

On peut maintenant essayer de déterminer les points $t_0,\ t_1,\ t_2$ et les paramètres $\alpha,\ \beta,\ \gamma$ tesl que la formule soit vraie pour un degré maximal de polynôme (on peut espérer le degré 5). Un cacul direct est long, les formules n'étant pas linéaires, et on peut utiliser quelques arguments de symétrie. En effet, pour toute fonction g,

$$\int_{-1}^{1} g(t)\,dt \;=\; \int_{-1}^{1} g(-t)\,dt \;,$$

d'où, pour les polynômes concernés,

$$\alpha g(t_0)+\beta g(t_1)+\gamma g(t_2) \;=\; \alpha g(-t_0)+\beta g(-t_1)+\gamma g(-t_2) \;\;.$$

Prenons $g(t)=\ t(t^2-t_0^2)(t^2-t_2^2)$; il vient : $2\beta t_1(t_1^2-t_0^2)(t_1^2-t_2^2)=0$, qui est vérifié pour $t_1=0$, ou pour $t_1=-t_0$ avec $-t_0<t_2$, ou encore pour $t_1=-t_2$ avec $-t_2<t_2$ et donc $t_2>0$ dans chaque cas.
On prend ensuite $g(t) \;=\; t(t^2-t_0^2)$, qui conduit à $\gamma t_2(t_2^2-t_0^2)=0$. Comme $\gamma\neq 0$ et $t_2>0,\ t_2\neq t_0$, il reste $t_0+t_2=0$. Ceci permet d'exclure, dans les cas précédents, les éventualités $t_1=-t_0$ et $t_1=-t_2$. Il ne reste donc que l'éventualité $t_1=0$. Prenons enfin $g(t)=t^2(t^2-t_0^2)$, et on obtient l'équation $\frac{2}{5}-\frac{2}{3}t_0^2=0$. On en déduit

$$t_0 \;=\; -\sqrt{\frac{3}{5}} \;\;,\;\; t_1 \;=\; 0 \;\;,\;\; t_2 \;=\; \sqrt{\frac{3}{5}} \;\;.$$

Il reste à tester 3 polynômes pour déterminer $\alpha,\ \beta$ et γ.
pour $g(t)=1$, $\quad \alpha+\beta+\gamma=2$,
pour $g(t)=t$, $\quad -\alpha\sqrt{\frac{3}{5}}+\gamma\sqrt{\frac{3}{5}}=0$,

pour $g(t) = t^2$, $\qquad (\alpha+\gamma)\,\frac{3}{5} \;-\; \frac{2}{3} = 0.$

On en déduit $\alpha = \gamma$, puis $\alpha = \gamma = \frac{5}{9}$, $\beta = \frac{8}{9}$. Ceci conduit à la formule

$$\int_{-1}^{1} g(t)\ dt \ = \ \frac{1}{9}\left(5\, g(-\sqrt{\frac{3}{5}}\ ) \ + \ 8\, g(0) \ + \ 5\, g(\sqrt{\frac{3}{5}}\ )\right) , \tag{2.11}$$

qui est exacte pour les polynômes de degré ≤ 5.

3 Estimations d'erreur

Dans un exemple précédent, le choix $t_0 = -1,\ t_1 = 0,\ t_1 = 1$ conduit à la formule

$$\int_a^b f(x)dx \ \approx\ S_h(f) \ = \ \frac{h}{6}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{N-1} f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(b)\right) \ , \tag{3.1}$$

appelée *formule de Simpson.*

Théorème 3.1 *Soit* $f \in C^4([a,b])$ *; on pose* $M_4(f) = \sup\limits_{\mathrm{a}<\theta<\mathrm{b}} \left|\mathrm{f}^{(4)}(\theta)\right|$, *alors*

$$\left|\int_a^b f(x)dx - S_h(f)\right| \ \leq\ \frac{b-a}{2880}\, M_4(f)\ h^4\, , \tag{3.2}$$

et

$$\left|\int_a^b f(x)dx \ - \ G_h(f)\right| M < \ \frac{b-a}{4320}\, M_4(f)\ h^4 \ . \tag{3.3}$$

Remarques : Les nombres d'évaluations sont comparables dans les deux cas : $2N+1$ et $2N$.

Démonstration : On commence par majorer

$$\left|\int_{-1}^{1} g(t)\ dt \ - \ \frac{1}{3}\left(g(-1) + 4g(0) + g(1)\right)\right| \ ,$$

en fonction de $A_4(g) = \sup\limits_{-1<t<1}\left|g^{(4)}(t)\right|$, pour $g \in C^4([a,b])$.

On considère le polynôme de degré 3

$$p(t) = (t-\frac{1}{2})\left(\frac{t(1-t)}{3}g(-1) + 2(t^2-1)g(0) + t(1+t)g(1)\right) + \frac{8}{3}t(1-t^2)g(\frac{1}{2})\ .$$

On a $p(\frac{1}{2}) = g(\frac{1}{2})$, $p(0) = g(0)$, $p(-1) = g(-1)$, $p(1) = g(1)$, et ainsi p interpole g aux points $-1, 0, \frac{1}{2}$ et 1 . On aura en particulier

$$\int_{-1}^{1} p(t)\ dt \ = \ \frac{1}{3}\left(g(-1) + 4g(1) + g(0)\right)\ .$$

On considère la fraction

$$q(t) \ = \ \frac{g(t)-p(t)}{t(t-1)(t+1)(t-\frac{1}{2})} \quad \text{si } t \notin \{-1, 0, \frac{1}{2}, 1\} \ (= \{t_0, t_1, t_2, t_3\})$$

et si $t = t_j \in \left\{t_0, t_1, t_2, t_3\right\}$,

$$q(t_j) \ = \ \frac{g'(t_j) - p'(t_j)}{\prod_{i\neq j}(t_j - t_i)} \qquad .$$

On pose ensuite, pour t fixé ($t \neq t_j$),

$$\varphi(s) \ = \ g(s) \ - \ p(s) \ - \ \left(\prod_{i=0}^{3}(s-t_j)\right) \ q(t) \ .$$

On connait 5 racines de φ, à savoir t_0, t_1, t_2, t_3 et t. Il y a au moins 5 racines, et donc la dérivée φ' s'annule au moins 4 fois, et ensuite, la dérivée seconde φ''s'annule au mois 3 fois, puis φ''' s'annule au moins 2 fois, et enfin la dérivée quatrième $\varphi^{(iv)}$ est nulle au moins une fois. On en déduit

$$\exists \ \theta \ \in]-1, 1[\ \ \varphi^{(iv)}(\theta) \ = \ 0 \ .$$

Or, en dérivant quatre fois : $\varphi^{(iv)}(s) = g^{(iv)}(s) - (4!)q(t)$. on en déduit

$$q(t) \ = \ \frac{g^{(iv)}(\theta)}{4!} \ ,$$

ou encore

$$g(t) \ = \ p(t) \ + \ t(t-1)(t+1)(t-\frac{1}{2}) \, \frac{g^{(iv)}(\theta)}{4!} \ .$$

On obtient

$$\left|\int_{-1}^{1} g(t)dt \ - \ \int_{-1}^{1} p(t)dt\right| \ \leq \ \frac{A_4(g)}{4!} \left|\int_{-1}^{1} t(t-1)(t+1)(t-\frac{1}{2})dt\right| \leq \frac{A_4(g)}{90}$$

en revenant à f, sachant que

$$g^{(iv)}(t) \ = \ (\frac{h}{2})^4 \, f^{(iv)}(x_i + \frac{1+t}{2}h) \ ,$$

on obtient

$$\left|\int_a^b f(x)dx - S_h(f)\right| \leq \sum_{i=0}^{N-1} (\frac{h}{2})^5 \, \frac{M_4(f)}{90} \ \leq \ \frac{b-a}{2880} \, M_4(f) \, h^4 \ .$$

L'autre partie du théorème résulte de techniques analogues. □

3.1 Les points de Gauss et les polynômes orthogonaux

Soit w une fonction intégrable sur $[a, b]$, positive, et h_n une famille de polynômes orthogonaux associés au produit scalaire

$$(u, v) \; = \; \int_a^b w(x) \; u(x) \; v(x) \; dx \; .$$

On considère une formule d'intégration de la forme

$$\int_a^b f(x) \; w(x) \; dx \; \approx \; \sum_{j=0}^{n} A_{j,n}(w) \; f(x_j) \quad , \tag{3.4}$$

où les x_j sont les $n+1$ racines de h_{n+1}.

Proposition 3.2 *La formule(3.4) est exacte pour les polynômes de degré $\leq n$ lorsque*

$$A_{j,n}(w) \; = \; \int_a^b \; L_{j,n}(x) \; w(x) \; dx \qquad \text{où} \quad L_{j,n}(x) = \prod_{i \neq j} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)}$$

Démonstration : On a $L_{j,n}(x_k) = 0$ si $k \neq j$, et $L_{j,n}(x_j) = 1$ et $L_{j,n}$ est un polynôme de degré n. Si p est un polynôme de degré $\leq n$, onpeut écrire

$$p(x) \; = \; \sum_{j=0}^{n} \; L_{j,n}(x) \; p(x_j)$$

donc

$$\int_a^b p(x) \; w(x) \; dx \; = \; \sum_{j=0}^{n} \; p(x_j) \int_a^b \; L_{j,n}(x) \; w(x) \; dx \; .$$

d'où le résultat.□

Théorème 3.3 *Cette formule (3.4) est encore vraie pour les polynômes de degré $2n+1$.*

Démonstration :Soit p un polynôme de degré $n + k$ ($k \geq 0$). On a, par une division polynômiale

$$p(x) \; = \; q(x) \; h_{n+1}(x) \; + \; r(x) \quad ,$$

où q est un polynôme de degré $k - 1$ et r est un polynôme de degré $\leq n$. On a

$$\int_a^b q(x) \; h_{n+1}(x) \; w(x) \; dx \; = \; 0$$

si $k \leq n + 1$. En effet, q est de degré n et eut s'exprimer en fonction des $h_0, h_1, ..h_n$, qui sont tous orthogonaux à h_{n+1}. Il reste donc

$$\int_a^b \; p(x)w(x)dx \; = \; \int_a^b r(x)w(x)dx \; ,$$

où le degré de r est inférieur ou égal à n. On peut donc appliquer la formule

$$\int_a^b r(x)w(x)dx \; = \; \sum_{j=0}^{n} A_{j,n}(w) \; r(x_j) \quad .$$

Or, $p(x_j) = q(x_j)h_{n+1}(x_j)+r(x_j) = r(x_j)$, d'où le résultat pour tout p de degré $n+k$, avec $k \leq n+1$, et donc pour tout p de degré $\leq 2n+1$.$\square$

3.1.1 Application

On considère les polynômes de Legendre sur $]-1,1[$, donc avec $w=1$.

Pour $n=1$, on a $p_2(x) = -4(1-3x^2)$ dont les racines sont $\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$. On note $x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ et $x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$. On a alors

$$L_{0,1}(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1}\ ,\ L_{1,1}(x) = \frac{x-x_0}{x_1-x_0},\ \ A_{j,1}(w) = \int_{-1}^{1} L_{j,1}(x)\,dx\ \ .$$

On trouve $A_{j,1}(w) = 1$, et on retrouve la formule de Gauss à deux points. On avait déjà remarqué qu'elle restait vraie pour les polynômes de degré 3 $(=2n+1)$.

Pour $n=2$, on a $p_3(x) = \frac{d^3}{dx^3}(1-x^2)^3 = 24x(3-5x^2)$.

On retrouve les racines $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}},\ x_1 = 0,\ x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$, puis

$$L_{0,2}(x)\ =\ \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\ =\ \frac{5}{6}\,(x^2 - x\sqrt{\frac{3}{5}})\ \ ,$$

d'où $A_{02}(w) = \frac{5}{9}$.

De même

$$L_{1,2}(x)\ =\ 1-\frac{5}{3}x^2\ ,\ A_{1,2}(w) = \frac{8}{9}\ \ ;\ \ L_{2,2}(x) = \frac{5}{6}\,(x^2 + x\sqrt{\frac{3}{5}})\ ,\ A_{2,2}(w) = \frac{5}{9}\ \ ,$$

qui permet de retrouver la formulde de Gauss à trois points, qui reste vraie jusqu'à l'ordre $2n+1=5$.

4 Formules d'intégration dans le plan

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^2$, de frontière polygonale.
Soit f une fonction continue sur $\overline{\Omega}$. On veut évaluer

$$\int\int_{\Omega} f(x,y)\,dxdy\ . \tag{4.1}$$

On découpe $\overline{\Omega}$ en éléments $K_{i,i\in J}$ tels que
- chaque K_i est un triangle fermé, d'intérieur non vide
- si $i \neq j$ alors $\overset{\circ}{K_i} \cap \overset{\circ}{K_j} = \emptyset$,
- $\cup_{j\in J}\ K_j\ =\ \overline{\Omega}$,
- si $K_i \cap K_j \neq \emptyset$, alors ils ont au moins deux sommets en commun.

Une telle partition de Ω est appelées *triangulation*.

Remarque : Si A est sommet d'un triangle, il est aussi sommet de tous les triangles qui le contiennent.

On aura
$$\int\int_{\Omega} f(x,y)\,dxdy \;=\; \sum_{i\in J} \int\int_{K_i} f(x,y)\,dxdy \;\; , \tag{4.2}$$
Comme dans le cas prédédent, on va faire un changement de variable pour se ramener à un triangle fixe, appelé *triangle de référence* noté $\hat{K}$. On prend
$$\hat{K} \;=\; \{(\xi,\eta) \mid \xi \geq 0,\; \eta \geq 0,\; \xi+\eta \leq 1\,\} \tag{4.3}$$
et on note φ_i une application affine qui transforme K_i en $\hat{K}$. On aura maintenant
$$\int\int_{\Omega} f(x,y)dx \;=\; \sum_{i\in J} \int\int_{\hat{K}} f\Big(\varphi_i^{-1}(\xi,\eta)\Big)\; |J_i(\xi,\eta)|\; d\xi d\eta \;, \tag{4.4}$$
où J_i est le jacobien associé à la transformation φ_i.

Calcul du jacobien J_i :
On note $A_1,\; A_2,\; A_3$ les sommets de K_i et on construit de telle façon que
$$\varphi_i(A_1) = (0,0) \;\;;\;\; \varphi_i(A_2) = (1,0) \;\;;\;\; \varphi_i(A_3) = (0,1) \;\; .$$
En notant $A_j(x_j, y_j)$, on obtient une trtansformation de la forme
$$\begin{array}{rcl} \xi &=& a(x-x_1) \;+\; b(y-y_1) \\ \eta &=& c(x-x_1) + \; d(y-y_1) \end{array} .$$
On identifie en A_2 et en A_3 :
$$\begin{array}{rcl} a\,(x_2-x_1) \;+\; b(y_2-y_1) &=& 1 \\ a\,(x_3-x_1) \;+\; b(y_3-y_1) &=& 0 \;. \end{array}$$
D'où, en posant $\Delta_i = (x_2-x_1)(y_3-y_1) - (x_3-x_1)(y_2-y_1)$,
$$a \;=\; \frac{y_3-y_1}{\Delta_i} \;\;;\;\; b \;=\; -\,\frac{x_3-x_1}{\Delta_i} \;\; .$$
De la même façon, on obtient
$$c \;=\; -\,\frac{y_2-y_1}{\Delta_i} \;\;;\;\; d \;=\; \frac{x_2-x_1}{\Delta_i} \;\; .$$
On peut remarquer, en utilisant le produit vectoriel dans le plan, que $\Delta_i \;=\; A_1A_2 \wedge A_1A_3 \;=\; 2\;S_i$, en notant S_i la surface du triangle K_i. On en déduit pour un point M de coordonnées (x,y),
$$\xi \;=\; \frac{1}{\Delta_i}\,\big((x-x_1)(y_3-y_1) - (x_3-x_1)(y-y_1)\big) \;=\; \frac{A_1M \wedge A_1A_3}{A_1A_3 \wedge A_1A_3} \;=\; \frac{\sigma_2(M)}{S_i}$$
où $\sigma_2(M)$ désigne la surface du triangle A_1A_2M. On a $\xi = \lambda_2(M)$, coordonnée barycentrique.
De la même façon, on trouve
$$\eta \;=\; \frac{A_1M \wedge A_1A_2}{A_1A_3 \wedge A_1A_2} \;=\; \frac{\sigma_3(M)}{S_i} \;=\; \lambda_3(M) \;,$$

où $\sigma_3(M)$ désigne la surface du triangle A_1A_3M.

On peut maintenant évaluer le jacobien :

$$J_i^{-1}(\xi,\eta) \;=\; \left\| \begin{matrix} \frac{\partial\xi}{\partial x} & \frac{\partial\xi}{\partial y} \\ \frac{\partial\eta}{\partial x} & \frac{\partial\eta}{\partial y} \end{matrix} \right\| \;=\; \frac{\Delta_i}{(\Delta_i)^2} \;=\; \frac{1}{\Delta_i} \;=\; \frac{1}{2\,S_i}\,,$$

et on remarque que J_i est une constante, égale à deux fois la surface de K_i. La nouvelle formulation devient

$$\int\int_\Omega f(x,y)\,dxdy \;=\; \sum_{i\in J} 2\,S_i \int\int_{\hat{K}} f\circ\varphi_i(\xi,\eta)d\xi d\eta.$$

Il reste à obtenir des formules valables dur $\hat{K}$. On étudie deux cas.

Interpolation par une fonction affine

On prend $p(\xi,\eta) \;=\; a \;+\; b\xi \;+\; c\eta$ avec $p(0,0) = f(A_1),\ p(1,0) = f(A_2),\ p(0,1) = f(A_3)$. On trouve

$$a \;=\; f(A_1),\;\; b \;=\; f(A_2) - f(A_1),\;\; c \;=\; f(A_3) - f(A_1).$$

D'autre part,

$$\int\int_{\hat{K}} \xi\; d\xi d\eta \;=\; \int_0^1 \xi(\int_0^{1-\xi} d\eta)\; d\xi \;=\; \frac{1}{6}\;.$$

De même,

$$\int\int_{\hat{K}} \eta\; d\xi d\eta \;=\frac{1}{6}\;.$$

On obtient donc, en remarquant que $mes(\hat{K}) = \frac{1}{2}$,

$$\int\int_{\hat{K}} p(\xi,\eta)\; d\xi d\eta \;=\; \frac{1}{6}\,(f(A_1)+f(A_2)+f(A_3))$$

En revenant à un triangle quelconque K_i de la triangulation, on obtient

$$\int\int_{K_i} f(x,y)dxdy \;=\frac{S_i}{3}\,(f(A_1)+f(A_2)+f(A_3))\;, \tag{4.5}$$

et dans une formule générale sur Ω, on retrouve un poids, pour chaque sommet A égal au tiers de la somme des surfaces des triangles adjascents.

Interpolation par une fonction quadratique.

On prend $p(\xi,\eta) \;=\; a + b\xi + c\eta + \lambda\xi^2 + \mu\xi\eta + \nu\eta^2$, avec

$$\begin{array}{c} p(0,0) \;=\; f(A_1),\;\; p(1,0) \;=\; f(A_2)\;,\;\; p(0,1) \;=\; f(A_3) \\ p(\frac{1}{2},\,\frac{1}{2}) \;=\; f(M_1)\;,\;\; p(0,\frac{1}{2}) \;=\; f(M_2)\;,\;\; p(\frac{1}{2},0) \;=\; f(M_3) \end{array}$$

àù M_1 désigne le milieu du coté A_2A_3, M_2 le milieu du coté A_3A_1 et M_3 le milieu du coté A_1A_2. On obtient le système

$$\begin{array}{rcl} a & = & f(A_1) \\ a \;+\; b \;+\; \lambda & = & f(A_2) \\ a \;+\; \frac{b}{2} \;+\; \frac{\lambda}{4} & = & f(M_3) \end{array}$$

qu'on résout :

$$\begin{aligned} a &= f(A_1) \\ \lambda &= 2\,f(A_2) + 2\,f(A_1) - 4\,f(M_3) \\ b &= 4\,f(M_3) - f(A_2) - 3\,f(A_1) \end{aligned}$$

On a de la même façon le système

$$\begin{aligned} a + c + \nu &= f(A_3) \\ a + \tfrac{c}{2} + \tfrac{\nu}{4} &= f(M_2) \end{aligned}$$

qu'on résout par :

$$\begin{aligned} \nu &= 2\,f(A_3) + 2\,f(A_1) - 4\,f(M_2) \\ c &= 4\,f(M_2) - f(A_3) - 3\,f(A_1) \end{aligned}$$

Il reste à évaluer μ ; on se place en $(\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ pour obtenir (après avoir ajouté a) :

$$2a + \frac{b}{2} + \frac{c}{2} + \frac{\lambda}{4} + \frac{\mu}{4} + \frac{\nu}{4} = a + f(M_1)$$

d'où

$$\mu = 4\,(f(A_1) + f(M_1) - f(M_2) - f(M_3)) \ .$$

On calcule ensuite les intégrales

$$\begin{aligned} \textstyle\int\int_{\hat{K}} \xi^2\, d\xi d\eta &= \textstyle\int_0^1 \xi^2\,(\int_0^{1-\xi} d\eta\,) = \frac{1}{12}\ , \\ \textstyle\int\int_{\hat{K}} \eta^2\, d\xi d\eta &= \tfrac{1}{12} \\ \textstyle\int\int_{\hat{K}} \xi\eta\, d\xi d\eta &= \textstyle\int_0^1 \xi(\int_0^{1-\xi} \eta\, d\eta)\, d\xi = \frac{1}{24} \end{aligned}$$

On obtient

$$\int\int_{\hat{K}} p(\xi,\eta)\, d\xi d\eta = \frac{a}{2} + \frac{b}{6} + \frac{c}{6} + \frac{\lambda}{12} + \frac{\nu}{12} + \frac{\mu}{24}$$

qui donne

$$\int\int_{\hat{K}} p(\xi,\eta)\, d\xi d\eta = \frac{1}{6}\,(f(M_1) + f(M_2) + f(M_3))\ .$$

En reportant dans une formule sur K_i, on obtient

$$\int\int_{K_i} f(x,y)\, dxdy = \frac{S_i}{3}\,(f(M_1) + f(M_2) + f(M_3))\ . \tag{4.6}$$

Ainsi, dans une formule sur Ω, les poids associés aux sommets des triangles sont nuls, ceux associés aux milieux des cotés inclus dans Ω, sont égaux au tiers de la somme des surfaces des deux triangles adjascents, et ceux associés aux milieux des cotés situés sur la frontère au sixiéme de la surface du seul triangle adjascent.

Si on note

N_T le nombre total de triangles,

N_i le nombre de sommets de triangles inclus dans Ω,

N_f le nombre de sommets de triangles situés sur la frontière,

C_i le nombre de cotés de triangles inclus dans Ω,

C_f le nombre de cotés de triangles situés sur la frontière,

on vérifie aisément les formules

$$N_T = 2\,N_i + N_f - 2 = \frac{1}{3}\,(2\,C_i + C_f)\,.$$

Lorsque N_T est grand, le rapport $\frac{C_i}{N_i}$ devient proche de 3. Il y a donc asymptotiquement trois fois plus de cotés intérieurs que de sommets intérieurs. La formule aux milieux de cotés (4.6) exige donc trois plus d'évaluations de la fonction f que la formule aux sommets (4.5). Une étude de précision montre que la formule aux sommets (4.5) est précise à l'ordre 2 et la formule aux milieux de cotés (4.6) est précise à l'ordre 3.

5 Exemples et Applications.

Exemple du problème aux limites

On reprend l'exemple

$$\begin{array}{c} a(x)\,y \;-\; (b(x)\,y')' \;=\; g \\ y(-1) \;=\; y(1) \;=0 \end{array} \tag{5.1}$$

On avait défini une base $\{q_j\}$ par

$$q_i(x) \;=\; \left\{ \begin{array}{cc} \frac{x-(i-1)h}{h} & si\ (i-1)h < x < ih \\ -\ \frac{x-(i+1)h}{h} & si\ ih \leq x < (i+1)h \\ 0 & ailleurs \end{array} \right.$$

et sur laquelle on va exprimer la solution approchée. On doit donc évaluer

$$a_{ij} \;=\; \int_{-1}^{1} \left(a(x)\,q_j(x)\,q_i(x) \;+\; b(x)\,q_j'(x)\,q_i'(x)\right) dx$$

On a $a_{ij} = a_{ij}$ et $a_{ij} = 0$ si $|i-j| \geq 2$. Il ne reste donc qu'à évaluer a_{ii} et $a_{i,i+1}$. On se propose d'utiliser la méthode des trapèzes. On obtient

$$\int_{-1}^{1} a(x)\,q_i(x)^2\,dx \;\approx\; h\,a(x_i)\;,$$

$$\int_{-1}^{1} b(x)\,(q_i'(x))^2\,dx \;\approx\; \frac{b(x_{i-1}) \;+\; 2b(x_i) \;+\; b(x_{i+1})}{2\,h}\;,$$

d'où

$$a_{ii} \;=\; h\,a_i \;+\; \frac{1}{2h}\,(b_{i+1} \;+\; 2b_i \;+\; b_{i-1})\;\;.$$

De la même façon, on obtient

$$\int_{-1}^{1} a(x)\,q_i(x)\,q_{i+1}(x)\,dx \;\approx\; 0\;,$$

car le produit $q_i q_{i+1}$ est nul en chaque noeud x_k, et

$$\int_{-1}^{1} b(x)\, q_i'(x)\, q_{i+1}'(x)\, dx \;\approx\; -\frac{b(x_i)+b(x_{i+1})}{2h} \;,$$

d'où

$$a_{i,i+1} \;=\; -\,\frac{1}{2h}\,(b_i \,+\, b_{i+1}) \;.$$

On remarque que la symétrie est conservée, et surtout que les termes en a_i ne sont présents que sur la diagonale. Il s'agit d'une matrice tridiagonale. En utilisant une formule plus précise, faisant intervenir plus de points, on aurait des termes en a_j hors diagonale, donc une diagonale "moins dominante", et une structure de matrice plus "pleine". Cette matrice en sera d'autant plus difficile à inverser. Il y a donc un compromis a définir, entre la précision d'une part et la facilité du calcul d'autre part.

Extrapolation à la limite :
On considère la formule des trapèzes, qui constitue une approximation à l'ordre deux. On a effectivement un développement de la forme

$$T_h(f) \;=\; \int_a^b f(x)dx \;+\; A(f)\,h^2 \;+\; A'(f)\,h^4 \;+\; A''(f)\,h^6 \;+\; ...$$

En considérant le pas $\frac{h}{2}$, on a

$$T_{h/2}(f) \;=\; \int_a^b f(x)dx + \frac{A(f)}{4}\,h^2 \;+\; \frac{A'(f)}{16}\,h^4 \;+\; \frac{A''(f)}{64}\,h^6 \;+\; ..$$

En tronquant à l'ordre deux, on obtient

$$A(f)\,h^2 \;=\; \frac{4}{3}\,(T_h(f) \;-\; T_{h/2}(f)) \;,$$

puis

$$\int_a^b f(x)\,dx \;\approx\; -\,\frac{1}{3}\,T_h(f) \;+\; \frac{4}{3}\,T_{h/2}(f) \;. \tag{5.2}$$

On a obtenu une nouvelle formule. En explicitant cette dernière formule on s'aperçoit qu'on a tout simplement reconstruit la formule de Simpson, dont la précision est d'ordre 4. On peut recommencer cette technique en tronquant à un ordre supérieur, par exemple l'ordre 4, les développements de $T_h(f)$, $T_{h/2}(f)$ et $T_{h/4}(f)$, puis résoudre en $A(f)$, $A'(f)$ et $\int f(x)dx$. On obtiendra une formule précise à l'ordre 6. Cette technique est appelée "extrapolation de Richardson, ou extrapolation à la limite. Elle trouve bien d'autres applications, comme accélérateur de convergence en particulier.