Dérivation numérique

Pascal Romon

Dérivation numérique

Problématique :

Étant donnée une fonction f, on veut estimer la dérivée f' de f en un point x.

Dérivation numérique

"Fonctions" étudiées :

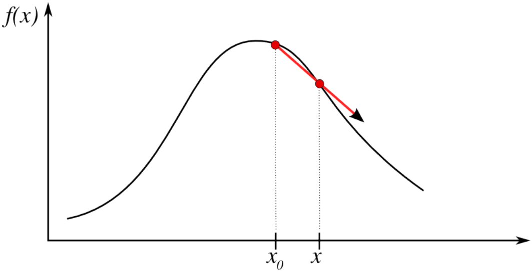
- fonctions explicites
  (fonctions données par des formules comprenant les fonctions usuelles)
  $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$, continues et dérivables
- fonctions non explicites, mais évaluables en n'importe quel point (par ex. fonctions intégrales, données par des algorithmes etc.)
- un ensemble de points représentant une fonction supposée continue, voire *régulière*

Dérivation numérique

Applications :

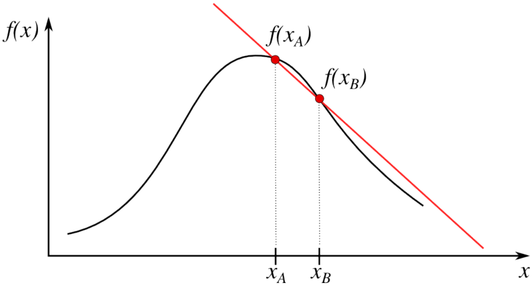
- Résolution de systèmes physiques
- Traitement d'image ou du signal
- ...

Dérivée



$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

Dérivée



$$\underbrace{\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}}_{\text{dérivée}} \quad \text{ressemble à} \quad \underbrace{\frac{f(x_B)-f(x_A)}{x_B-x_A}}_{\text{coefficient directeur d'une droite}}$$

Calcul de la dérivée

Si l'on a l'expression de la fonction, on peut la dériver en utilisant des méthodes de calcul formel (maple/mupad).

Et si on ne l'a pas ? $\rightarrow$ on peut en faire une estimation.

Dérivée

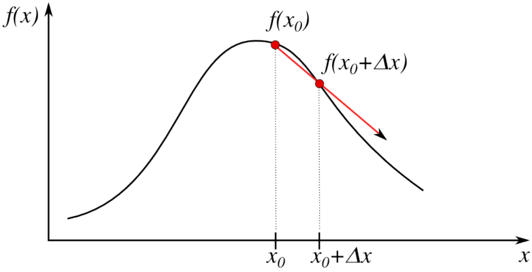
la formulation :

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

est équivalente à :

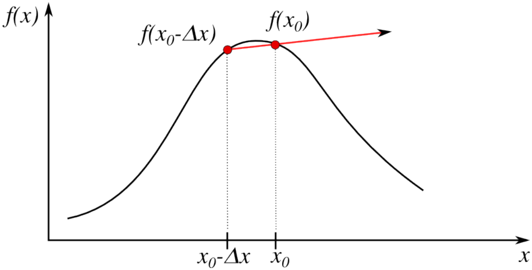
$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

Dérivée avant



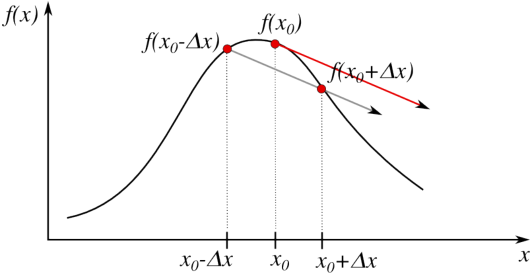
$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

Dérivée arrière



$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}$$

Dérivée centrée



$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Calcul d'erreur

Formule de Taylor en x_0 à l'ordre 3:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \cdots$$

On pose $\Delta x = x - x_0$

$$f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$f(x_0 - \Delta x) = f(x_0) - f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

Calcul d'erreur

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$f(x_0-\Delta x) = f(x_0) - f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$\frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = f'(x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^1 + \cdots$$

- dérivée avant
- $\Delta x^1 \rightarrow$ ordre 1

Calcul d'erreur

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$f(x_0-\Delta x) = f(x_0) - f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$\frac{f(x_0) - f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} = f'(x_0) - \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^1 + \cdots$$

- dérivée arrière
- $\Delta x^1 \rightarrow$ ordre 1

Calcul d'erreur

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$f(x_0-\Delta x) = f(x_0) - f'(x_0)\Delta x + \frac{f''(x_0)}{2!}\Delta x^2 - \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

● — ● $$f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x) = 2f'(x_0)\Delta x + 2\frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$\frac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x} = f'(x_0) + \frac{f'''(x_0)}{3!}\Delta x^2 + \cdots$$

- dérivée centrée
- $\Delta x^2 \rightarrow$ ordre 2 (plus précis)

Calcul d'erreur

Bilan:

dérivée avant : $f'(x_0) \simeq \dfrac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$ ordre 1

dérivée arrière : $f'(x_0) \simeq \dfrac{f(x_0) - f(x_0-\Delta x)}{\Delta x}$ ordre 1

dérivée centrée : $f'(x_0) \simeq \dfrac{f(x_0+\Delta x) - f(x_0-\Delta x)}{2\Delta x}$ ordre 2

Dérivées partielles

Soit une fonction f à plusieurs variables de $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$:

$$f : \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\ \vdots \\ f_m(x_1, x_2, \ldots, x_n) \end{pmatrix}$$

Définition:
La dérivée partielle de f par rapport à x_i est la dérivée par rapport à la variable x_i, les autres étant gardées constantes. Elle est notée

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}$$

Dérivées partielles

Exemples :

$f(x_1, x_2)$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_1}(x_1, x_2)$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_2}(x_1, x_2)$
$x_1^3 x_2 - x_2^2$	$3x_1^2 x_2$	$x_1^3 - 2x_2$
$\cos(x_1 x_2)$	$-x_2 \sin(x_1 x_2)$	$-x_1 \sin(x_1 x_2)$
$\log(x_1 x_2)$	$1/x_1$	$1/x_2$

Dérivées partielles

En pratique :

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i} \simeq \frac{f(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}_i) - f(\boldsymbol{x})}{\Delta x_i} \qquad \text{avec} \qquad \Delta \boldsymbol{x}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \Delta x_i \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

il est conseillé de choisir : $\Delta x_i = \mathtt{max}\left(\mathtt{min}(x_i.10^{-4}, 10^{-6}), 10^{-15}\right)$

$\rightarrow$ favorise $\Delta x_i = x_i.10^{-4}$ tout en imposant que $10^{-6} \geqslant \Delta x_i \geqslant 10^{-15}$

Matrice jacobienne

$$f : \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{pmatrix}$$

Définition:

La matrice jacobienne $\boldsymbol{J}$ est la matrice des dérivées partielles du premier ordre d'une fonction vectorielle f. Elle se calcule au point $\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n)$.

$$\boldsymbol{J} = \frac{\partial(f_1, \dots, f_m)}{\partial(x_1, \dots, x_n)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

Jacobien

Quand $n = m$, la matrice jacobienne est carrée, et son déterminant au point $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ est appelé le *jacobien* de f :

$$\mathrm{Jac}_f(\boldsymbol{x}) = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{vmatrix}$$

Le jacobien mesure par exemple la dilatation du volume induite par f. On le retrouve dans le changement de variable en dimension n : $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{x})$

$$\int_{f(\Omega)} \phi(y_1, \ldots, y_n) dy_1 \cdots dy_n$$

$$= \int_{\Omega} \phi(f(x_1, \ldots, x_n)) \left|\mathrm{Jac}_f(x_1, \ldots, x_n)\right| dx_1 \cdots dx_n$$