Chapitre 4

Dérivation numérique

4.1 Introduction

Le calcul analytique des dérivées est souvent difficile ou coûteux. Alors que dans la plupart des problèmes concrets, l'expression de f peut ne pas être connue ou bien f est connue que par des valeurs en un certain nombre de points.
Soit f une fonction de classe C^1 sur $\mathbb{R}$. La dérivée de f en un point $x \in \mathbb{R}$ est définie par

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

On se propose de trouver des méthodes numériques pour approcher cette dérivée, le calcul effectif de la dérivée pouvant être soit impossible (dérivées intervenant dans des équations différentielles par exemple), soit trop difficile à évaluer, soit imprécis (fonction donnée par un ensemble discret de valeurs : données expérimentales par exemple).
L'idée la plus immédiate est de calculer le quotient différentiel ci-dessus avec une valeur de h "assez petite", i.e., on pose

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

La dérivation numérique nous permet de trouver une estimation de la dérivée ou de la pente d'une fonction, en utilisant seulement un ensemble discret de points.

4.2 Dérivée première : Formules à deux points

4.2.1 Formule de différences progressives (différence avant)

Soit f une fonction suffisamment dérivable sur $[a, b]$, et $x \in [a, b]$.
On se propose de calculer une approximation de la dérivée $f'(x)$.
Soit $h > 0$ tel que $x + h \in]a, b[$, une première approximation de $f'(x)$ utilise la pente de la droite passant par $(x, f(x))$ et $(x + h, f(x + h))$.
La formule de Taylor à l'ordre 2 donne :

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\eta) \quad \text{avec} \quad x \leq \eta \leq x + h$$

Formule progressive : $f'(x) \simeq \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$
L'erreur est $\frac{h}{2} f''(\eta)$ donc en $O(h)$ (d'ordre 1).

Remarque 4.2.2 (Exercice)

Cette formule peut être trouvée aussi en utilisant le polynôme d'interpolation de Lagrange pour les points $(x, f(x))$ et $(x+h, f(x+h))$.

4.2.3 Formule de différences regressive (différence arrière)

$f'(x)$ utilise la pente de la droite passant par $(x-h, f(x-h))$ et $(x, f(x))$.
La formule de Taylor à l'ordre 2 donne :

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\eta) \quad \text{avec} \quad x-h \leq \eta \leq x$$

Formule regressive : $f'(x) \simeq \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$
L'erreur est $\frac{h}{2} f''(\eta)$ donc en $O(h)$ (d'ordre 1).

Remarque 4.2.4 (Exercice)

Cette formule peut être trouvée aussi en utilisant le polynôme d'interpolation de Lagrange pour les points $(x-h, f(x-h))$ et $(x, f(x))$.

4.2.5 Formule de différences centrales (milieu)

Soient h_1, $h_2 > 0$ tels que $x-h_1$ et $x+h_2$ appartiennent à $]a, b[$.
$f'(x)$ utilise la pente de la droite passant par $(x-h_1, f(x-h_1))$ et $(x+h_2, f(x+h_2))$.
Les formules de Taylor à l'ordre 3 donnent :

$$f(x-h_1) = f(x) - h_1 f'(x) + \frac{h_1^2}{2} f''(x) - \frac{h_1^3}{3!} f^{(3)}(c_1) \text{ avec } x-h_1 \leq c_1 \leq x$$

$$f(x+h_2) = f(x) + h_2 f'(x) + \frac{h_2^2}{2} f''(x) + \frac{h_2^3}{3!} f^{(3)}(c_2) \text{ avec } x \leq c_2 \leq x+h_2$$

L'élimination de $f"(x)$ entre ces deux relations donne

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{h_1^2 f(x+h_2) - h_2^2 f(x-h_1) - (h_1^2 - h_2^2) f(x)}{h_1^2 h_2^2 (h_1+h_2)} \\ &- \frac{h_1^2 h_2 f^{(3)}(c_1) + h_2^2 h_1 f^{(3)}(c_2)}{3!(h_1+h_2)} \end{aligned}$$

D'où l'approximation d'ordre 2 de $f'(x)$:

$$f'(x) \simeq \frac{h_1^2 f(x+h_2) - h_2^2 f(x-h_1) - (h_1^2 - h_2^2) f(x)}{h_1^2 h_2^2 (h_1+h_2)}$$

Remarque 4.2.6

Dans le cas où $h_1 = h_2 = h$, la approximation de $f'(x)$ devient

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

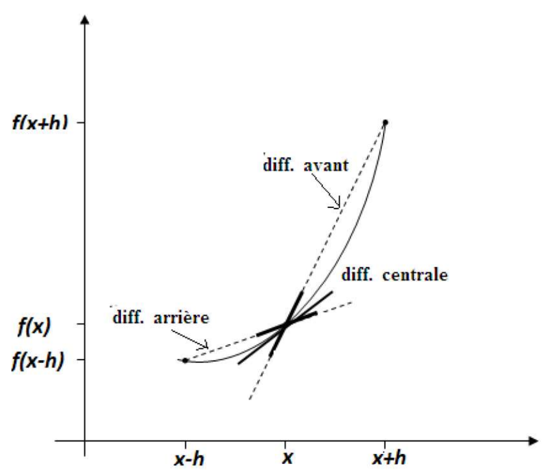
L'erreur de dérivation vérifie alors l'inégalité :

$$| e(x) | \leq \frac{h^2 \sup | f^{(3)}(c) |}{3!}$$

Remarque 4.2.7

La formule de difference centrale peut aussi être trouvée à partir du polynôme d'interpolation de Lagrange en 3 points.

Les trois formules classiques de différences sont visualisées sur la figure suivante



Exemple 4.2.8

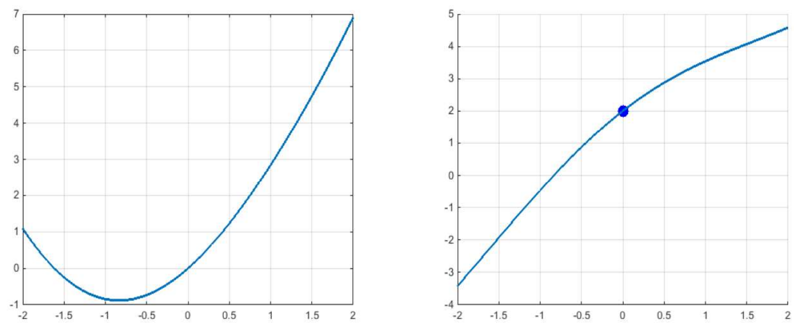
Pour illustrer les trois formules, considérons l'exemple suivant :

$$f(x) = \sin(x) + x^2 + x$$

Pour $x = 0$, le tableau suivant permet de voir l'évolution des dérivées numériques en fonction de h et de comparer les résultats des 3 formules de différences
On a $f'(0) = 2$

h	progressives	$e_1(h)$	regressive	$e_2(h)$	centrale	$e_3(h)$
0.5	2.4588	-0.4588	1.4588	0.5411	1.9588	0.0411
0.25	2.2396	-0.2396	1.7396	0.2603	1.9896	0.0103
0.125	2.1224	-0.1223	1.8724	0.1276	1.9974	0.0026
0.0625	2.0618	-0.0618	1.9368	0.0631	1.9993	0.0006
0.0312	2.0310	-0.0310	1.9685	0.0314	1.9998	0.0001
0.0156	2.0155	-0.0155	1.9843	0.0156	1.99996	0.00004

Les figures suivantes présentent la courbe de f et de f' sur l'intervalle $[-2, 2]$



On peut interpoler les données par un polynôme au lieu d'utiliser la droite, nous obtenons alors les formules de difference qui utilisent plus de deux points. On suppose que le pas h est constant.
Formule de difference progressive utilisant trois points :

$$f^{'}(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h}$$

Formule de difference régressive utilisant trois points :

$$f^{'}(x) \approx \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-h)}{2h}$$

4.3 Formules de difference en trois points

La formule d'approximation en 3 points de la derivée première, basée sur le polynôme d'interpolation de Lagrange, n'utilise pas des points équidistants.
Étant donné trois points (x_1, y_1), (x_2, y_2) et (x_3, y_3) avec $x_1 < x_2 < x_3$, la formule suivante permet d'approcher la dérivée en un point $x \in [x_1, x_3]$.

Le polynôme de Lagrange est donnée par

$$P(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 + L_3(x)y_3$$

où

$$L_1(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$L_3(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

L'approximation de la dérivée première est donnée par $f'(x) \approx P'(x)$, qui peut s'écrire

$$P'(x) = L_1'(x)y_1 + L_2'(x)y_2 + L_3'(x)y_3$$

où

$$L_1'(x) = \frac{2x-x_2-x_3}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$L_2'(x) = \frac{2x-x_1-x_3}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$L_3'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

donc

$$f'(x) = \frac{2x-x_2-x_3}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}y_1 + \frac{2x-x_1-x_3}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}y_2 + \frac{2x-x_1-x_2}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}y_3$$

4.4 Dérivées d'ordre supérieur

Les formules de dérivées d'ordre supérieur, peuvent être trouvées à partir des dérivées du polynôme de Lagrange ou en utilisant les formules de Taylor.
Par exemple, étant donné 3 points $x-h$, x, $x+h$, la formule de la dérivée seconde est donnée par :

$$f''(x) = \frac{1}{h^2}[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]$$

l'erreur est en $O(h^2)$.

Dérivée seconde à partir du polynôme de Taylor.

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f(3)(x) + \frac{h^4}{4!}f^(4)(\eta_1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f(3)(x) + \frac{h^4}{4!}f^(4)(\eta_2)$$

$$x \le \eta_1 \le x+h \text{ et } x-h \le \eta_2 \le x.$$

$$f''(x) \simeq \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

l'erreur est en $O(h^2)$.

Pour obtenir les formules de la troisième et la quatrième dérivée, on prend une combinaison linéaire des développement de Taylor, pour $f(x+2h)$, $f(x+h)$, $f(x-h)$ et $f(x-2h)$.
Quelques formules centrales d'ordre 2 ($O(h^2)$) :

$$f'(x) \simeq \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)]$$

$$f''(x) \simeq \frac{1}{h^2}[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]$$

$$f^{(3)}(x) \simeq \frac{1}{2h^3}[f(x+2h) - 2f(x+h) + 2f(x-h) - f(x-2h)]$$

$$f^{(4)}(x) \simeq \frac{1}{h^4}[f(x+2h) - 4f(x+h) + 6f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)].$$

4.5 Application

Exemple 4.5.1

Soit à calculer $u \in \mathcal{C}^1([0,1])$ vérifiant :

$$\begin{cases} u'(x) = e^{-x}, & x \in [0,1]; \\ u(0) = 1. \end{cases} \tag{4.1}$$

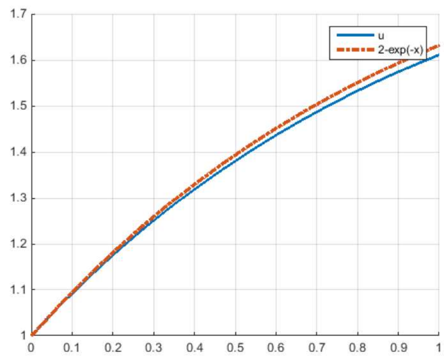
On peut vérifier facilement que $u(x) = 2 - e^{-x}$ est la solution exacte de (4.1).
Supposons que le calcule de la solution analytique est difficile ou impossible. On vous propose d'approcher directement $u'(x)$ par la formule de quadrature d'ordre 1 suivante :

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h}, \quad \text{avec } h = \frac{1}{n} \quad \text{et } n > 0$$

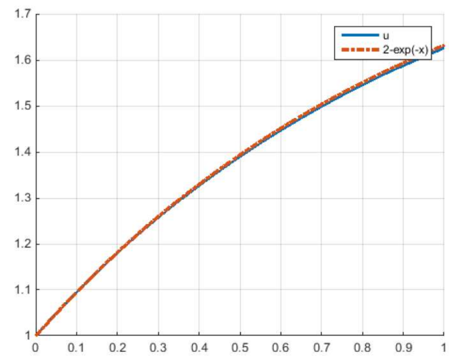
Posons $x_i = i\,h,\ i = 0, \cdots, n$ et notons par $u(x_i) = u_i$. D'après (4.1) on a :
$\begin{cases} e^{-x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h}, & i \leq 1; \\ u_0 = 1. \end{cases}$ c-à-d $\begin{cases} u_{i+1} = u_i + h\, e^{-x_i}, & i \leq 1; \\ u_0 = 1. \end{cases}$

Code Matlab 4.5.2

```
clc, clear all, close all
u=1; n=50; h=1/n; x=0:h:1;
for i=1:n
    u=[u u(i)+h*exp(-i*h)]
end
hold on
h=plot(x,u)
h.LineWidth = 2;
h=plot(x,2-exp(-x),'-.')
h.LineWidth = 2;
legend('u','2-exp(-x)')
grid on
```


u
2-exp(-x)
1.7
1.6
1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1

(a)


u
2-exp(-x)
1.7
1.6
1.5
1.4
1.3
1.2
1.1
1
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1

(b)