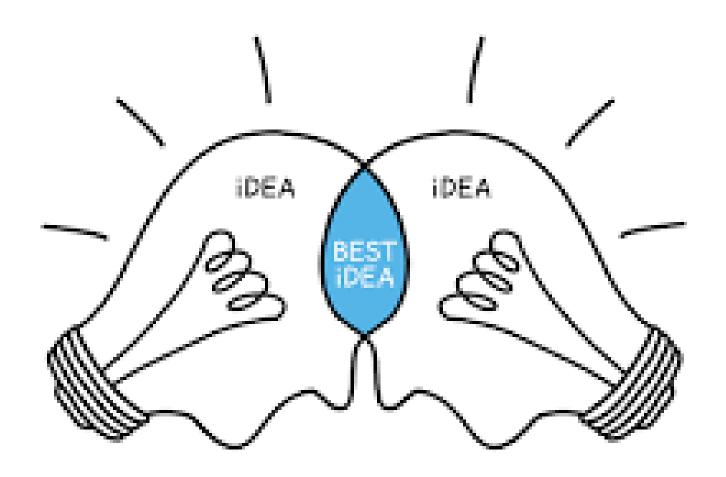
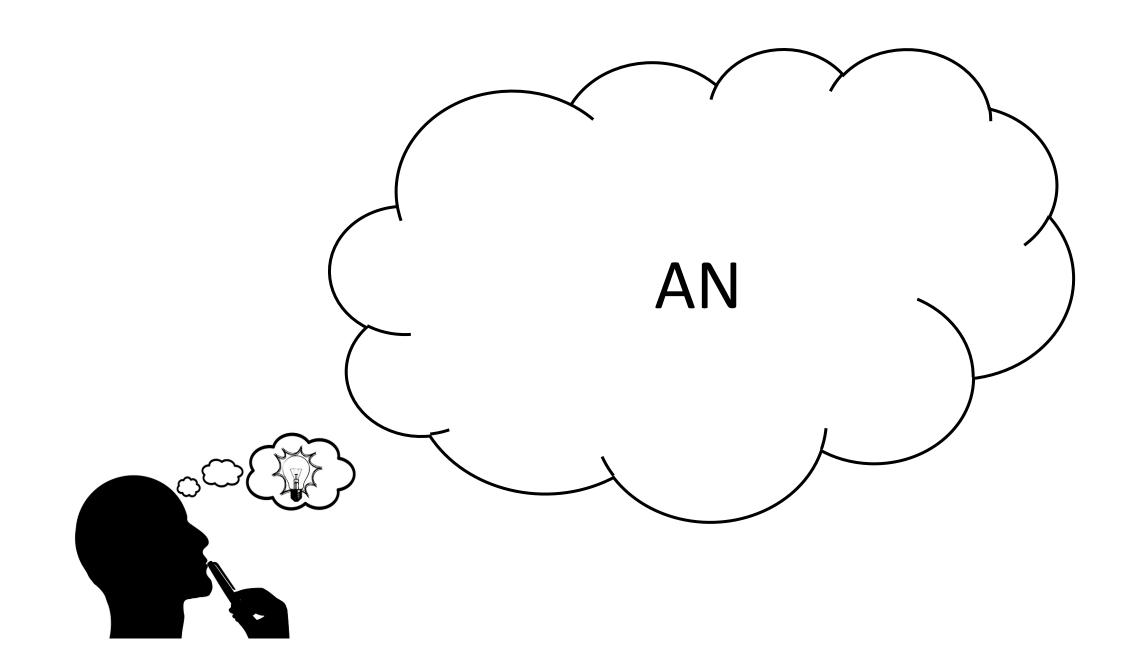
Analyse Numérique 2

Ecole Hassania des Travaux Publics Salem Nafiri

Remainder: BrainStorming







Mathématiciens rencontrés dans le cours AN2



I. Newton 1643-1727

Brook Taylor 1685-1731

T. Simpson 1710-1761

C. F. Gauss 1777-1855

L. Euler 1707-1783

C. Runge 1856-1927

M. W. Kutta 1867-1944



A. L. Cauchy 1789-1857

R. Lipschitz 1832-1903

Dérivation Numérique

Motivation

Ce chapitre traite les approximations numériques des dérivés d'une fonction.

Une des questions que quelqu'un peut se poser :

Pourquoi nous avons besoin d'approcher une dérivée?

Après tous, nous savons comment différencier analytiquement toutes les fonctions !!!

Néanmoins, il y a plusieurs raisons pour lesquelles nous devons encore approcher une dérivée:

Motivation

- Il y a des situations où la fonction à différentier est connue seulement en quelques points de son domaine de définition, et donc nous n'avons pas l'expression explicite de f. Nous pouvons toujours être intéressés par étudier les changements dans les données, qui sont liés, bien sûr, aux dérivés.
- Il y a des moments où les formules exactes sont disponibles mais elles sont très compliquées au point qu'un calcul exact de la dérivée nécessite l'évaluation de plusieurs fonctions. Parfois, il pourrait être beaucoup plus simple d'approcher la dérivée au lieu de calculer sa valeur exacte.
- Lors de l'approximation des solutions d'une équation différentielle ordinaire (ou partielle), la solution est représentée comme une approximation discrète définie sur une grille. Puisque nous devons évaluer les dérivés aux points de la grille, nous devons être capable de trouver des méthodes pour approcher les dérivés en ces points, et encore, ceci sera typiquement fait en utilisant seulement des valeurs qui sont définies sur un ensemble dénombrable. La solution exacte, elle, est inconnue.

Dérivée numérique d'ordre 1

A simple approximation of the first derivative is

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h},\tag{5.1}$$

where we assume that h > 0. What do we mean when we say that the expression on the right-hand-side of (5.1) is an approximation of the derivative? For linear functions (5.1) is actually an exact expression for the derivative. For almost all other functions, (5.1) is not the exact derivative.

Let's compute the approximation error. We write a Taylor expansion of f(x + h) about x, i.e.,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi), \qquad \xi \in (x, x+h).$$
(5.2)

For such an expansion to be valid, we assume that f(x) has two continuous derivatives. The Taylor expansion (5.2) means that we can now replace the approximation (5.1) with

DF progressive/rétrograde

an exact formula of the form

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2}f''(\xi), \qquad \xi \in (x, x+h).$$
 (5.3)

Since this approximation of the derivative at x is based on the values of the function at x and x + h, the approximation (5.1) is called a **forward differencing** or **one-sided differencing**. The approximation of the derivative at x that is based on the values of the function at x - h and x, i.e.,

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

is called a **backward differencing** (which is obviously also a one-sided differencing formula).

Erreur de troncature

The second term on the right-hand-side of (5.3) is the **error term**. Since the approximation (5.1) can be thought of as being obtained by truncating this term from the exact formula (5.3), this error is called the **truncation error**. The small parameter hdenotes the distance between the two points x and x+h. As this distance tends to zero, i.e., $h \to 0$, the two points approach each other and we expect the approximation (5.1) to improve. This is indeed the case if the truncation error goes to zero, which in turn is the case if $f''(\xi)$ is well defined in the interval (x, x+h). The "speed" in which the error goes to zero as $h \to 0$ is called the **rate of convergence**. When the truncation error is of the order of O(h), we say that the method is a first order method. We refer to a methods as a p^{th} -order method if the truncation error is of the order of $O(h^p)$.

DF centrée

It is possible to write more accurate formulas than (5.3) for the first derivative. For example, a more accurate approximation for the first derivative that is based on the values of the function at the points f(x-h) and f(x+h) is the **centered differencing** formula

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. ag{5.4}$$

Let's verify that this is indeed a more accurate formula than (5.1). Taylor expansions of the terms on the right-hand-side of (5.4) are

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1),$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2).$$

Here $\xi_1 \in (x, x+h)$ and $\xi_2 \in (x-h, x)$. Hence

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12} [f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)],$$

DF centrée

which means that the truncation error in the approximation (5.4) is

$$-\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)].$$

If the third-order derivative f'''(x) is a continuous function in the interval [x-h, x+h], then the intermediate value theorem implies that there exists a point $\xi \in (x-h, x+h)$ such that

$$f'''(\xi) = \frac{1}{2} [f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)].$$

Hence

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(\xi), \tag{5.5}$$

which means that the expression (5.4) is a second-order approximation of the first derivative.



Key Point

Three approximations to the derivative f'(a) are

1. the one sided (forward) difference

$$\frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

2. the one sided (backward) difference

$$\frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

3. the central difference

$$\frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$

In practice, the central difference formula is the most accurate.

Dérivée numérique d'ordre 2

In a similar way we can approximate the values of higher-order derivatives. For example, it is easy to verify that the following is a second-order approximation of the second derivative

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}.$$
 (5.6)

To verify the consistency and the order of approximation of (5.6) we expand

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) \pm \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_{\pm}).$$

Here, $\xi_{-} \in (x - h, x)$ and $\xi_{+} \in (x, x + h)$. Hence

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+\frac{h^2}{24}\left(f^{(4)}(\xi_-)+f^{(4)}(\xi_+)\right)=f''(x)+\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),$$

where we assume that $\xi \in (x - h, x + h)$ and that f(x) has four continuous derivatives in the interval. Hence, the approximation (5.6) is indeed a second-order approximation of the derivative, with a truncation error that is given by

$$-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi), \qquad \xi \in (x-h, x+h).$$



Key Point

A central difference approximation to the second derivative f''(a) is

$$f''(a) \approx \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}$$

Exercice

Exercice : Utiliser la formule des différences finies centrées et montrer que

$$f^{(4)}(x_0) \approx \frac{f(x_0 + 2h) - 4f(x_0 + h) + 6f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^4}.$$

(Indication: utiliser $f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2}$.)

TP Scilab

Exercice

Il s'agit de démontrer et vérifier numériquement que

$$\left| f'(x_0) - \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h} \right| = O(h^2).$$

Cette formule de différences finies est à l'origine du schéma "bdf2" pour résoudre numériquement des équations différentielles.

Question 1: On pose $x_0 = 1$, f(x) = sin(x) pour tout $x \in \mathbb{R}$. Utiliser le programme bdf2.m pour remplir le tableau suivant

h	err
0.1	
0.01	
0.001	
0.0001	
0.00001	
0.000001	
0.0000001	

où on a noté

$$err = \left| f'(x_0) - \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h} \right|.$$

Interpréter les résultats.

Question 2: Démontrer le résultat suivant : $\forall x_0 \in \mathbb{R} \ \forall f \in C^3([x_0-2;x_0]) \ \exists C>0, \ \forall 0< h\leqslant 1,$ on a :

$$\left| f'(x_0) - \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h} \right| \le Ch^2.$$

Code Scilab: bdf2.sce

```
function err=bdf2(x0,h)
// formule de differences finies BDF2
diff = (3*f(x0)-4*f(x0-h)+f(x0-2*h))/(2*h);
err = abs(diff-df(x0));
fprintf('x0 %e h %e erreur %e \n',x0,h,err)
// la fonction f
function funct=f(x)
funct = sin(x);
endfunction
// la derivee de f
function dfunct=df(x)
dfunct = cos(x);
endfunction
endfunction
```

Exercice

Utiliser les trois approximations de différences finies vues dans le cours:

- 1) Donner une approximation de la dérivée première de $f(x)=\cos(x)$, au point $x_0=pi/3$ pour
- h=0.1
- h=0.01
- h=0.001
- h=0.0001

Utiliser 8 décimales après la virgule.

- 2) Donner un tableau contenant l'erreur pour chaque méthodes d'approx et pour chaque pas h.
- 3) Conclure.

Exercice

Utiliser les trois approximations de différences finies vues dans le cours:

- 1) Donner une approximation de la dérivée première de $f(x)=\ln(x)$, au point $x_0=3$ pour
- h=0.1
- h=0.01
- h=0.001
- h=0.0001

Utiliser 8 décimales après la virgule.

- 2) Donner un tableau contenant l'erreur pour chaque méthodes d'approx et pour chaque pas h.
- 3) Conclure.