INFORMATIQUE APPLIQUÉE AU CALCUL SCIENTIFIQUE

COURS 5

Dérivation numérique

1) Définitions
2) Dérivées d'ordre supŕieur
3) Ordre de précision
4) Approximation de la dérivée seconde
5) Exercice : dérivée première décentrée d'ordre deux

François Dubois, 13 novembre 2004, édition 03 août 2006, 12 pages.

IACS (5) $\boxed{\text{Dérivation numérique}}$

(1) Définitions.

- on considère une fonction $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ régulière (autant de fois dérivable que nécessaire dans tout ce chapitre) qu'on suppose connue uniquement pour $(N+1)$ valeurs discrètes $(f_j)_{0 \leq j \leq N}$ définies comme suit. on suppose l'intervalle $[a,b]$ découpé en N intervalles, on pose

(1) $\quad \Delta x = \dfrac{b-a}{N} \quad , \; N$ entier ≥ 1

et on introduit des "points de grille" x_j de sorte que

(2) $\quad x_j = a + j\,\Delta x, \quad 0 \leq j \leq N.$

on se donne simplement les valeurs $f(x_j)$:

(3) $\quad f_j = f(x_j), \quad 0 \leq j \leq N+1.$

- on essaie d'approcher (au mieux!) la dérivée de la fonction f au point x_j, c'est à dire le nombre $f'(x_j) = \dfrac{df}{dx}(x_j)$. on rappelle la définition

(4) $\quad f'(x_j) = \lim\limits_{h \to 0} \dfrac{1}{h}\big(f(x_j+h) - f(x_j)\big).$

Au sein de la relation (4), le paramètre h

tend vers 0, ce qui est impossible à envisager en pratique si f n'est connue que grâce aux relations (1),(2),(3). Le paramètre $h>0$ le plus petit (avec $h \neq 0$ bien sûr) de sorte que $f(x_j+h)$ soit connu correspond à $h=\Delta x$, le <u>pas</u> de la grille (1)(2). On <u>définit</u> la dérivée <u>décentrée à droite</u> en prenant $h=\Delta x$ dans la relation (4)

$$(5) \quad f'_{d,j} = \frac{1}{\Delta x}(f_{j+1}-f_j) \quad , \quad 0 \leq j \leq N-1$$

On remarque que la relation (5) n'est <u>pas</u> définie pour $j=N$. On "perd" donc le dernier point de grille quand on utilise la relation (5) pour approcher la dérivée $f'(x_j)$.

- On peut aussi partir de la relation suivante, équivalente à la relation (4):

$$(6) \quad f'(x_j) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h}\left(f(x_j)-f(x_j-h)\right) .$$

En prenant $h=\Delta x$ au sein de (6) (à défaut de pouvoir faire tendre h vers 0, on le prend le plus petit possible à l'échelle de la grille), on définit la dérivée numérique <u>décentrée à gauche</u>:

$$(7) \quad f'_{g,j} = \frac{1}{\Delta x}(f_j-f_{j-1}) \quad , \quad 1 \leq j \leq N .$$

Cette fois, la relation de dérivation approchée (7) n'est pas définie pour $j=0$. Le point de grille" le plus à gauche" est donc perdu.

- on fait la moyenne des deux expressions précédentes, soit, de manière équivalente, on part de la définition de la dérivée donnée par

$$(8) \quad f'(x_j) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{2h}\left(f(x_j+h) - f(x_j-h)\right)$$

et on l'utilise avec $h = \Delta x$, pas du maillage on définit de cette façon la dérivée numérique centrée :

$$(9) \quad f'_{c,j} = \frac{1}{2\Delta x}\left(f_{j+1} - f_{j-1}\right), \quad 1 \leq j \leq N-1.$$

On remarque que cette expression n'est pas définie pour $j=0$ et $j=N$. On vérifie aussi facilement que, comme annoncé, on a

$$(10) \quad f'_{c,j} = \frac{1}{2}\left(f'_{g,j} + f'_{d,j}\right), \quad 1 \leq j \leq N-1.$$

② Dérivées d'ordre supérieur

- on peut itérer les relations précédentes pour tenter d'approcher $f''(x_j)$ au point de grille. on peut partir d'une des trois relations (4), (6), ou (8), en remplaçant la fonction f par sa dérivée f':

$$(11) \quad f''(x_j) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{h}\left(f'(x_j+h) - f'(x_j)\right)$$

(12) $$f''(x_j) = \lim_{h\to 0} \frac{1}{h}\left(f'(x_j) - f'(x_j - h)\right)$$

(13) $$f''(x_j) = \lim_{h\to 0} \frac{1}{2h}\left(f'(x_j+h) - f'(x_j - h)\right).$$

Mais chacune des dérivées premières au membre de droite des relations (11), (12), (13) peut être approchée par l'une des trois relations (5), (7) ou (9). Ceci conduit à 27* relations a priori différents pour approcher $f''(x_j)$.

- Dans le cas où l'on part de la relation (13) utilisée avec $h = \Delta x$ et qu'on approche les deux dérivées f'_{j+1} et f'_{j-1} à l'aide de la relation (9), on a :

$$f'_{c,j+1} = \frac{1}{2\Delta x}\left(f_{j+2} - f_j\right) \quad , \quad 0 \leqslant j \leqslant N-2$$
$$f'_{c,j-1} = \frac{1}{2\Delta x}\left(f_j - f_{j-2}\right) \quad , \quad 2 \leqslant j \leqslant N$$

donc par différence

(14) $$f''(x_j) \simeq \frac{1}{4\Delta x^2}\left(f_{j+2} - 2f_j + f_{j-2}\right), \quad 2 \leqslant j \leqslant N-2$$

c'est une relation qui utilise cinq points de la grille autour du point x_j, même si les

* pourquoi 27 ? (exercice !)

coefficients de f_{j+1} et f_{j-1} sont nuls. Cette relation ne nous satisfait pas complètement, mais c'est une première approche. Nous retenons que dériver est un art difficile.

③ Ordre de précision

- On fixe le point de grille $x_j \equiv x$ et on suppose que le pas Δx devient de plus en plus petit; on utilise à nouveau la lettre "h" pour qu'il n'y ait pas d'ambiguïté. Les différentes dérivées numériques dépendent maintenant de h :

(15) $$f'_g(x,h) = \frac{1}{h}\left(f(x) - f(x-h)\right)$$

(16) $$f'_d(x,h) = \frac{1}{h}\left(f(x+h) - f(x)\right)$$

(17) $$f'_c(x,h) = \frac{1}{2h}\left(f(x+h) - f(x-h)\right)$$

Prop ① Précision des deux dérivées décentrées.

Si f est trois fois dérivable [sur l'intervalle [a,b]], il existe une constante C de sorte que

(18) $$\left| f'_g(x,h) - f'(x) \right| \leq C\,h$$

(19) $$\left| f'_d(x,h) - f'(x) \right| \leq C\,h\,.$$

Preuve de la proposition ①

- On commence par prouver la relation (19). On écrit la formule de Taylor à l'ordre deux :

$$(20) \quad f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2}\left(f''(x) + \varepsilon(x,h)\right) .$$

Il vient alors facilement

$$(21) \quad f'_d(x,h) - f'(x) = \frac{h}{2}\left(f''(x) + \varepsilon(x,h)\right)$$

et la relation (19) résulte de (21) avec une constante C que nous ne préciserons pas plus avant dans le cadre de cet exposé.

- Pour établir (18), on procède de façon analogue. On part de la formule de Taylor (20) et on change h en $-h$. Il vient

$$(22) \quad f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2}\left(f''(x) + \varepsilon(x,-h)\right)$$

et on obtient sans peine

$$(23) \quad f'_g(x,h) - f'(x) = -\frac{h}{2}\left(f''(x) + \varepsilon(x,-h)\right),$$

ce qui permet d'établir la relation (18). □

Prop ② Précision de la dérivée numérique centrée

Si f est quatre fois dérivable sur l'intervalle $[a,b]$, il existe une constante $C>0$ de sorte que

$$(24) \quad |f'_c(x,h) - f'(x)| \leq C h^2$$

Preuve de la proposition (2)

- On part de la formule de Taylor écrite à l'ordre trois :

(25) $f(x+h) = f(x) + h\,f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6}\left(f'''(x) + \varepsilon(x,h)\right)$

qu'on écrit une nouvelle fois en changeant h en $-h$:

(26) $f(x-h) = f(x) - h\,f'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) - \frac{h^3}{6}\left(f'''(x) + \varepsilon(x,-h)\right)$.

On fait la différence entre les contenus des relations (25) et (26) et on divise par $2h$. Il vient

(27) $\frac{1}{2h}\left(f(x+h) - f(x-h)\right) = f'(x) + \frac{h^2}{6}\left(f'''(x) + \tilde{\varepsilon}(x,h)\right)$

avec $\tilde{\varepsilon}(x,h) \to 0$ si $h \to 0$. Donc quand $h \to 0$, il existe une constante $C > 0$ indépendante de $x \in [a,b]$ de sorte que $\left|\frac{1}{6}\left(f'''(x) + \tilde{\varepsilon}(x,h)\right)\right| \leq C$ et la relation (24) est établie. □

(4) Approximation de la dérivée seconde

- Nous avons vu à la relation (14) qu'en itérant le calcul de la dérivée première à l'aide du schéma centré (9), on obtient une expression possible pour approcher la dérivée seconde de f au point x_j. Pourtant, cette expression utilise un intervalle de longueur $4\Delta x$ autour de x_j, tout en ignorant les points x_{j+1} et x_{j-1}. On doit donc pouvoir mieux faire

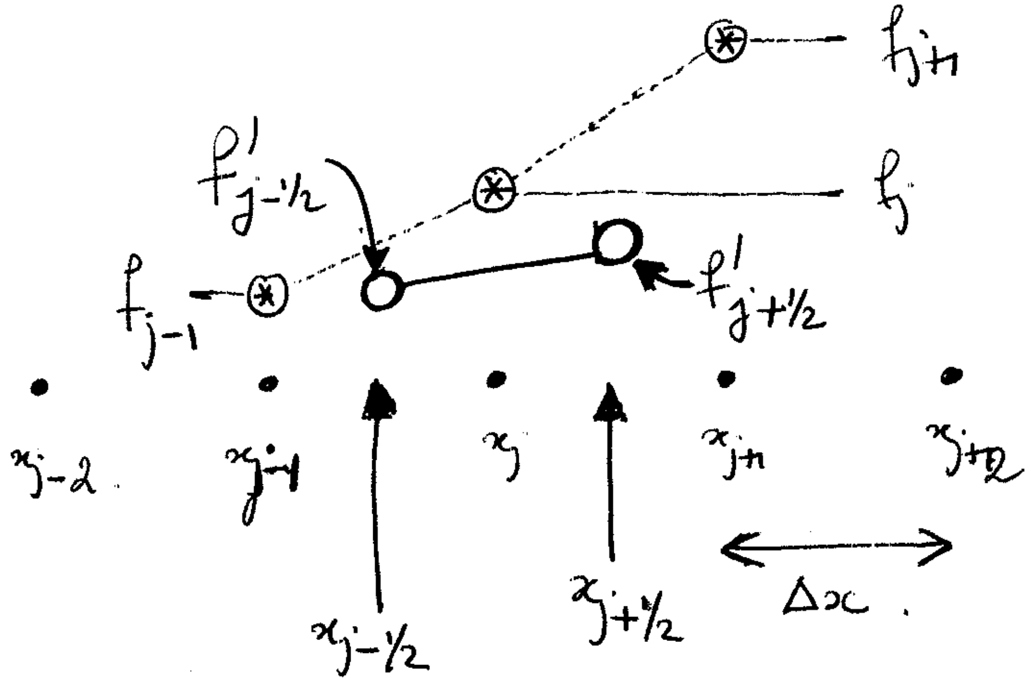

Figure ① Introduction de "points intermédiaires" $x_{j+1/2}$ où la dérivée première peut être facilement approchée.

- Nous allons approcher la dérivée seconde au point x_j en partant de la relation

$$(28) \qquad f''(x_j) \simeq \frac{1}{h}\left(f'\left(x_j+\frac{h}{2}\right)-f'\left(x_j-\frac{h}{2}\right)\right), \ h \to 0$$

utilisée pour $h = \Delta x$. Mais alors il faut pouvoir introduire une valeur approchée de la dérivée $f'(x_{j+1/2})$ au point intermédiaire $x_{j+1/2}$ entre x_j et x_{j+1} :

$$(29) \qquad x_{j+1/2} = \frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}) = x_j + \frac{\Delta x}{2} = x_{j+1} - \frac{\Delta x}{2} .$$

Même si on ne connaît pas a priori explicitement $f(x_{j+1/2})$, on peut estimer sa valeur à l'aide d'une relation analogue à (28) :

$$(30) \qquad f'(x_{j+1/2}) \simeq \frac{1}{h}\left(f\left(x_{j+1/2}+\frac{h}{2}\right)-f\left(x_{j+1/2}-\frac{h}{2}\right)\right), h \to 0.$$

- Si on prend $h = \Delta x$ dans la relation (30), on remarque que $x_{j+1/2} + \frac{\Delta x}{2} = x_{j+1}$ et $x_{j+1/2} - \frac{\Delta x}{2} = x_j$, deux points où les valeurs ponctuelles de f sont supposées connues. On peut donc <u>définir</u> $f'_{j+1/2}$ par la relation suivante

$$(31) \qquad f'_{j+1/2} = \frac{1}{\Delta x}(f_{j+1} - f_j) \;, \quad 0 \leq j \leq N-1 .$$

- on reporte alors l'expression (31), ainsi que l'expression analogue pour $j+1/2$ remplacé par $j-1/2$, c'est à dire

$$f'_{j-1/2} = \frac{1}{\Delta x}(f_j - f_{j-1}) \;,$$

dans la relation (28). on obtient :

$$f''(x_j) \simeq \frac{1}{\Delta x}\left(f'_{j+1/2} - f'_{j-1/2}\right)$$

$$\simeq \frac{1}{\Delta x}\left[\frac{1}{\Delta x}(f_{j+1} - f_j) - \frac{1}{\Delta x}(f_j - f_{j-1})\right]$$

$$= \frac{1}{\Delta x^2}\left(f_{j+1} - 2 f_j + f_{j-1}\right)$$

ce qui conduit à la <u>définition</u> de l'approximation centrée classique de la dérivée seconde :

$$(32) \qquad f''_{c,j} = \frac{1}{\Delta x^2}\left(f_{j+1} - 2 f_j + f_{j-1}\right) \;, \quad 1 \leq j \leq N-1$$

- Si on veut faire varier Δx, on introduit comme pour (15) (16) (17) une version indépendante de la grille pour cette "dérivée numérique" :

$$(33) \qquad f''_c(x, h) = \frac{1}{h^2}\left(f(x+h) - 2 f(x) + f(x-h)\right) .$$

Proposition (3) Précision de l'approximation centrée def$''$.

Si f est cinq fois dérivable sur l'intervalle $[a,b]$, il existe une constante $C>0$ indépendante de $x \in [a,b]$ de sorte que

(34) $\quad |f''_c(x,h) - f''(x)| \leq C\, h^2,$

où $f''_c(x,h)$ a été défini à la relation (33).

Preuve de la proposition (3)

- On reprend la formule de Taylor (25), en la poussant un cran plus loin :

(35) $f(x+h) = f(x) + h f'(x) + \dfrac{h^2}{2} f''(x) + \dfrac{h^3}{6} f'''(x) + \dfrac{h^4}{24}\left(f^{(4)}(x) + \varepsilon\right)$

où $\varepsilon = \varepsilon(x,h) \to 0$ si h tend vers 0.

on procède de même en changeant h en $-h$:

(36) $f(x-h) = f(x) - h f'(x) + \dfrac{h^2}{2} f''(x) - \dfrac{h^3}{6} f'''(x) + \dfrac{h^4}{24}\left(f^{(4)}(x) + \tilde{\varepsilon}\right)$

avec $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon(x,-h)$. Pour faire apparaître le membre de droite de la relation (33), on fait la somme entre les expressions (35) et (36). Il vient

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + \frac{h^4}{12}\left[f^{(4)}(x) + \hat{\varepsilon}(x,h)\right]$$

- Quand h tend vers 0, $\left| \dfrac{1}{12}\left(f^{(4)}(x) + \hat{\varepsilon}(x,h)\right)\right| \leq C$ pour une constante $C>0$ qui majore $f^{(4)}$; on peut choisir par exemple $C = \dfrac{1}{6} \sup_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$ si f est cinq fois dérivable.

On tire alors du calcul fait plus haut

$$f_c''(x, h) = f''(x) + \frac{h^2}{12}\left[f^{(4)}(x) + \tilde{\varepsilon}(x, h)\right]$$

ce qui établit la relation (34). $\square$

- On peut approcher la dérivée seconde avec (seulement) trois points de grille <u>équirépartis</u>. C'est un des miracles qu'autorise la formule de Taylor !

(5) Exercice. Dérivée première décentrée d'ordre deux

- On se donne une grille de pas $h = \Delta x$, des valeurs "nodales" $f(x_j) = f_j$, on cherche à approcher la dérivée première $f'(x_j)$ par les trois valeurs f_{j-2}, f_{j-1} et f_j, à l'aide d'un schéma "décentré"

(37) $$f'(x_j) \simeq \frac{1}{h}\left[\alpha f_j + \beta f_{j-1} + \gamma f_{j-2}\right] + O(h^2).$$

Que valent les nombres α, β, γ ?

- On développe les valeurs $f(x_j - h) = f_{j-1}$ et $f(x_j - 2h) = f_{j-2}$ autour de l'argument x_j. On a

(38) $$f_{j-1} = f_j - h f'_j + \frac{h^2}{2} f''_j + O(h^3)$$

relation analogue à (36), mais seule la notation a changé ! De même, en changeant h en $2h$ au sein de la relation (38), on a :

(39) $$f_{j-2} = f_j - 2h\, f'_j + 2h^2 f'_j + O(h^3).$$

on a donc le développement suivant pour le membre de droite de la relation (37) :

$$\frac{1}{h}\left(\alpha f_j + \beta f_{j-1} + \gamma f_{j-2}\right) = \frac{\alpha+\beta+\gamma}{h} f_j - (\beta + 2\gamma) f'_j + h\left(\frac{\beta}{2} + 2\gamma\right) f''_j + O(h^2),$$

et cette relation est identique à f'_j pour tout h si et seulement si

$$(40) \qquad \alpha+\beta+\gamma = 0$$
$$(41) \qquad -\beta - 2\gamma = 1$$
$$(42) \qquad \frac{\beta}{2} + 2\gamma = 0$$

- La résolution du système linéaire (40)(41)(42) de trois équations à trois inconnues s'effectue sans difficulté. On tire γ de (42) et on le reporte dans (41). On trouve $-\frac{\beta}{2} = 1$ soit $\beta = -2$. Donc $\gamma = \frac{1}{2}$ compte tenu de (42). On a enfin $\alpha = -\beta - \gamma = \frac{3}{2}$.
- on a donc établi

$$(43) \qquad f'(x_j) \simeq \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{3}{2} f_j - 2 f_{j-1} + \frac{1}{2} f_{j-2}\right) + O(\Delta x^2)$$

c'est un schéma inventé par Gear dans les années 1960.

FD, 13 nov 2004.