# Chapitre 3

# Dérivation numérique

## Sommaire

## 3.1 Introduction

Ce chapitre est consacré aux approximations numériques des dérivées. La première question qui se pose est la suivante : pourquoi avons-nous besoin d'approximer les dérivés? Après tout, nous savons comment dériver analytiquement n'importe quelle fonction. Néanmoins, il y a plusieurs raisons pour lesquelles nous devons encore approximer les dérivés :

- Même s'il existe une fonction implicite que nous devons dériver, nous pourrions connaître ses valeurs uniquement dans un ensemble de points sans connaître la fonction elle-même.
- Dans certains cas, il peut ne pas être évident de connaître la formule de la fonction et tout ce que nous avons est un ensemble de données discrètes. Nous pouvons encore être intéressés par l'étude des changements dans les données, qui sont bien sûr liés aux dérivées.
- Il y a des cas dans lesquels des formules exactes sont disponibles mais elles sont très compliquées au point qu'un calcul exact de la dérivée nécessite trop d'évaluations de fonctions. Il pourrait être beaucoup plus simple d'approximer la dérivée au lieu de calculer sa valeur exacte.
- Lors de l'approximation de solutions d'équations différentielles ordinaires (ou aux dérivées partielles), nous représentons généralement la solution comme une approximation discrète définie sur une grille. Puisque nous devons ensuite évaluer les dérivées aux points de la grille, nous devons être en mesure de proposer des méthodes pour approximer les dérivées à ces points, et encore une fois, cela sera généralement fait en utilisant uniquement des valeurs définies sur la grille. La fonction elle-même, qui est dans ce cas la solution de l'équation différentielle, est inconnue.

On considère une fonction $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ suffisamment dérivable sur $[a, b]$, $x \in \left]a, b\right[$ fixé.
La dérivée de $f$ au point $x$ est

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \text{ où on suppose que } h > 0 \text{ et } x + h \in \left]a, b\right[.$$

Une simple approximation de cette dérivée est

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad h > 0 \text{ suffisamment petit.}$$

Nous constatons que cette approximation de $f'(x)$ nécessite la connaissance des valeurs de $f$ en $x$ et $x + h$.

Une des méthodes les plus anciennes utilisées pour obtenir des formules de dérivation numérique consiste à construire des quotients différentiels à l'aide des développements de Taylor. Une autre approche consiste à écrire le polynôme d'interpolation et le dériver.

## 3.2 Dérivée première

### 3.2.1 Formules à deux points

Fixons $h > 0$ tel que $x + h \in \left]a, b\right[$. Effectuons un premier développement de Taylor d'ordre 1 de $f$ autour de $x$,

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi), \xi \in \left]x, x+h\right[.$$

En réarrangeant, on obtient

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

Ce qui donne

$$\textbf{Formule de différence progressive} \quad f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{3.1}$$

Effectuons un deuxième développement de Taylor d'ordre 1 de $f$ autour de $x$,

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi), \xi \in \left]x-h, x\right[.$$

En réarrangeant, on obtient

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

Ce qui donne

$$\textbf{Formule de différence régressive} \quad f'(x) \simeq \frac{f(x) - f(x-h)}{h}. \tag{3.2}$$

Soient $h_1, h_2 > 0$ tels que $x - h_1, x + h_2 \in \left]a, b\right[$. Augmentons l'ordre du développement de Taylor de $f$ autour de $x$,

$$\begin{aligned} f(x+h_1) &= f(x) + h_1 f'(x) + \frac{h_1^2}{2} f''(x) + \frac{h_1^3}{6} f'''(\xi_1), \xi_1 \in \left]x, x+h_1\right[, \\ f(x-h_2) &= f(x) - h_2 f'(x) + \frac{h_2^2}{2} f''(x) - \frac{h_2^3}{6} f'''(\xi_2), \xi_2 \in \left]x-h_2, x\right[. \end{aligned}$$

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

**Formule de différence centrée**

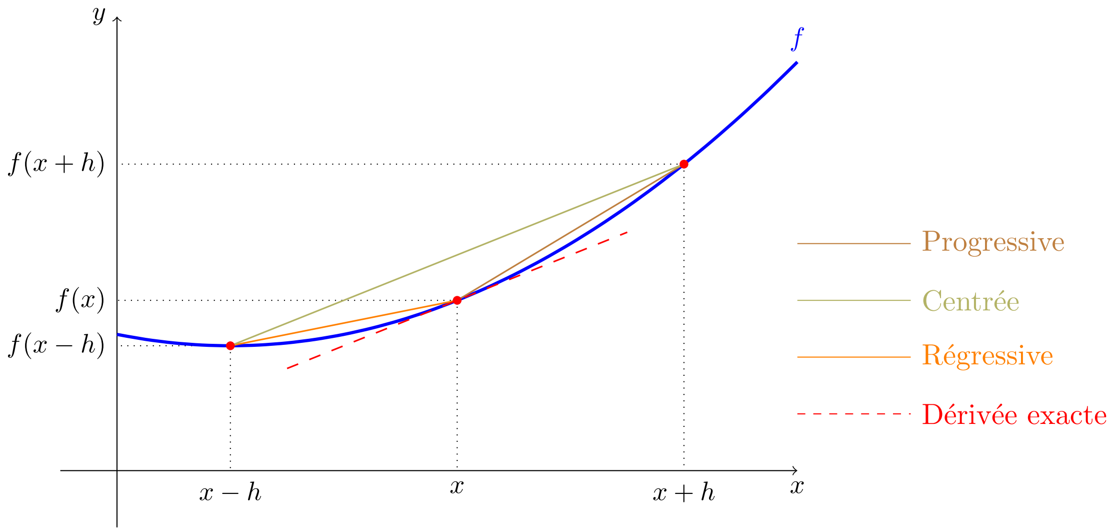
$$f'(x) \simeq \frac{h_2}{h_1(h_1+h_2)} f(x+h_1) - \frac{h_1}{h_2(h_1+h_2)} f(x-h_2) + \left(\frac{1}{h_2} - \frac{1}{h_1}\right) f(x).$$

Cette formule se simplifie notablement dans le cas de points équidistants $(h_1 = h_2 = h)$ pour donner

**Formule centrée - points équidistants** $$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \tag{3.3}$$

Remarquons que la formule ci-dessus n'est autre que la moyenne des deux formules décentrés dans le cas de points équidistants.

Les trois formules ci-dessus de différences sont visualisées sur la figure suivante.



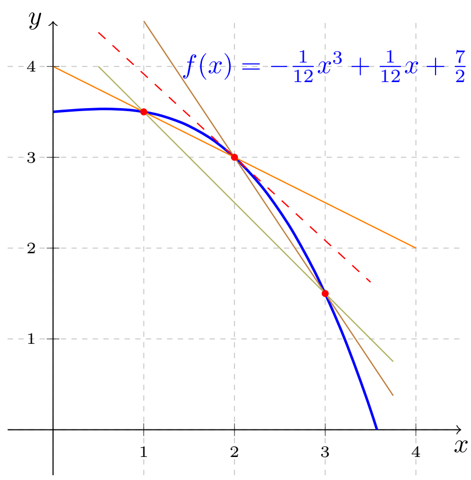

**Exemple 21**

Pour illustrer les trois formules, considérons les données suivantes

$$(x_0, f(x_0)) = \left(1, \tfrac{7}{2}\right), \quad (x_1, f(x_1)) = (2, 3) \quad \text{et} \quad (x_2, f(x_2)) = \left(3, \tfrac{3}{2}\right).$$

Estimons la valeur de $f'(2)$.

- Progressive $f'(2) \simeq \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} = \frac{\frac{3}{2}-3}{3-2} = -\frac{3}{2}.$
- Régressive $f'(2) \simeq \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0} = \frac{3-\frac{7}{2}}{2-1} = -\frac{1}{2}.$
- Centrée $f'(2) \simeq \frac{f(x_2)-f(x_0)}{x_2-x_0} = \frac{\frac{3}{2}-\frac{7}{2}}{3-1} = -1.$



Les données ont été calculé pour la fonction $f(x) = -\frac{1}{12}x^3 + \frac{1}{12}x + \frac{7}{2}$.
On a $f'(x) = -\frac{1}{4}x^2 + \frac{1}{12}$ et $f'(2) = -\frac{11}{12}$. ∎

Les formules à deux points peuvent également être obtenues à partir du polynôme d'interpolation de Lagrange. Étant donné deux points $(x_0, f(x_0))$ et $(x_1, f(x_1))$. Le polynôme de degré 1 passant par ces deux points est

$$p_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1).$$

Une approximation de la dérivée $f'$ en tout point $x$ peut alors être obtenue en dérivant directement l'interpolant.

$$f'(x) \simeq p_1'(x) = \frac{1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{1}{x_1 - x_0} f(x_1).$$

Si on choisit $(x_0 = x, x_1 = x + h)$, $(x_1 = x, x_0 = x - h)$ et $(x_1 = x + h, x_0 = x - h)$ on obtient les approximations suivantes.

- Formule de différence progressive $\quad f'(x) \simeq \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$.
- Formule de différence régressive $\quad f'(x) \simeq \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h}$.
- Formule de différence centrée $\quad f'(x) \simeq \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$.

### 3.2.2 Formules à trois points

Les formules à trois points peuvent être dérivées en écrivant le développement de Taylor par exemple à $x + h$ et $x + 2h$.

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(\xi_1), \xi_1 \in ]x, x+h[, \\ f(x+2h) &= f(x) + 2hf'(x) + 2h^2 f''(x) + \frac{4}{3} h^3 f'''(\xi_2), \xi_2 \in ]x, x+2h[. \end{aligned}$$

En éliminant $f''(x)$ entre ces deux relations on obtient

$$f'(x) = \frac{4f(x+h) - f(x+2h) - 3f(x)}{2h} + \left(\frac{2}{3} f'''(\xi_2) - \frac{1}{3} f'''(\xi_1)\right) h^2.$$

Si la dérivée du troisième ordre $f'''$ est une fonction continue dans l'intervalle $[x, x+2h]$, alors le théorème des valeurs intermédiaires implique qu'il existe un point $\xi \in ]x, x+2h[$ tel que

$$f'''(\xi) = 2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1).$$

Par conséquent

$$f'(x) = \frac{4f(x+h) - f(x+2h) - 3f(x)}{2h} + \frac{f'''(\xi)}{3}h^2, \xi \in ]x, x+2h[\,.$$

Ce qui donne

**Formule de différence progressive à trois points**

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

De même, en écrivant le développement de Taylor à $x-h$ et $x-2h$, on obtient

**Formule de différence régressive à trois points**

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

**Exemple 22**

Considérons la fonction $f(x) = -\frac{1}{12}x^3 + \frac{1}{12}x + \frac{7}{2}$ de l'exemple précédent pour les données

$$(x_0, f(x_0)) = \left(0, \tfrac{7}{2}\right), \quad (x_1, f(x_1)) = \left(1, \tfrac{7}{2}\right), \quad (x_2, f(x_2)) = (2, 3),$$
$$(x_3, f(x_3)) = \left(3, \tfrac{3}{2}\right) \quad \text{et} \quad (x_4, f(x_4)) = \left(4, -\tfrac{3}{2}\right).$$

- Progressive à trois points $\quad f'(2) \simeq \frac{-f(4)+4f(3)-3f(2)}{2} = \frac{\frac{3}{2}+6-9}{2} = -\frac{3}{4}.$
- Régressive à trois points $\quad f'(2) \simeq \frac{3f(2)-4f(1)+f(0)-}{2} = \frac{9-14+\frac{7}{2}}{2} = -\frac{3}{4}.$ ■

Les formules à trois points peuvent également être obtenues à partir du polynôme d'interpolation de Lagrange. Soit les points $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ et $(x_2, f(x_2))$ avec $x_0 < x_1 < x_2$.
Le polynôme de degré 2 passant par ces trois points est

$$p_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$$

L'approximation de la dérivée première est donnée par $f'(x) \simeq p_2'(x)$, qui peut s'écrire

$$f'(x) \simeq p_2'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$$

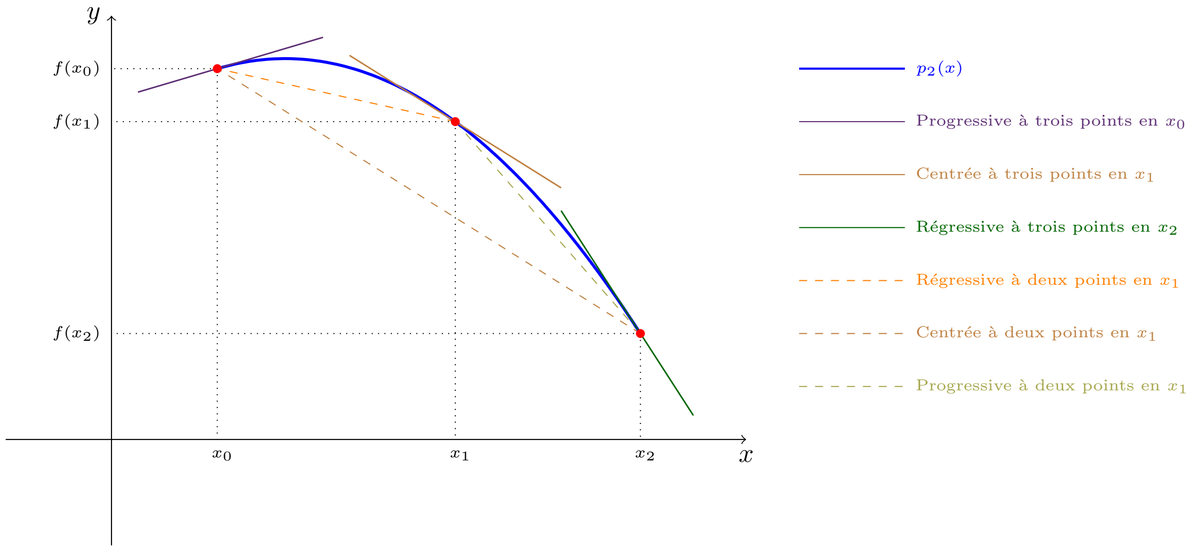
Lorsque $x$ prend successivement les valeurs $x_0, x_2$ et $x_1$ on obtient les approximations suivantes.

- Progressive $\quad f'(x_0) \simeq \frac{2x_0-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$
- Régressive $\quad f'(x_2) \simeq \frac{x_2-x_1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{x_2-x_0}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{2x_2-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$
- Centrée $\quad f'(x_1) \simeq \frac{x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{2x_1-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{x_1-x_0}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2).$

Ce qui donne dans le cas de points équidistants

- Progressive $\quad f'(x) \simeq \dfrac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h}.$
- Régressive $\quad f'(x) \simeq \dfrac{f(x-2h) - 4f(x-h) + 3f(x)}{2h}.$
- Centrée $\quad f'(x) \simeq \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$

La figure ci-dessous illustre les différentes possibilités.




Pour les différences à deux points, on estime la dérivée par la pente du segment de droite joignant les deux points. Dans le cas des différences à trois points, on détermine le polynôme d'interpolation de degré 2 dont la pente en $x_0$, en $x_1$ et en $x_2$ donne respectivement les différences progressive, centrée et régressive.

## 3.3 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, pour la dérivée seconde, on reprend le polynôme de degré 2 déjà utilisé pour calculer la dérivée première

$$p_2(x) = \tfrac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \tfrac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \tfrac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2).$$

L'approximation de la dérivée seconde est donnée par $f''(x) \simeq p_2''(x)$, qui peut s'écrire

$$f''(x) \simeq p_2''(x) = \tfrac{2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \tfrac{2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \tfrac{2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2).$$

Si on choisit $(x_0 = x, x_1 = x + h, x_2 = x + 2h)$, $(x_0 = x - 2h, x_1 = x - h, x_2 = x)$ et $(x_0 = x - h, x_1 = x, x_2 = x + h)$ on obtient les approximations suivantes.

- Formule de différence progressive $f''(x) \simeq \dfrac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}$.
- Formule de différence régressive $f''(x) \simeq \dfrac{f(x-2h) - 2f(x-h) + f(x)}{h^2}$.
- Formule de différence centrée $f''(x) \simeq \dfrac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}$.

**Exemple 23**

Considérons la fonction $f(x) = x^3$. Estimons la valeur de $f''(1)$ avec $h = 0.1$.

- Progressive $f''(x) \simeq \frac{f(1+0.2)-2f(1+0.1)+f(1)}{(0.1)^2} = \frac{(1.2)^3-2\times(1.1)^3+1^3}{(0.1)^2} = 6.6.$
- Régressive $f''(x) \simeq \frac{f(1-0.2)-2f(1-0.1)+f(1)}{(0.1)^2} = \frac{(0.8)^3-2\times(0.9)^3+1^3}{(0.1)^2} = 5.4.$
- Centrée $f''(x) \simeq \frac{f(1-0.1)-2f(1)+f(1+0.1)}{(0.1)^2} = \frac{(0.9)^3-2\times1^3+(1.1)^3}{(0.1)^2} = 6.$ ▪

## 3.4 Erreur

On définit l'erreur comme

$$E(h) = f'_{exacte}(x) - f'_{approximative}(x).$$

On dit que la formule de dérivation est d'ordre $n$, s'il existe une constante $C$ dépendant de $f$ telle que

$$|E(h)| < C\,h^n,$$

et on écrira fréquemment de façon abrégée $|E(h)| \sim O(h^n)$. La constante $C$ est dite le facteur de convergence de la méthode.

Soient $h_k > h_{k+1} > 0$. On définit l'ordre numérique par la formule suivante.

$$\textit{ordre numérique} = \frac{\mathrm{Log}\,|E(h_{k+1})| - \mathrm{Log}\,|E(h_k)|}{\mathrm{Log}\,(h_{k+1}) - \mathrm{Log}\,(h_k)}.$$

### 3.4.1 Dérivée première

Pour le calcul théorique de l'erreur commise lorsque on remplace $f'(x)$ par l'une des formules d'approximation ci-dessus, on revient au développement de Taylor effectué lors du calcul des formules de dérivation.

### Formules à deux points

- Erreur dans la formule progressive $|E(x)| = \left| f'(x) - \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| \leq C\, h.$
- Erreur dans la formule régressive $|E(x)| = \left| f'(x) - \dfrac{f(x) - f(x-h)}{h} \right| \leq C\, h.$
- Erreur dans la formule centrée $|E(x)| = \left| f'(x) - \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \right| \leq C\, h^2.$

**Exemple 24**

Considérons la fonction $f(x) = x^2 + x + \sin x$. 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 $f'(x) = 2x + 1 + \cos x$ et donc $f'(0) = 2$.

| $h$ | prog. | $E_{prog}(h)$ | ordre | reg. | $E_{reg}(h)$ | ordre | cent. | $E_{cent}(h)$ | ordre |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 2.4588 | -0.4588 | 0.9373 | 1.4588 | 0.5411 | 1.0554 | 1.9588 | 0.0411 | 1.9865 |
| 0.25 | 2.2396 | -0.2396 | 0.9691 | 1.7396 | 0.2603 | 1.0290 | 1.9896 | 0.0103 | 1.9966 |
| 0.125 | 2.1224 | -0.1224 | 0.9847 | 1.8724 | 0.1276 | 1.0148 | 1.9974 | 0.0026 | 1.9991 |
| 0.0625 | 2.0618 | -0.0618 | 0.9924 | 1.9368 | 0.0631 | 1.0074 | 1.9993 | 0.0006 | 1.9997 |
| 0.0312 | 2.0310 | -0.0310 | | 1.9686 | 0.0314 | | 1.9998 | 0.0001 | |

■

### Formules à trois points

- Erreur dans la formule progressive $|E(x)| = \left| f'(x) - \frac{-3f(x)+4f(x+h)-f(x+2h)}{2h} \right| \leq C\, h^2.$
- Erreur dans la formule régressive $|E(x)| = \left| f'(x) - \frac{f(x-2h)-4f(x-h)+3f(x)}{2h} \right| \leq C\, h^2.$

**Exemple 25**

Reprenons la fonction de l'exemple 24, $f(x) = x^2 + x + \sin x$ et $x = 0$.

| $h$ | prog. 3pts | $E_{prog}(h)$ | ordre | reg. 3pts | $E_{reg}(h)$ | ordre |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 2.0762 | -0.0762 | 1.9032 | 2.0762 | -0.0762 | 1.9032 |
| 0.25 | 2.0204 | -0.0204 | 1.9762 | 2.0204 | -0.0204 | 1.9762 |
| 0.125 | 2.0052 | -0.0052 | 1.9941 | 2.0052 | -0.0052 | 1.9941 |
| 0.0625 | 2.0013 | -0.0013 | 1.9985 | 2.0013 | -0.0013 | 1.9985 |
| 0.0312 | 2.0003 | -0.0003 | | 2.0003 | -0.0003 | |

■

### 3.4.2 Dérivée du second ordre

En utilisant le même principe comme pour la première dérivée, il suffit dans ce cas de passer à l'ordre 4 dans la formule de Taylor, on aura

$$\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f''''(\xi_1), \xi_1 \in ]x, x+h[,\\
f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f''''(\xi_2), \xi_2 \in ]x-h, x[,\\
f(x+2h) &= f(x) + 2hf'(x) + 2h^2f''(x) + \frac{4}{3}h^3f'''(x) + \frac{2h^4}{3}f''''(\xi_3), \xi_3 \in ]x, x+2h[,\\
f(x-2h) &= f(x) - 2hf'(x) + 2h^2f''(x) - \frac{4}{3}h^3f'''(x) + \frac{2h^4}{3}f''''(\xi_4), \xi_4 \in ]x-2h, x[.
\end{aligned}$$

On prend des combinaison linéaire des développement de Taylor, pour $f(x+h)$, $f(x-h)$, $f(x+2h)$ et $f(x-2h)$ pour obtenir les estimations d'erreur suivantes.

- Erreur dans la formule progressive $|E(x)| = \left|f''(x) - \frac{f(x+2h)-2f(x+h)+f(x)}{h^2}\right| \leq C\,h.$
- Erreur dans la formule régressive $|E(x)| = \left|f''(x) - \frac{f(x-2h)-2f(x-h)+f(x)}{h^2}\right| \leq C\,h.$
- Erreur dans la formule centrée $|E(x)| = \left|f''(x) - \frac{f(x-h)-2f(x)+f(x+h)}{h^2}\right| \leq C\,h^2.$

**Exemple 26**

Considérons la fonction $f(x) = e^{2x}$ et calculons des dérivées numériques secondes à $x = 0$ pour différentes valeurs de $h$ en utilisant les 3 formules de différences.

On a $f''(x) = 4e^{2x}$ et donc $f''(0) = 4$.

| $h$ | prog. | $E_{prog}(h)$ | ordre | reg. | $E_{reg}(h)$ | ordre | cent. | $E_{cent}(h)$ | ordre |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 11.8100 | -7.8100 | 1.5146 | 1.5983 | 2.4017 | 0.6572 | 4.3446 | -0.3446 | 2.0361 |
| 0.25 | 6.7334 | -2.7334 | 1.2330 | 2.4771 | 1.5229 | 0.8102 | 4.0840 | -0.0840 | 2.0090 |
| 0.125 | 5.1629 | -1.1629 | 1.1107 | 3.1315 | 0.8685 | 0.9001 | 4.0209 | -0.0209 | 2.0022 |
| 0.0625 | 4.5385 | -0.5385 | 1.0539 | 3.5346 | 0.4654 | 0.9488 | 4.0052 | -0.0052 | 2.0001 |
| 0.0312 | 4.2589 | -0.2589 | | 3.7592 | 0.2408 | | 4.0013 | -0.0013 | |

■

## 3.5 Exercices

En rédaction!