

Chapitre 1 : Dérivée numérique d'une fonction

1. Dérivée numérique, cas d'un pas constant :

Les formules pour les dérivées peuvent être obtenues à partir des formules d'interpolation de Newton pour un pas constant, mais peuvent aussi être établies en utilisant les développements en séries de Taylor.

1.1. Utilisation des différences à droite (ou progressive) :

a. Dérivées successives de $f(x)$ en x_j à l'ordre 1 en h :

Calcul de f'_j : l'erreur commise es de l'ordre de h

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

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

Donc :

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)}$$

Si

$$x = x_j$$

alors

$$f'(x_j) = \frac{f(x_{j+h}) - f(x_j)}{h} + O(h)$$

$$\boxed{f'_j = \frac{f_{j+1} - f_j}{h} + \sigma(h) = \frac{\Delta_+ f_j}{h} + O(h)}$$

Calcul de f''_j

$$\begin{aligned} (-2) * \left\{ \begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(x) + \dots \dots \dots \\ f(x+2h) &= f(x) + 2hf'(x) + 2h^2 f''(x) + \frac{8h^3}{6} f^{(3)}(x) + \dots \dots \dots \end{aligned} \right. \\ \hline -2f(x+h) + f(x+2h) = -f(x) + h^2 f''(x) + h^3 f^{(3)}(x) \end{aligned}$$

$$f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{h^2} - hf'''(x) + \dots$$

$$f_j'' = \frac{f_j - 2f_{j+1} + f_{j+2}}{h^2} + \sigma(h) = \frac{\Delta_+^2 f_j}{h^2} + O(h)$$

$$f_j^{(n)} = \frac{\Delta_+^n f_j}{h^n} + O(h)$$

b. Les dérivées successives de f(x) en x_j à l'ordre 2 en h :

On obtient une meilleure précision en prenant plus de termes dans le développement en séries, ainsi pour trouver f'_j on utilise le développement jusqu'à l'ordre 2.

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

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

$$\begin{aligned} &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} \left[\frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{h^2} - hf'''(x) - \dots \right] - \frac{h^2}{6}f'''(x) + \dots \\ &= \frac{2f(x+h) - 2f(x) - f(x) + 2f(x+h) - f(x+2h)}{2h} - \frac{4h^2}{3}f'''(x) + \dots \end{aligned}$$

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

Si $x = x_j$ $f'_j = \frac{-3f_j + 4f_{j+1} - f_{j+2}}{2h} + O(h^2)$

Par des démonstrations similaires on obtient f', f'', f''' ... à l'ordre 2 en h

	f _j	f _{j+1}	f _{j+2}	f _{j+3}	f _{j+4}	f _{j+5}	
2hf' _j	-3	4	-1				+ O(h ²)
h ² f'' _j	2	-5	4	-1			
2h ³ f ⁽³⁾ _j	-5	18	-24	14	-3		
h ⁴ f ⁽⁴⁾ _j	3	14	26	-24	11	-2	

1.2. Utilisation des différences à gauche (ou régressive) :

Cette méthode permet d'obtenir la dérivée d'ordre n au point x_j (f_j^n) comme combinaison linéaire des $f_j, f_{j-1}, f_{j-2}, \dots \dots f_{j-n}$

a. Dérivées successives de $f(x)$ en x_j à l'ordre 1 en h :

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

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

Donc :

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

Pour $x = x_j$

alors

$$f'(x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_j-h)}{h} + O(h)$$

$$f'_j = \frac{f_j - f_{j-1}}{h} + \sigma(h) = \frac{\Delta_- f_j}{h} + O(h)$$

$$f_j^{(n)} = \frac{\Delta_-^n f_j}{h^n} + O(h)$$

Pour trouver la dérivée à l'ordre 1 en h d'ordre (n), on utilise (n+1) points. Pour la dérivée première à l'ordre 1 en h, on prend les deux premiers termes du polynôme.

	f_j	f_{j-1}	f_{j-2}	f_{j-3}	f_{j-4}	
$+ O(h)$	hf'_j	1	-1			
	$h^2 f''_j$	1	-2	1		
	$h^3 f_j^{(3)}$	1	-3	3	-1	
	$h^4 f_j^{(4)}$	1	-4	6	-4	1

b. Dérivées successives de f(x) en x_j à l'ordre 2 en h :

On procède comme au paragraphe 3.1b à partir du développement de f(x-h) au lieu de f(x+h).

Les premières dérivées à l'ordre 2 en h sont données dans le tableau suivant :

	f_j	f_{j-1}	f_{j-2}	f_{j-3}	f_{j-4}	f_{j-5}	+ $O(h^2)$
$2hf'_j$	3	-4	1				
$h^2f''_j$	2	-5	4	-1			
$2h^3f^{(3)}_j$	5	-18	24	14	3		
$h^4f^{(4)}_j$	3	-14	26	-24	11	-2	

Pour trouver la dérivée nième du polynôme à l'ordre 2 en h, on utilise (n+2) points ou bien pour la dérivée première à l'ordre 2 en h, on prend les trois premiers termes du polynôme.

1.3. Utilisation des différences centrées :

a. Pour calculer $f'_j^{(n)}$ on utilise les points situés de part et d'autre de x_j

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

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

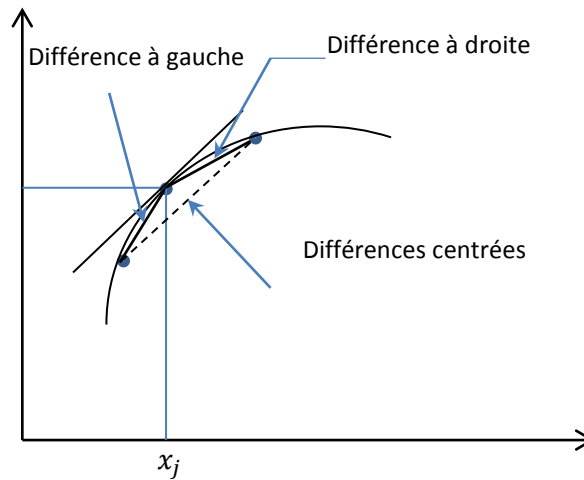
$$f(x + h) - f(x - h) = 2hf'(x) + \frac{2h^3}{3!}f^{(3)}(x) + \dots \dots \dots$$

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

Si $x = x_j$ alors $f'_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f_j^{(3)}$

Malgré qu'on ait utilisé deux points, l'erreur est de l'ordre 2 en h (plus précise) :

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



$$f(x + h) + f(x - h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + \frac{h^4}{12} f^{(4)}(x) \dots \dots$$

$$f''(x) = \frac{f(x - h) - 2f(x) + f(x + h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(x) + \dots \dots$$

$$f_j'' = \frac{f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} f_j^{(4)}(x) + \dots \dots$$

Lorsque n est paire $n = 2p$:

$$f_j^{(2p)} = \frac{\Delta_-^{2p} f_{j+p} + \Delta_+^{2p} f_{j-p}}{h^{2p}} + O(h^2)$$

Lorsque n est impaire $n = 2p + 1$

$$f_j^{(2p+1)} = \frac{\Delta_-^{2p+1} f_{j+p} + \Delta_+^{2p+1} f_{j-p}}{2h^{2p+1}} + O(h^2)$$

Le tableau suivant donne les quatre premières dérivées à l'ordre 2 en h

	f_{j-2}	f_{j-1}	f_j	f_{j+1}	f_{j+2}	
$2hf'_j$		-1	0	1		+ $O(h^2)$
$h^2f''_j$		1	-2	1		
$2h^3f^{(3)}_j$	-1	2	0	-2	1	
$h^4f^{(4)}_j$	1	-4	6	-4	1	

1.4. Approximation de la dérivée croisée $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \Big|_{i,j} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\partial f}{\partial x} \right]_{i,j} = \frac{\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{i,j+1} - \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{i,j-1}}{2k} + O(h^2)$$

Or $\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{i,j+1} = \frac{f_{i+1,j+1} - f_{i-1,j+1}}{2h} + O(h^2)$

Et $\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{i,j-1} = \frac{f_{i+1,j-1} - f_{i-1,j-1}}{2h} + O(h^2)$

Donc

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \Big|_{i,j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \Big|_{i,j} = \frac{1}{4hk} [f_{i+1,j+1} - f_{i-1,j+1} - f_{i-1,j-1} + f_{i+1,j-1}] + O(h + k^2)$$

2. Incertitude sur le calcul des dérivées :

On peut montrer que lorsque $f(x)$ est approchée par un polynôme $P_n(x)$ on a :

$$\frac{df(x)}{dx} - \frac{dP_n(x)}{dx} = \frac{dS_n(x)}{dx} \frac{f^{(n+1)}(C_1)}{(n+1)!} + S_n(x) \frac{f^{(n+2)}(C_2)}{(n+2)!} \tag{3}$$

Ou C_1 et C_2 appartiennent à l'intervalle d'interpolation.

$$S_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \dots \dots \dots (x - x_n)$$

Lorsque $x = x_j$ $S_n(x_j) = 0$

$$E'(x_j) = \frac{f^{(n+1)}(C_1)}{(n+1)!} \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n (x_j - x_i)$$

$$\left. \frac{dS_n}{dx} \right|_{x=x_j} = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^n (x_j - x_i)$$

Si $f^{(n+1)}(x)$ admet un majorant connu, on a d'après **(3)** une idée de l'incertitude sur le calcul de la dérivée première. Malheureusement il est rare qu'on ait ce renseignement surtout si $f(x)$ est donnée sous forme de table.