DÉRIVATION NUMÉRIQUE

1. Approximation des différences finies d'une dérivée

La dérivée $f'(x)$ d'une fonction $f(x)$ au point $x = a$ est définie par:

$$\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=a} = f'(a) = \frac{f(x) - f(a)}{x - a}. \tag{1.1}$$

Il existe différentes formules d'approximation aux différences finies. Trois de ces formules, où la dérivée est calculée à partir des valeurs de deux points, sont présentées dans cette section:

Formules de différence avant, arrière et centrale pour la première dérivée

Les formules de différences finies avant, arrière et centrale sont les approximations de différences finies les plus simples de la dérivée.

• **La différence avant (la différence de différences finies progressive)** est la pente de la ligne qui relie les points $(x_i, f(x_i))$ et $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$:

$$\boxed{\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_i} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}.} \tag{1.2}$$

• **La différence en arrière (la différence de différences finies régressive)** est la pente de la ligne qui relie les points $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ et $(x_i, f(x_i))$:

$$\boxed{\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}.} \tag{1.3}$$

• **La différence centrale (la différence de différences finies centrée)** est la pente de la ligne qui relie les points $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ et $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$:

$$\boxed{\left.\frac{df(x)}{dx}\right|_{x=x_i} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}}.} \tag{1.4}$$

Le premier exemple montre l'application de l'avant, arrière, et formules centrales aux différences finies.

Compare la différentiation numérique avec la différentiation analytique

Exemple 1. *Considérons la fonction $f(x) = x^3$. Calculez sa première dérivée au point $x = 3$ numériquement avec le formules de différences finies avant, arrière et centrale et en utilisant:*

(a) Points $x = 2$, $x = 3$ et $x = 4$.

(b) Points $x = 2.75$, $x = 3$ et $x = 3.25$.

Comparez les résultats avec le dérivé exact (analytique).

Solution 1.

Différentiation analytique: la dérivée de la fonction est $f'(x) = 3x^2$, et la valeur de la dérivée à $x = 3$ est $f'(3) = 3 \cdot 3^2 = 27$.

Différentiation numérique:

(a) Les points utilisés pour la différenciation numérique sont:

x	2	3	4
$f(x)$	8	27	64

Utilisation des équations 5 à 7, les dérivées utilisant la différence finie avant, arrière et centrale les formules sont:

Différence finie avant ***(Différence de différences finies progressive):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(4) - f\,(3)}{4-3} = \frac{64-27}{1} = 37$$

$$error = \left|\frac{37-27}{27}\cdot 100\right| = 37{,}04\%,$$

Différence finie arrière ***(Différence de différences finies régressive):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(3) - f\,(2)}{3-2} = \frac{27-8}{1} = 19$$

$$error = \left|\frac{19-27}{27}\cdot 100\right| = 29{,}63\%,$$

Différence finie centrale ***(Différence de différences finies centrée):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(4) - f\,(2)}{4-2} = \frac{64-8}{2} = 28$$

$$error = \left|\frac{28-27}{27}\cdot 100\right| = 3.704\%.$$

(b) Les points utilisés pour la différentiation numérique sont:

x	2.75	3	3.25
$f(x)$	2.75^3	3^3	3.25^3

Utilisation des équations (1.2) à (1.4), les dérivées utilisant la différence finie avant, arrière et centrale les formules sont:

Différence finie avant ***(Différence de différences finies progressive):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(3.25) - f\,(3)}{3.25-3} = \frac{3.25^3-27}{0.25} = 29{,}3125$$

$$error = \left|\frac{29{,}3125-27}{27}\cdot 100\right| = 8{,}565\%,$$

Différence finie arrière ***(Différence de différences finies régressive):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(3) - f\,(2.75)}{3-2.75} = \frac{27-2.75^3}{0.25} = 24.8125$$

$$error = \left|\frac{24.8125-27}{27}\cdot 100\right| = 24{,}8125\%,$$

Différence finie centrale ***(Différence de différences finies centrée):***

$$\left.\frac{df\,(x)}{dx}\right|_{x=3} = \frac{f\,(3.25) - f\,(2.75)}{3.25-2.75} = \frac{3.25^3-2.75^3}{0.5} = 27.0625$$

$$error = \left|\frac{27.0625-27}{27}\cdot 100\right| = 21{,}0625\%.$$

Les résultats montrent que la formule centrale des différences finies donne une approximation plus précise.

Il existe deux approches pour construire de telles approximations, l'une utilise les développement en série de Taylor et l'autre utilise les formules d'interpolation.

2. Formules via la série Taylor

2.1. **Formules aux différences finies de la dérivée première. Formule de différence en avant (*progressive*) en deux points**

La valeur d'une fonction au point $x + h$ peut être approchée par une série de Taylor en fonction de la valeur de la fonction et de ses dérivées au point x :

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots \tag{2.1}$$

En utilisant une expansion de série de Taylor à deux termes avec un reste, Eq. (2.1) peut être réécrit comme:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi), \quad \xi \in]x, x+h[\tag{2.2}$$

d'où

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2!}f''(\xi), \quad \xi \in]x, x+h[\tag{2.3}$$

Une valeur approximative de la dérivée $f(x)$ peut maintenant être calculée si le deuxième terme sur le côté droit de Eq. (2.3) est ignoré. Ignorer ce second terme introduit une erreur de discrétisation par troncature. Puisque ce terme est proportionnel à h, l'erreur de troncature est dite de l'ordre de h (écrit $O(h)$):

$$\boxed{\text{erreur de troncature} = -\frac{f"(\xi)}{2!}h = O(h)} \tag{2.4}$$

En utilisant la notation de Eq. (2.4), la valeur approximative du premier dérivé est:

$$\boxed{f'_d = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)} \tag{2.5}$$

Formule de différence en arrière (*régressive*) en deux points

La formule de différence vers l'arrière peut également être dérivée par application de série de Taylor

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi) - \cdots \tag{2.6}$$

En utilisant une expansion de série de Taylor à deux termes avec un reste, Eq. (2.6) peut être réécrit comme:

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi), \quad \xi \in]x, x+h[\tag{2.7}$$

Résolution de l'équation (2.7) pour $f'(x)$ donne:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2!}f''(\xi), \quad \xi \in]x, x+h[\tag{2.8}$$

Une valeur approximative de la dérivée, $f'(x)$, peut être calculée si le deuxième terme à droite de l'Eq. (2.8) est ignoré. Cela donne:

$$\boxed{f'_g = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h)} \tag{2.9}$$

Formule de différence centrale en deux points

D'autre part, on a aussi

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi) + \frac{h^3}{3!}f''(\eta_1), \quad \eta_1 \in]x, x+h[\tag{2.10}$$

et

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi) - \frac{h^3}{3!}f''(\eta_2), \quad \eta_2 \in]x-h, x[, \tag{2.11}$$

d'où

$$\begin{gathered} f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{3!}\left[f''(\eta_1) + f''(\eta_2)\right], \\ \eta_1 \in]x, x+h[, \eta_2 \in]x-h, x[. \end{gathered}$$

Ainsi

$$\begin{gathered} f'(x) = \tfrac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{2 \cdot 3!}\left[f''(\eta_1) + f''(\eta_2)\right], \\ \eta_1 \in]x, x+h[, \eta_2 \in]x-h, x[. \end{gathered}$$

On sait qu'en vertu du théorème des valeurs intermédiaires, il existe $\xi \in]x-h, x+h[$

$$\frac{f''(\eta_1) + f''(\eta_2)}{2} = f^{(3)}(\xi).$$

Il s'ensuit

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi), \quad \xi \in]x-h, x+h[. \tag{2.12}$$

D'où la formule dérivée centrée d'ordre 2 est définie par:

$$\boxed{f'_c = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2).} \tag{2.13}$$

La formule de différence avant en trois points calcule la dérivée au point x à partir de la valeur à ce point et des deux points suivants, $x+h$ et $x+2h$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(\eta_1), \quad \eta_1 \in]x, x+h[\tag{2.14}$$

$$f(x+2h) = f(x) + (2h)\,f'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(\eta_2), \quad \eta_2 \in]x, x+h[\tag{2.15}$$

Les équations (2.14) et (2.15) sont ensuite combinées de telle sorte que les termes avec la dérivée seconde disparaissent. Cela se fait en multipliant Eq. (2.14) par 4 et en soustrayant l'Eq. (2.15):

$$4f(x+h) - f(x+2h) = 3f(x) + 2hf'(x) + \frac{4h^3}{3!}f'''(\eta_1) - \frac{(2h)^3}{3!}f'''(\eta_2). \tag{2.16}$$

Une estimation de la première dérivée est obtenue en résolvant l'équation (2.16) pour $f'(x)$ en négligeant les autres termes, ce qui introduit une troncature erreur de l'ordre de h^2:

$$\boxed{f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + O\left(h^2\right).} \tag{2.17}$$

L'équation (2.17) est la formule de différence en trois points qui estime la première dérivée au point x; à partir de la valeur de la fonction à ce point et aux deux points suivants, $x+h$ et $x+2h$, avec une erreur de $O\left(h^2\right)$.

La formule de différence en arrière à trois points donne la dérivée au point x de la valeur de la fonction à ce point et à la précédente deux points, $x-h$ et $x-2h$:

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(\eta_1), \quad \eta_1 \in \left]x, x+h\right[\tag{2.18}$$

et

$$f(x-2h) = f(x) - (2h)\, f'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) - \frac{(2h)^3}{3!}f'''(\eta_2), \quad \eta_2 \in \left]x, x+h\right[\tag{2.19}$$

La formule est dérivée de la même manière que Eq. (2.17) a été dérivée. Le développement en série de Taylor à trois termes avec un reste est écrit pour la valeur de la fonction au point $x-h$, et au point $x-2h$ en termes de valeur de la fonction et de ses dérivées au point x. Les équations sont ensuite manipulées pour obtenir une équation sans les termes dérivés secondes, qui est ensuite résolue pour $f'(x)$. La formule obtenue est:

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x-2h) - 4f(x-h) + 3f(x)}{2h} + O\left(h^2\right).} \tag{2.20}$$

Comparaison de la différentiation numérique et analytique.

Exemple 2. *Considérons la fonction $f(x) = x^3$. Calculez la première dérivée au point $x = 3$ numériquement avec la formule de différence avant trois points, en utilisant:*

(a) Points $x = 3$, $x = 4$ et $x = 5$.

(b) Points $x = 3$, $x = 3.25$ et $x = 3.5$.

Comparez les résultats avec la valeur exacte de la dérivée, obtenue analytiquement.

Différenciation analytique: La dérivée de la fonction est $f'(x) = 3x^2$, et la valeur de la dérivée à $x = 3$ est $f'(3) = 3.3^2 = 27$.

Différentiation numérique:

(a) Les points utilisés pour la .
différenciation numérique sont:

x	3	4	5
$f(x)$	27	64	125

Utilisation de l'Eq. (24), le dérivé utilisant la formule de différence à trois points à terme est:

$$f'(3) = \frac{-3f(3) + 4f(4) - f(5)}{2 \cdot 1} = \frac{-3 \cdot 27 + 4 \cdot 64 - 125}{2 \cdot 1} = 25$$

$$error = \left|\frac{25-27}{27}\right| \cdot 100 = 7.41\%.$$

(b) Les points utilisés pour la différenciation numérique sont:

x	3	3.25	3.5
$f(x)$	27	3.25^3	3.5^3

Utilisation de l'Eq. (24), la dérivée utilisant la formule des différences finies à trois points avant est:

$$f'(3) = \frac{-3f(3) + 4f(3.25) - f(3.5)}{2 \cdot 0.25} = \frac{-3 \cdot 27 + 4 \cdot 3.25^3 - 3.5^3}{0.5} = 26.875$$
$$error = \left| \frac{26.875 - 27}{27} \right| \cdot 100 = 0.46\%.$$

Les résultats montrent que la formule de différence directe à trois points donne une valeur beaucoup plus précise pour la première dérivée que la formule de différence finie directe à deux points de l'exemple 1. Pour $h = 1$ l'erreur diminue de $37,04\%$ à $7,4\%$, et pour $h = 0,25$ l'erreur diminue de $8,57\%$ à $0,46\%$.

2.2. **Dérivée seconde.** On a

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) \\ &+ \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\eta_1), \quad \eta_1 \in]x, x+h[\end{aligned} \tag{2.21}$$

et

$$\begin{aligned} f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(\xi) - \frac{h^3}{3!}f''(\eta_2) \\ &+ \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\eta_2), \quad \eta_2 \in]x-h, x[, \end{aligned} \tag{2.22}$$

Donc

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + 2\frac{h^2}{2!}f''(\xi) + \frac{h^4}{4!}\left[f^{(4)}(\eta_1) + f^{(4)}(\eta_2)\right],$$

pour $\eta_1 \in]x, x+h[, \eta_2 \in]x-h, x[$. Ainsi

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \frac{h^2}{4!}\left[f^{(4)}(\eta_1) + f^{(4)}(\eta_2)\right],$$

avec $\eta_1 \in]x, x+h[, \eta_2 \in]x-h, x[$. Il s'ensuit

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \frac{h^2}{2 \cdot 3!}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in]x-h, x+h[. \tag{2.23}$$

Cela introduit une erreur de troncature de l'ordre de h^2

$$\boxed{f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O\left(h^2\right).} \tag{2.24}$$

3. RÉSUMÉ DES FORMULES DE DIFFÉRENCES FINIES POUR LA DIFFÉRENTIATION NUMÉRIQUE

Dérivée première	
$f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$	$O(h)$
$f'(x) = \dfrac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h}$	$O\left(h^2\right)$
Dérivée seconde	
$f''(x) = \dfrac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2}$	$O(h)$
$f''(x) = \dfrac{-f(x+3h) + 4f(x+2h) - 5f(x+h) + 2f(x)}{h^2}$	$O\left(h^2\right)$
Dérivée troisième	
$f'''(x_i) = \dfrac{f(x+3h) - 3f(x+2h) + 3f(x+h) - f(x)}{h^3}$	$O(h)$
$f'''(x_i) = \dfrac{-3f(x+4h) + 14f(x+3h) - 24f(x+2h) + 18f(x+h) - 5f(x)}{2h^3}$	$O\left(h^2\right)$
Dérivée quatrième	
$f''''(x_i) = \dfrac{f(x+4h) - 4f(x+3h) + 6f(x+2h) - 4f(x+h) + f(x)}{h^4}$	$O(h)$
$f''''(x_i) = \dfrac{-2f(x+5h) + 11f(x+4h) - 24f(x+3h)}{h^4} \dfrac{+26f(x+2h) - 14f(x+h) + 3f(x)}{h^4} \checkmark$	$O\left(h^2\right)$
Formules aux différences finies à droite	

Dérivée première

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

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

Dérivée seconde

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

$$f''(x) = \frac{2f(x) + 5f(x-h) + 4f(x-2h) - 2f(x-3h)}{h^2}$$

Dérivée troisième

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

$$f'''(x) = \frac{5f(x) - 18f(x-h) + 24f(x-2h) - 14f(x-3h) + 3f(x-4h)}{2h^3}$$

Dérivée quatrième

$$f''''(x) = \frac{f(x) - 4f(x-h) + 6f(x-2h) - 4f(x-3h) + f(x-4h)}{h^4}$$

$$f''''(x) = \frac{3f(x) - 14f(x-h) + 26f(x-2h) - 24f(x-3h) + 11f(x-4h) - 2f(x-5h)}{h^4}$$

Formules aux différences finies à gauche

Dérivée première	
$f'(x) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$	$O\left(h^2\right)$
$f'(x) = \dfrac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}$	$O\left(h^4\right)$
Dérivée seconde	
$f''(x) = \dfrac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$	$O\left(h^2\right)$
$f''(x) = \dfrac{-f(x+2h) + 16f(x+h) - 30f(x) + 16f(x-h) - f(x-2h)}{12h^2}$	$O\left(h^4\right)$
Dérivée troisième	
$f'''(x) = \dfrac{f(x+2h) - 2f(x+h) + 2f(x-h) - f(x-2h)}{2h^3}$	$O\left(h^2\right)$
$f'''(x) = \dfrac{-f(x+3h) + 8f(x+2h) - 13f(x+h) + 13f(x-h)}{8h^3}$ $\dfrac{-8f(x-2h) + f(x-3h)}{8h^3}$	$O\left(h^4\right)$
Dérivée quatrième	
$f''''(x) = \dfrac{f(x+2h) - 4f(x+h) + 6f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{h^4}$	$O\left(h^2\right)$
$f''''(x) = \dfrac{-f(x+3h) + 12f(x+2h) - 39f(x+h) + 56f(x)}{h^4}$ $\dfrac{-39f(x-h) + 12f(x-2h) - f(x-3h)}{h^4}$	$O\left(h^4\right)$

Formules aux différences finies centrées