Table des matières

Chapitre I

Intégration et dérivation numérique.

1 Intégration numérique, Formules de quadrature

Soit f une fonction réelle intégrable sur l'intervalle $[a, b]$. Le calcul explicite de l'intégrale définie $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ peut être difficile, voire impossible. On appelle formule de quadrature ou formule d'intégration numérique toute formule permettant de calculer une approximation de $I(f)$. Une possibilité consiste à remplacer f par une approximation f_n, où n est un entier positif, et calculer $I(f_n)$ au lieu de $I(f)$. En posant $I_n(f) = I(f_n)$, on a

$$I_n(f) = \int_a^b f_n(x)dx$$

La dépendance par rapport aux extrémités a, b sera toujours sous-entendue. On écrira donc $I_n(f)$ au lieu de $I_n(f; a, b)$. Si $f \in C^0([a, b])$, l'erreur de quadrature $E_n(f) = I(f) - I_n(f)$ satisfait $|E_n(f)| \leq$

$\int_a^b |f(x) - f_n(x)| dx \leq (b-a) \parallel f - f_n \parallel$

Donc, si pour un certain n, $\parallel f - f_n \parallel \leq \varepsilon$, alors $|E_n(f)| \leq \varepsilon(b-a)$. L'approximation f_n doit être facilement intégrable, ce qui est le cas si, par exemple $f_n \in \mathbb{P}_n$. Une approche naturelle consiste à prendre $f_n = \Pi_n f$, le polynôme d'interpolation de Lagrange, d'Hermite ou .... de f. Ainsi si on considère le polynôme d'interpolation de Lagrange de f sur un ensemble de $n+1$ noeuds distincts $x_i, i = 0, ..., n$. $(\Pi_n f = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i))$ alors

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} (\int_a^b L_i(x) dx) f(x_i)$$

est un cas particulier de **la formule de Quadrature**, on parle alors de **formules de Newton-Cotes**. On définit dans le cas général

les formules fermées pour lesquelles $x_0 = a, \ldots x_n = b$ et $x_k = a + kh, h = \frac{b-a}{n}$

Les formules ouvertes pour lesquels $x_0 = a + h, x_n = b - h$ et $x_k = x_0 + kh, h = \frac{b-a}{n+2}$.

Nous considérons les formules de quadrature suivantes:

$$I_n(f) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i f(x_i)$$

Les α_i sont appelés les poids de la formule de quadrature et les x_i les noeuds de la formule de quadrature. Cette formule peut aussi faire intervenir les dérivées de f (si on utilise l'interpolation d'Hermite) on parle de **formules de quadrature d'Hermite**. Ces 2 types sont appelés **formules de quadrature interpolatoire**.
Il est à noter que les poids de quadrature α_i ne dépendent que de n et de h et non pas de $[a, b]$.

Degré d'exactitude et ordre d'une formule de quadrature

Définition 1.1. *On dit que la formule de quadrature (1-1) est exacte pour une fonction f sur $[a, b]$ si $I_n(f) = I(f)$*
La formule est dite de degré d'exactitude r si elle est exacte pour tout polynôme f de degré $\leq r$. c.à.d. $I_n(f) = I(f) \quad \forall f \in \mathbb{P}_r$.

- Ainsi toute formule de quadrature interpolatoire utilisant $n+1$ noeuds distincts a un degré d'exactitude au moins égal à n (résulte du fait que si $f \in P_n$ alors $\Pi_n f = f$ et donc $I_n(\Pi_n f) = I(\Pi_n f))$

Définition 1.2. *Si on considère une subdivision de $[a, b]$ régulière avec un pas H comme précedemment, On dit que la formule de quadrature (1-1) est d'ordre $q \geq 1$ par rapport à H si pour toute fonction régulièref $I_n(f) - I(f) = O(H^q)$*

1-1 Formule du rectangle (ou du point milieu)

Cette formule est obtenue en remplaçant f par une constante égale à la valeur de f au milieu de l'intervalle $[a, b]$(voir fig. 1) :

$$I_0(f) = (b-a)f(\frac{a+b}{2})$$

On a pour $f \in C^2([a, b])$ l'erreur de quadrature

$$E_0(f) = I(f) - I_0(f) = \frac{h^3}{3}f''(\xi) \quad \text{où} \quad h = \frac{b-a}{2} \quad \xi \in]a, b[$$

Il suffit d'appliquer la formule de Taylor de f à l'ordre 2 en $x_M = \frac{a+b}{2}$, il existe alors $\xi \in]a, b[$ tel que:

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

et utiliser la formule de la moyenne.

Ainsi on en déduit que la formule de rectangle a un

degré d'exactitude $r = 1$ puisque pour un polynôme de degré ≤ 1 l'erreur $E_0(f) = 0$ ($f"(\xi) = 0$).
Pour obtenir une meilleure approximation on considère une subdivision de $[a, b]$ en m intervalles $I_k = [x_k, x_{k+1}]$ $k = 0, \ldots, m-1$ de même longueur $H = \frac{b-a}{m}$ avec $x_0 = a$ et $x_m = b$. puisque $\displaystyle\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{I_k} f(x)dx$ et en utilisant la formule de rectangle sur chaque I_k on obtient **la formule de rectangle composite** suivante:

$$I_{0,m}(f) = \sum_{k=0}^{m-1} Hf(\xi_k) \quad \text{où} \quad \xi_k = \frac{x_k + x_{k+1}}{2}$$

On a pour $f \in C^2([a, b])$ l'erreur de quadrature

$$E_{0,m}(f) = I(f) - I_{0,m}(f) = \frac{b-a}{24} H^2 f"(\xi) \quad \text{où} \quad \xi \in]a, b[$$

En effet $E_{0,m}(f) = \displaystyle\sum_{i=0}^{m-1} (E_0(f)_{I_k})$d'après (1-1)

$$E_{0,m}(f) = \sum_{i=0}^{m-1} [\frac{(H/2)^3}{3} f"(\xi_k)] = \sum_{i=0}^{m-1} [\frac{(H)^2}{24} f"(\xi_k) \frac{b-a}{m}]$$ et d'après le théorème de

la moyenne discrète (ci dessous) $\exists \xi \in]a,b[$ tel que $\sum_{i=0}^{m-1} f"(\xi_k) = mf"(\xi)$ d'où (1-1).

Théorème 1.1. *Théorème de la moyenne discrète: Soit $g \in C^0[a,b]$, soient x_j $s+1$ points de $[a,b]$ et δ_j $s+1$ constantes de même signe alors il existe $\eta \in [a,b]$ tel que*

$$\sum_{i=0}^{s} \delta_j g(x_j) = g(\eta) \sum_{i=0}^{s} \delta_j$$

preuve: Soit $g_M = \max_{x\in[a,b]} g(x) = g(\widehat{x}_1)$ et $g_m = \min_{x\in[a,b]} g(x) = g(\widehat{x}_2)$ où $\widehat{x}_1$ et $\widehat{x}_2$ sont deux points de $[a,b]$. alors

$$g_m \sum_{i=0}^{s} \delta_j \leq \sum_{i=0}^{s} \delta_j g(x_j) \leq g_M \sum_{i=0}^{s} \delta_j$$

En posant la fonction $G(x) = g(x) \sum_{i=0}^{s} \delta_j$ qui est continue et on a
$G(\widehat{x}_2) \leq \sum_{i=0}^{s} \delta_j g(x_j) \leq G(\widehat{x}_1)$, en utilisant le théorème des valeurs intermediaire, on trouve le résultat.

Figure1 Méthode de rectangle.

1-2 Formule du trapèze

Si, au lieu de remplacer f par une constante, on remplace f par le polynôme d'interpolation de degré 1 aux noeuds a et b on obtient la formule du trapèze (voir fig. 2) :

$$I_1(f) = \frac{(b-a)}{2}(f(a) + f(b))$$

Pour f une fonction de classe $C^2[a,b]$,et pour tout $x \in [a,b]$ il existe $\xi_x \in]a,b[$ tel que:

$$f(x) - \Pi_1 f(x) = \frac{1}{2} f"(\xi_x)(x-a)(x-b)$$

et comme $\Pi(x) = (x-a)(x-b) < 0$ sur $]a,b[$ alors d'après la formule de la moyenne, il existe $\xi \in]a,b[$ tel que:

$$E_1(f) = I(f) - I_1(f) = -\frac{(b-a)^3}{12} f"(\xi)$$

De nouveau, on peut introduire une partition de l'intervalle $[a,b]$ en m sous-intervalles I_k de longueur

H. Alors, la formule composite du trapèze est:

$$\begin{aligned} I_{1,m}(f) &= \sum_{k=0}^{m-1} \frac{H}{2}[f(x_k) + f(x_{k+1}] \\ &= H[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{m-1} + \frac{1}{2}f(x_m)] \end{aligned}$$

On peut montrer comme (1-1), que si $f \in C^2([a,b])$ l'erreur de quadrature

$$E_{1,m}(f) = I(f) - I_{1,m}(f) = -\frac{b-a}{12}H^2 f"(\xi) \quad \text{où} \quad \xi \in]a,b[$$

Le degré d'exactitude pour la formule (1-1) est donc $r = 1$.

Figure2 Méthode de Trapèze.

1-3 Méthode de Simpson

La formule de Simpson est obtenue en remplaçant f par son polynôme d'interpolation de Lagrange de degré 2 aux points a, $\frac{a+b}{2}$ et b, on obtient la formule de Simpson (voir fig. 3) :

$$I_2(f) = \frac{(b-a)}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$$

On montre de même que si $f \in C^4([a,b])$ l'erreur de quadrature

$$E_2(f) = I(f) - I_2(f) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi) \quad \text{où} \quad \xi \in]a,b[$$

et $h = \frac{b-a}{2}$ On en déduit que la formule de Simpson a un degré d'exactitude $r = 3$ et son ordre est $q = 5(r+2)$. (même remarque pour les méthodes de rectangle et de trapèze).
De nouveau, on peut introduire une partition de l'intervalle $[a,b]$ en m sous-intervalles I_k de longueur H. Alors, la formule composite de Simpson est donnée par:

$$\begin{aligned} I_{2,m}(f) \qquad &= \sum_{k=0}^{m-1} \frac{H}{6}[f(x_k) + 4f(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}) + f(x_{k+1}] \\ = \frac{H}{6}[f(x_0) \ &+2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_k) + 4\sum_{k=0}^{m-1} f(\frac{x_k + x_{k+1}}{2}) + f(x_m)] \end{aligned}$$

On peut montrer là aussi que si $f \in C^4([a,b])$ l'erreur de quadrature est donnée par:

$$E_{2,m}(f) = I(f) - I_{2,m}(f) = -\frac{b-a}{180}(\frac{H}{2})^4 f^{(4)}(\xi) \quad \text{où} \quad \xi \in]a,b[$$

Figure3 Méthode de Simpson.

1-4 Formules composite de Newton côtes

Comme pour les méthodes de rectangle, trapèze et Simpson composite, on considère une subdivision de $[a,b]$ en m sous intervalles $I_j = [y_j, y_{j+1}]$ tels que $y_j = a + jH$où $H = \frac{b-a}{m}$ pour $j = 0,\ldots,m$
On utilise alors sur chaque sous intervalle une formule interpolatoire de noeuds $x_k^{(j)}; 0 \leq k \leq n$ et de poids $\alpha_k^{(j)}; 0 \leq k \leq n$ et comme $I(f) = \sum_{j=0}^{m-1} \int_{I_j} f(x)dx$ on

obtient la formule de quadrature composite

$$I_{n,m}(f) = \sum_{j=0}^{m-1} I_n^{(j)} = \sum_{j=0}^{m-1} \sum_{i=0}^{n} \alpha_k^{(j)} f(x_k^{(j)})$$

noter que $I_n^{(j)}$ est la formule de quadrature sur l'intervalle I_j. Ainsi si cette formule est d'ordre q alors la formule composite (1-1) a un ordre $q-1$
En effet si

$$|\int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x)dx - I_n^{(j)}| = CH^q$$

Alors

$$\begin{aligned} |\int_a^b f(x)dx - I_{n,m}| &\leq \sum_{j=0}^{m-1} |\int_{y_j}^{y_{j+1}} f(x)dx - I_n^{(j)}| \\ &\leq mCH^q = CH^{q-1}(b-a) \end{aligned}$$

1-5 Formule de Gauss-Legendre

L'idée des formules de Gauss-Legendre est de placer au mieux les points d'intégration $x_0, x_1, ..., x_n$ de sorte que la formule de quadrature

$$I_n(f) = \sum_{j=0}^{n} \alpha_j f(x_j)$$

ait un degré d'exactitude r aussi grand que possible.

$$I_n(p) = \int_a^b p(x)dx \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n+1}$$

Pour simplicité on va se placer dans la suite dans l'intervalle $[a, b]$. On observe qu'on peut toujours passer de n'importe quel intervalle $[a, b]$ sur $[-1, 1]$ grâce à la bijection

$$\begin{aligned} \varphi \ [-1, 1] &\to [a, b] \\ s &\mapsto x = \varphi(s) = \frac{b-a}{2}s + \frac{b+a}{2} \end{aligned}$$

Alors

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^1 f(x(s))ds \tag{1-1}$$

où on a effectué le changement de variable (1-1) Dans la suite, on note s toute variable dans l'intervalle $[-1, 1]$, et on indique par x celles qui sont dans $[a, b]$. Donc, si l'on a calculé les noeuds x_i et les poids α_i d'une formule de quadrature sur l'intervalle $[a, b]$, on obtient les noeuds s_i et les poids $\widehat{\alpha}_i$ correspondants pour la formule sur l'intervalle $[-1, 1]$ par la relation:

$$x_i = x_i(s_i) = \frac{b-a}{2}s_i + \frac{b+a}{2} \quad \text{et} \quad \alpha_i = \frac{(b-a)}{2}\widehat{\alpha}_i$$

Définition 1.3. *Le polynôme de Legendre de degré n*

est défini par

$$L_n(s) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{ds^n}(s^2-1)^n \tag{1-2}$$

Ainsi nous avons, si $s \in \mathbb{R}$

$$L_0(s) = 1, \quad L_1(s) = s, \quad L_2(s) = \frac{3s^2-1}{2},$$

Théorème 1.2. *Les polynômes de Legendre $L_0, L_1, L_2, ...$ vérifient les propriétés suivantes:*

- *i/ $L_k \in \mathbb{P}_k$ et $L_0, L_1, ..., L_n$ forment une base de $\mathbb{P}_n$.*
- *ii/ Si $i \neq j$ alors $\displaystyle\int_{-1}^{+1} L_i(s)L_j(s)ds = 0$ (propriété d'orthogonalité) .*
- *iii/ L_n a exactement n zéros réels distincts tous compris dans l'intervalle ouvert $]-1,+1[$. Ces zéros sont appelés les points de Gauss.*
- *iv/* $\begin{cases} L_0(s) = 1 \;\; L_1(s) = s \\ L_{k+1}(s) \quad = \dfrac{2k+1}{k+1} s L_k(s) - \dfrac{k}{k+1} L_{k-1}(s) \;\; k = 1, .. \end{cases}$

Preuve. voir T.D.

Définition 1.4. *Nous dirons que la formule de quadrature*

$$I_{G,n}(g) = \sum_{j=0}^{n} \widehat{\alpha}_j g(s_j) \quad où \quad g : [-1, 1] \to \mathbb{R}$$

est la formule de Gauss-Legendre à $n+1$ points si

- *i/ Les points d'intégration $s_0 < s_1 < s_2 < .... < s_n$ sont les $n+1$ zéros du polynôme de Legendre L_{n+1} c'est à dire les $n+1$ points de Gauss.*
- *ii/ Les poids $\widehat{\alpha}_0, ..., \widehat{\alpha}_n$ sont définis par:*

  $$\widehat{\alpha}_j = \int_{-1}^{+1} l_j(s)ds, \quad j = 0, 1, \ldots, n \quad où \quad l_0, ..., l_n$$

  est la base de Lagrange de $\mathbb{P}_n$ associée aux $n+1$ points de Gauss.

Théorème 1.3. *La formule de Gauss Legendre à $n+1$ points $(n \in \mathbb{N}^*)$ est exacte pour des polynômes de degré $r = 2n+1$.*

$$I_{G,n}(p) = \int_{-1}^{1} p(s)ds \quad \forall p \in \mathbb{P}_{2n+1}$$

Preuve. (voir T.D).

Exemple 1.1. *Formule de Gauss-Legendre à un seul point.*
On a $L_1(s) = s$ *et donc le seul zéro de* L_1 *est donné par* $s_0 = 0$. *Nous retrouvons dans ce cas-là la formule du rectangle qui est d'ordre* h^2

Exemple 1.2. *Formule de Gauss-Legendre àdeux points.*

Nous avons $L_2(s) = \frac{1}{2}(3s^2 - 1)$ *et donc les deux zéros de* $L_2(t)$ *sont donnés par* $s_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ *et* $s_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$.
La base de Lagrange $l_0,\ l_1$ de $\mathbb{P}_1$ associée aux points $s_0,\ s_1$ est définie par

$$l_0(s) = \frac{1 - s\sqrt{3}}{2} \ \ et \ \ l_1(s) = \frac{s\sqrt{3} + 1}{2}$$

et ainsi

$$\alpha_1 = \int_{-1}^{+1} l_0(t)dt = 1 \ \text{ et } \ \alpha_2 = \int_{-1}^{+1} l_1(t)dt = 1.$$

La formule de Gauss-Legendre à deux points s'écrit donc

$$J(g) = g\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + g\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right),$$

et la formule composite sur m intervalles I_k associée est donnée par:

$$I_{G,m}(f) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{x_{k+1} - x_k}{2}$$

$$\left\{ f(x_k + \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{2}}(x_{k+1} - x_k)) + f(x_k + \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}}(x_{k+1} - x_k)) \right\}$$

Si $f \in C^4\left([a,b]\,;\mathbb{R}\right)$, les théorèmes 1.3 (n=1 le degré d'exactitude est 2n+1= 3)et l'ordre $q = 3 + 2$ et pour la formule composite $q - 1 = 4$ nous assurent l'existence d'une constante C, indépendante du choix des points x_i, telle que:

$$\left| \int_a^b f(x)dx - I_{G,m}(f) \right| \leq CH^4 \quad \text{où} \quad H = \frac{b-a}{m}$$

La fonction de Gauss-Legendre à deux points converge donc au même ordre que la fonction de Simpson.$\blacksquare$

2 Dérivation numérique

2-1 Dérivées numériques d'ordre 1 et erreur de troncature.

Soit $f \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$. Si $x_0 \in \mathbb{R}$, alors

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \lim_{h\to 0}\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} \qquad (2\text{-}3)\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{f(x_0)-f(x_0-h)}{h}\\
&= \lim_{h\to 0}\frac{f(x_0+\frac{h}{2})-f(x_0-\frac{h}{2})}{h}
\end{aligned}
$$

une idée pour calculer numériquement $f'(x_0)$ consiste donc à se donner une valeur $h > 0$ assez petite et à calculer

$$
\frac{\triangle_h f(x_0)}{h} \quad \text{ou} \quad \frac{\nabla_h f(x_0)}{h} \quad \text{ou} \quad \frac{\delta_h f(x_0)}{h} \qquad (2\text{-}4)
$$

après avoir défini les quantités Lorsque $h > 0$ est donné,

$$
\begin{aligned}
\triangle_h :\ C(\mathbb{R},\mathbb{R}) &\to C(\mathbb{R},\mathbb{R})\\
f &\mapsto \triangle_h f(x) = f(x+h)-f(x).
\end{aligned}
$$

Des considérations semblables sont valables pour les opérateurs ∇_h et δ_h.

Définition 2.1. *Lorsque* $h > 0$ *est donné, les opérateurs* $\triangle_h$, ∇_h *et* δ_h *sont appelés opérateur de différence première respectivement progressive, rétrograde et centrée.*

Nous vérifions maintenant le résultat suivant:

Théorème 2.1. *Les opérateurs de différence première $\triangle_h$, ∇_h et δ_h sont linéaires.*

Preuve. Il est facil de vérifier que

$$\triangle_h(\alpha f+\beta g)(x) \;=\; \alpha(\triangle_h f)(x)+\beta(\triangle_h g)$$
$$\forall\,(f,g)\;\in\;[C(\mathbb{R},\mathbb{R})]^2;\;\;\forall\,(\alpha,\beta)\in\mathbb{R}^2;\;\;\forall\;\;x\in\mathbb{R}$$

Le même raisonnement s'applique aux opérateurs ∇_h et δ_h.

• Si $f\in C^2(\mathbb{R};\mathbb{R})$, son développement limité au $2^{ème}$ ordre au voisinage du point x_0 s'écrit:

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{1}{2}f''(\xi)h^2 \quad (2\text{-}5)$$

où $\xi\in[x_0,x_0+h]$.
nous obtenons:

$$\left|f'(x_0)-\frac{\triangle_h f(x_0)}{h}\right|=\frac{1}{2}\left|f''(\xi)\right|h \qquad (2\text{-}6)$$

Nous pouvons donc énoncer le résultat suivant:

Théorème 2.2. Si $f\in C^2(\mathbb{R},\mathbb{R})$, si $x_0\in\mathbb{R}$ est fixé et si $h_0>0$ donné, il existe une constante C telle que

$$\left|f'(x_0)-\frac{\triangle_h f(x_0)}{h}\right|\le Ch,\quad\forall\;h\le h_0 \qquad (2\text{-}7)$$

Preuve. Posons $C = \frac{1}{2} \max_{x_0 \leq x \leq x_0 + h_0} |f''(x)|$.
De la relation (2.) nous obtenons bien l'inégalité (2.) car si $h \leq h_0$ alors $\xi \in [x_0, x_0 + h_0]$ et donc $\frac{1}{2} |f''(\xi)| \leq C$.
Nous obtenons de la même façon un résultat semblable si $\triangle_h f(x_0)$ est remplacé par $\nabla_h f(x_0)$.
Par contre, si nous approchons $f'(x_0)$ par $\frac{\delta_h f(x_0)}{h}$, nous obtenons une meilleure approximation. En effet, supposons $f \in C^3(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ et considérons la formule de Taylor à l'ordre 3 de f au voisinage de $x_0 + \frac{h}{2}$ et $x_0 - \frac{h}{2}$:

$$f(x_0 + \frac{h}{2}) = f(x_0) + f'(x_0)\frac{h}{2} + \frac{f''(x_0)}{2!}(\frac{h}{2})^2 + \frac{f^3(\xi)}{3!}(\frac{h}{2})^3 \quad (2\text{-}8)$$

$$f(x_0 - \frac{h}{2}) = f(x_0) - f'(x_0)\frac{h}{2} + \frac{f''(x_0)}{2!}\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \frac{f^{(3)}(\eta)}{3!}\left(\frac{h}{2}\right)^3 (2$$

où $\xi \in \left[x_0, x_0 + \frac{h}{2}\right]$ et $\eta \in \left[x_0 - \frac{h}{2}, x_0\right]$.
En soustrayant (2.9) à (2.8) et en utilisant la relation (2.), nous avons:

$$\left| f'(x_0) - \frac{\delta_h f(x_0)}{h} \right| = \left| \frac{f^{(3)}(\xi) + f^{(3)}(\eta)}{6} \right| \frac{h^2}{8} \leq \frac{\left|f^{(3)}(\eta)\right| + \left|f^{(3)}(\right.}{2}$$

Si $h_0 > 0$ fixé et si nous définissons

$$C = \frac{1}{24} \max_{x_0 - \frac{h_0}{2} \leq x \leq x_0 + \frac{h_0}{2}} \left| f^{(3)}(x) \right|,$$

nous déduisons à partir de (2.10) le résultat suivant:

Théorème 2.3. Si $f \in C^3(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, si $x_0 \in \mathbb{R}$ est fixé et si $h_0 \in \mathbb{R}_+^*$ donné, il existe une constante C telle que

$$\left| f'(x_0) - \frac{\delta_h f(x_0)}{h} \right| \leq C h^2, \quad \forall\, h \leq h_0 \quad \text{(2-11)}$$

Les théorèmes 2.2 et 2.3 nous assurent que si f est assez régulière, les quantités $\frac{\triangle_h f(x_0)}{h}$ et $\frac{\delta_h f(x_0)}{h}$ convergent vers $f'(x_0)$ lorsque $h \to 0$. Dans le 1^{er} cas, la convergence est d'ordre h, le $2^{ème}$cas, la convergence est d'ordre h^2.

Définition 2.2. On dit que $\frac{\triangle_h f(x_0)}{h}$ et $\frac{\nabla_h f(x_0)}{h}$ sont des formules de différences finies progressive et rétrograde pour l'approximation de $f'(x_0)$, les différences

$$\left| f'(x_0) - \frac{\triangle_h f(x_0)}{h} \right| \quad \text{et} \quad \left| f'(x_0) - \frac{\nabla_h f(x_0)}{h} \right|$$

sont appelées erreur de troncature. Elles sont d'ordre h et on dit que les formules de différences finies sont consistantes à l'ordre 1 en h.

De même la formule de différences finies centrées $\frac{\delta_h f(x_0)}{h}$ pour l'approximation de $f'(x_0)$ est consistante à l'ordre 2 en h car l'erreur de troncature

$$\left| f'(x_0) - \frac{\delta_h f(x_0)}{h} \right|$$

est d'ordre h^2. Elle est ainsi plus précise que les formules de différences finies progressive et rétrograde.

2-2 Dérivées numériques d'ordre supérieur

Soit $m \in \mathbb{N}^*$, on définit récursivement:

$$\begin{aligned} \triangle_h^m f &= \triangle_h(\triangle_h^{m-1} f), && (2\text{-}12) \\ \nabla_h^m f &= \nabla_h(\nabla_h^{m-1} f), && (2\text{-}13) \\ \delta_h^m f &= \delta_h(\delta_h^{m-1} f). && (2\text{-}14) \end{aligned}$$

Ainsi par exemple

$$\begin{aligned} \delta_h^2 f(x) &= \delta_h(\delta_h f(x) = \delta_h(f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})) && (2\text{-}15) \\ &= \delta_h f(x+\frac{h}{2}) - \delta_h f(x-\frac{h}{2}) \\ &= f(x+h) - f(x) - \left[f(x-\frac{h}{2}+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2}-\frac{h}{2}) \right] \\ &= f(x+h) - 2f(x) + f(x-h) \end{aligned}$$

De façon similaire à ce qui a été fait dans le cas où $m = 1$, nous vérifions que les opérateurs $\triangle_h^m$, ∇_h^m et δ_h^m sont linéaires.
Il est facile de démontrer que si f est une fonction assez régulière ($f \in C^{m+1}$ si on prend des différences progressives ou rétrograde ou $f \in C^{m+2}$ si on prend des différences centrées) et si $x_0 \in \mathbb{R}$ est donné, alors

$$\frac{\triangle_h^m f(x_0)}{h^m}, \quad \frac{\nabla_h^m f(x_0)}{h^m}, \quad \frac{\delta_h^m f(x_0)}{h^m}$$

sont des approximations de $f^m(x_0) = \frac{d^m}{dx^m} f(x_0)$, d'ordre h, h et h^2 respectivement lorsque $h \to 0$.
Nous pouvons ainsi énoncer les résultats suivants, qui généralisent les théorèmes 2.2 et 2.3.

Théorème 2.4. *Si $m \in \mathbb{N}^*$, si $f \in C^{m+1}(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, si $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h_0 > 0$ sont des nombres donnés, alors il existe une constante C telle que*

$$\left| f^{(m)}(x_0) - \frac{\triangle_h^m f(x_0)}{h^m} \right| \leq Ch \quad \forall \ h \leq h_0, \tag{2-16}$$

$$\left| f^{(m)}(x_0) - \frac{\nabla_h^m f(x_0)}{h^m} \right| \leq Ch \quad \forall \ h \leq h_0. \tag{2-17}$$

Théorème 2.5. Si $m \in \mathbb{N}^*$, si $f \in C^{m+2}(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, si $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h_0 > 0$ sont des nombres donnés, alors il existe une constante C telle que:

$$\left| f^{(m)}(x_0) - \frac{\delta_h^m f(x_0)}{h^m} \right| \leq Ch^2 \quad \forall \quad h \leq h_0 \quad \text{(2-18)}$$

Les problèmes de diffusions d'espèces, de déformation élastiques, de propagations d'ondes, d'écoulements de fluides, etc. font intervenir des dérivées $2^{ième}$ ou $4^{ième}$. Ainsi, les formules aux différences finies centrées pour l'approximation de $f''(x_0)$ $(m = 2)$ et $f^{(4)}(x_0)$ $(m = 4)$ sont très souvent utilisées par les ingénieurs et s'écrivent:

$$f''(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} \quad \text{(2-19)}$$

$$f^{(4)}(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + 2h) - 4f(x_0 + h) + 6f(x_0) - 4f(x_0 - h) + \ldots}{h^4} \quad \text{(2-20)}$$

2-3 Dérivées numériques et interpolation

Soit $f \in C(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $x_0 \in \mathbb{R}$ et $h > 0$ assez petit.
Considérons les points $x_j = x_0 + jh$ avec $j = 0, 1, 2, ..$ si $m \in \mathbb{N}^*$, il est possible de construire le polynôme de Newton $P_m(x)$ tel que:

$$P_m(x) = f(x_0) + \frac{\triangle_h f(x_0)}{h}(x - x_0) + ... + \frac{\triangle_h^m f(x_0)}{m! h^m}(x - x_0)(x - x_1) \quad \text{(2-21)}$$

P_m est un polynôme de degré m et nous obtenons $P_m(x_0) = f(x_0)$,

$$P_m(x_1) = f(x_0) + \frac{\triangle_h f(x_0)}{h}(x_1 - x_0) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0}{h}$$

$$\begin{aligned} P_m(x_2) &= f(x_0) + \frac{\triangle_h f(x_0)}{h}(x_2 - x_0) + \frac{\triangle_h^2 f(x_0)}{2h^2}(x_2 - x_0)(x_2 \\ &= f(x_0) + \triangle_h f(x_0).2 + \triangle_h^2 f(x_0) \\ &= f(x_0) + 2(f(x_1) - f(x_0)) + (f(x_2) - 2f(x_1)) + f(x \end{aligned}$$

En fait, nous pouvons montrer que $P_m(x_j) = f(x_j), \quad j = 0, 1, 2, ..., m$ et puisque P_m est un polynôme de degré m, alors P_m est l'unique polynôme de degré m qui interpole f dans les $(m+1)$ points $x_0, x_1, x_2, ..., x_m$ (chap.1). Il est facile de voir que

$$\frac{d^m}{dx^m} P_m(x) = \frac{\triangle_h^m f(x_0)}{h^m}$$

Nous avons ainsi partiellement montré le résultat suivant:

Théorème 2.6. Si p_m le polynôme de degré m qui interpole f dans les points $x_j = x_0 + jh$ avec $j = 0, 1, 2, ..., m$, alors on a:

$$p_m(x) = f(x_0) + \frac{\triangle_h f(x_0)}{h}(x - x_0) + ... + \frac{\triangle_h^m f(x_0)}{m! h^m}(x - x_0)(x - x_1 \tag{2-22}$$

et
$$\frac{d^m}{dx^m} p_m(x_0) = \frac{\triangle_h^m f(x_0)}{h^m}$$
Remarque 2.1. Si $f \in C^{m+1}(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, nous pouvons utiliser le théorème 1.1 pour établir l'erreur suivante entre f et p_m :

$$\max_{x_0 \le x \le x_0+mh} |f(x) - p_m(x)| \le \frac{1}{2(m+1)} h^{m+1} \max_{x_0 \le x \le x_0+mh} \left| f^{(m+1)}(\right.$$

Remarquer l'analogie entre le polynôme de Newton pour P_m (2.23) et le polynôme obtenu par développement de Taylor de f autour de $x = x_0$.

Remarque 2.2. *Des résultats semblables à ceux énoncés dans le théorème 2.6 sont aussi valables pour les opérateurs ∇_h^m et δ_h^m. Par exemple il facile de montrer que si p_2 est le polynôme de degré 2 qui interpole la fonction f en les points $x_0 - h$, x_0 et $x_0 + h$, alors*
$$\frac{d^2}{dx^2} p_2(x_0) = \frac{\delta_h^2 f(x_0)}{h^2} = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}$$
D'autre part on sait que $f(x) = P_n(x) + E(x)$. On peut approcher la dérivée en utilisant le polynôme d'interpolation de Lagrange ou Newton.

A priori $f^{(p)}(x) = P_n^{(p)}(x) + E^{(p)}(x)$ où

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \varphi_i(x) f(x_i) \Rightarrow f^{(p)}(x) = \sum_{i=0}^{n} \varphi_i^{(p)}(x) f(x_i) + E^{(p)}(x)$$

Pour pouvoir dire que $P_n^{(p)}(x)$ est une bonne approximation de $f^{(p)}(x)$ il faut que $E(x)$ soit p fois dérivable et cette p dérivée soit negligeable devant $P_n^{(p)}(x)$. Ce qui nous impose l'étude de $E(x)$.

2-4 Etude de l'erreur de dérivation

Commençons par étudier $E'(x) = f'(x) - P'(x)$
Si f est $(n+1)$ fois continuement dérivable sur $]a, b[$ nous savons que pour tout $x \in [a, b]$ $\exists\ \xi_x \in [a, b]$ tel que:

$$E(x) = \frac{1}{(n+1)!}\pi(x)f^{(n+1)}(\xi_x) \text{ où } \pi(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

On peut donc écrire $E(x) = \pi(x)g(x)$ avec $g(x) = \frac{1}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi_x)$.
Une dérivation formelle, nous permet d'avoir: $E'(x) = \pi'(x)g(x) + \pi(x)g'(x)$
Le point pour lequel on cherche une approximation de f' peut être:

$*$ un point x_i $i = 1, \ldots, n+1$

$*$ un point différent de x_i $\forall i = 1, \ldots, n+1$

a) si $x = x_i$ alors $E'(x_i) = \pi'(x_i)g(x_i)$ avec

$$\pi'(x_i) = \lim_{x \to x_i} \frac{\pi(x) - \pi(x_i)}{x - x_i} = \lim_{x \to x_i} \frac{\pi(x)}{x - x_i} = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n}(x_i - x_j)$$

et

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

b) si $x \neq x_i \quad \forall i = 1, \ldots, n+1$ nous devons connaitre une estimation de $g'(x)$, il faut donc supposer que f est $(n+2)$ fois dérivable $\forall x \in [a, b]$, $\exists \delta_x$ tel que $g'(x) = \frac{1}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\delta_x)$ alors

$$E'(x) = \frac{1}{(n+1)!}\pi(x) f^{(n+1)}(\xi_x) + \frac{1}{(n+2)!}\pi(x) f^{(n+2)}(\delta_x).$$

Plus généralement

$$E(x) = \pi(x) g(x) \;\Rightarrow\; E^{(p)}(x) = \sum_{m=0}^{p} C_p^m \pi^{(p-m)}(x)\, g^{(m)}(x).$$

En utilisant la formule du polynôme d'interpolation de Newton et les différences divisées, on obtient:

$$\begin{aligned} E(x) &= y(x) - P(x) = (x - x_0)(x - x_1) \ldots (x - x_n)\, y(x, x_0, \\ &= \pi(x)\, y(x, x_0, x_1, \ldots, x_n) \end{aligned}$$

On a si $y(x)$ est de classe C^1

$$E'(x) = \pi'(x)\, y(x, x_0, x_1, \ldots, x_n) + \pi(x) \frac{d}{dx} y(x, x_0, x_1, \ldots, x_n)$$

Or

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} y(x, x_0, x_1, \ldots, x_n) &= \lim_{h \to 0} \frac{y(x+h, x_0, x_1, \ldots, x_n) - y(x, x_0}{h} \\ &= \lim_{h \to 0} y(x+h, x, x_0, x_1, \ldots, x_n) = y(x, \end{aligned}$$

d'où

$$E'(x) = \pi'(x) y(x, x_0, x_1, \ldots, x_n) + \pi(x) y(x, x, x_0, x_1, \ldots, x_n)$$

Or, on a

$$y(x, x_0, x_1, \dots, x_n) = \frac{y^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} \quad c_x \in [a, b]$$

Donc

$$E'(x) = \pi'(x)\frac{y^{(n+1)}(c_x)}{(n+1)!} + \pi(x)\frac{y^{(n+2)}(\alpha_x)}{(n+2)!} \quad c_x, \alpha_x \in [a, b]$$

si $y(x)$ est $(n+2)$ fois continuement dérivable.