

Dérivation numérique. Une curieuse application de la méthode de Simpson : la dérivée de Lanczos

Daniel Reisz^(*)

Résumé : Les méthodes de dérivation numérique sont par essence moins stables que celles de l'intégration numérique. On passe ici en revue quelques aspects de la dérivation numérique. Puis, s'appuyant sur la méthode de Simpson d'intégration numérique, on exhibe une curiosité : une procédure de dérivation numérique s'appuyant sur une intégrale, la dérivée de LANCZOS. Mais l'espoir d'avoir ainsi une approximation plus stable sera vain...

1. Quelques aspects de la dérivation numérique.

Plusieurs raisons expliquent que, dans la littérature spécialisée, on est souvent moins prolixe sur la dérivation numérique que sur l'intégration numérique. En particulier :

- l'intégration numérique est plus « utile » et d'utilisation plus fréquente ;
- souvent la fonction f admet une fonction dérivée f' et on est alors en présence d'un classique calcul de valeur d'une fonction ;
- à l'opposé, on se trouve souvent devant des situations plus difficiles à maîtriser du point de vue numérique.

Pour expliciter ce dernier argument, il faut remarquer que l'intégration numérique est en général un processus plus stable, plus fiable, que la dérivation numérique. Ainsi, soit sur un intervalle $I = [a;b]$, ($a < b$), deux

^(*) Vincelles (89).

fonctions dérivables : une fonction f et une fonction *perturbatrice* ε dont l'amplitude est faible autour de 0, c'est à dire pour laquelle il existe un nombre $\alpha > 0$ petit tel que :

$$\forall x \in I : |\varepsilon(x)| < \alpha.$$

Il est alors facile de se convaincre que $\int_a^b f(x) dx$ et $\int_a^b [f(x) + \varepsilon(x)] dx$ auront des valeurs voisines. On a d'ailleurs la majoration suivante :

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \int_a^b [f(x) + \varepsilon(x)] dx \right| < \alpha(b-a).$$

Or il n'y a aucune raison de penser que pour une valeur c de I les deux quantités $f'(c)$ et $f'(c) + \varepsilon'(c)$ aient une quelconque proximité.

On peut ainsi dire que, contrairement à la dérivation numérique, l'intégration numérique a un effet de lissage des aspérités, ou encore qu'elle est moins sensible aux petites perturbations.

En particulier, il faut être d'une extrême prudence lorsque f est approchée sur I par une fonction ϕ avec une précision donnée, c'est-à-dire qu'il existe $\alpha > 0$ tel que

$$\forall x \in I : |f(x) - \phi(x)| < \alpha.$$

Il ne faut pas s'attendre à une majoration analogue entre f' et ϕ' . Même dans les bons cas, la qualité de la majoration se dégrade souvent, comme le montrent les exemples suivants :

Exemples

1°) Soit, sur $[-0,1;0,1]$, la fonction exponentielle $f(x) = e^x$ et son approximation polynomiale $\phi(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2}$. Alors $f'(x) = e^x$ et $\phi'(x) = 1 + x$ et il est facile de vérifier que, sur $[-0,1;0,1]$

$$|f(x) - \phi(x)| < 2 \times 10^{-4}$$

alors qu'on n'a plus que

$$|f'(x) - \phi'(x)| < 5 \times 10^{-3}.$$

À l'opposé, remarquons d'ailleurs que

$$\left| \int_a^b [f(x) - \phi(x)] dx \right| < 2 \times 10^{-7}.$$

2°) Soit $f(x) = \sqrt{x}$ en $c = 10$ et perturbons légèrement cette fonction par $\varepsilon(x) = 0,1 \sin(x + 2\sin 15x)$,

fonction très irrégulière, mais qui vérifie à l'évidence $|e(x)| \leq 0,1$, pour comparer les stabilités respectives de la dérivation et de l'intégration par rapport à la perturbation.

a) Dérivation.

Soit

$$g(x) = \sqrt{x} + e(x).$$

Alors

$$g'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}} + 0,1(30\cos 15x + 1)\cos(x + 2\sin 5x),$$

$$g'(10) = 0,158 - 1,443,$$

donc une perturbation très importante.

b) Intégration.

Prenons deux intervalles d'intégration et évaluons $\left| \int_a^b e(x) dx \right|$:

$$\left| \int_{0,9}^{1,1} e(x) dx \right| = 0,006,$$

$$\left| \int_1^{1,008} e(x) dx \right| = 0,008.$$

c'est-à-dire une perturbation très faible.

Regardons à présent de plus près le problème de la dérivation numérique, c'est-à-dire, pour une fonction définie sur I, la détermination de la valeur numérique de $f'(c)$, $c \in I$. C'est un problème à deux étages :

- f est-elle dérivable en c ?

- si oui, quelle est la valeur numérique de f' en c ?

Il ne faudrait d'ailleurs pas croire que ces deux questions se traitent forcément dans cet ordre logique. Il arrive qu'on s'assure de la dérivabilité en s'assurant de l'existence de

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c)}{h}$$

à travers l'obtention de sa valeur numérique.

Questions subsidiaires, propres au calcul numérique : faute d'avoir la valeur exacte de $f'(c)$, comment obtenir une valeur approchée et quelle est la qualité de cette approximation ?

On peut distinguer deux grandes directions dans l'approche de ce problème : la façon dont la fonction f est connue et les performances des algorithmes de calcul. Comme souvent en calcul numérique, il n'y a pas de solution universelle, d'algorithme meilleur que tous les autres. Ces derniers sont encore plus sensibles à chacune des situations que dans l'intégration numérique.

Le cas le plus simple (encore que...) est celui où la fonction f' existe et s'exprime au voisinage de c comme une combinaison de fonctions « élémentaires ». Alors le calcul de $f'(c)$ est celui d'une valeur de fonction, ce qui peut donner une valeur numérique exacte :

Exemple

Soit la fonction définie pour tout réel positif par $f(x) = \sqrt{x}$.

Alors $f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}}$ et $f'(4) = 0,25$.

ou encore une valeur approchée :

Exemple

Soit la fonction définie par $f(x) = e^x$.

Alors $f'(x) = e^x$, $f'(4) = 54,60$ à 10^{-2} près.

La fonction f peut aussi être connue à travers une fonction d'approximation ϕ sur l'intervalle I (par exemple à travers un polynôme d'approximation). La maîtrise de $\|f - \phi\|$ n'implique d'aucune manière celle de $\|f' - \phi'\|$ et, lorsque la maîtrise de cette dernière quantité est possible, on s'aperçoit que l'approximation est souvent de moindre qualité, comme on l'a vu pour la fonction exponentielle.

La fonction f peut être connue par un tableau de valeurs ou par sa représentation graphique. C'est souvent le cas dans le contexte des sciences expérimentales ou dans un environnement technologique. On revient alors directement à la définition du nombre dérivé

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c)}{h}$$

Exemple

Soit f une fonction dont nous ne connaissons qu'un tableau de valeurs, dont voici un extrait :

x	$f(x)$
0	4,21
0,1	3,83
0,2	3,89
0,3	3,93

Valeur approchée de $f'(0,1)$: $\frac{3,09-3,03}{0,1} = 0,6$.

Mais le recours à la définition du nombre dérivé peut aussi être, à qualité égale, la solution la moins coûteuse lorsque f' est une expression très lourde.

Exemples

1°) Soit la fonction f définie pour $x > 0$ par $f(x) = \sqrt{x + \sqrt{x + \sqrt{x}}}$ dont voici la fonction dérivée :

$$f'(x) = \frac{1 + 2\sqrt{x} + 4\sqrt{x + \sqrt{x}} \sqrt{x}}{4\sqrt{x}\sqrt{x + \sqrt{x}}\sqrt{x + \sqrt{x + \sqrt{x}}}$$

Si nous avons besoin de $f'(3,14)$, nous pouvons remplacer x dans l'expression de $f'(x)$... ou se contenter de

$$\frac{f(3,15) - f(3,14)}{0,01} = 0,276$$

2°) Soit $f(x) = \arcsin\left(\frac{x}{x^2 + x + 1}\right)$ qui mène à

$$f'(x) = \frac{1-x^2}{(x^2+x+1)\sqrt{x^4+2x^3+2x^2+2x+1}}$$

Là encore on peut préférer l'utilisation directe de $\frac{f(c+h) - f(c)}{h}$.

Remarquons que si $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c)}{h}$ existe, elle est de la forme 0/0, c'est-à-dire une forme très fragile face au calcul numérique : une petite quantité au numérateur dont l'erreur d'arrondi va être amplifiée par la division par un très petit dénominateur. Ce n'est donc pas forcément les plus petites valeurs de h qui donneront les meilleurs résultats.

Exemple

Soit $f(x) = \sqrt{x}$ et $c = 10$. La valeur exacte de $f'(10)$ est

$$\frac{1}{2\sqrt{10}} = 0,15811388300$$

Avec $\frac{f(c+h) - f(c)}{h}$, on obtient

h	$f'(10)$
10^{-6}	0,158114
10^{-8}	0,1582
10^{-10}	0

Remarque : Il n'y a pas de recette universelle pour choisir le « meilleur h » : trop grand le résultat sera grossier, trop petit il ne sera plus fiable.

Les difficultés qui peuvent survenir avec l'utilisation numérique de $\frac{f(c+h) - f(c)}{h}$ qui est un taux « latéral » (on privilégie les valeurs à droite de c) amènent à introduire le taux *central* ou *symétrique* (on parlera, par abus de langage, de dérivée symétrique) :

$$\frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$$

La figure 1 permet de se convaincre de visu que pour des fonctions bien « régulières », la direction de la droite (NP), liée à la dérivée symétrique, approche mieux la direction de la tangente en M que les directions des droites (MN et (MP)). Mais chacun peut aussi se convaincre que l'on peut « tordre » la courbe et donc la fonction f pour que ce soit l'une quelconque des droites (MN) ou (MP) qui ait la meilleure direction (au sens de l'approximation de la direction de la tangente).

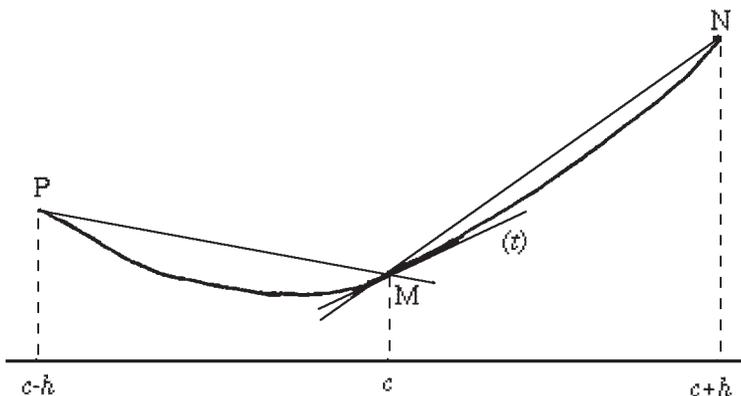


Figure 1

Une autre observation « convaincante » : $\frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$ est la moyenne arithmétique de $\frac{f(c+h) - f(c)}{h}$ et de $\frac{f(c) - f(c-h)}{h}$. Lorsque la courbe est bien « régulière » et garde en particulier la même concavité sur $[c-h; c+h]$, cette moyenne d'une approximation par excès et d'une approximation par défaut de $f'(c)$ est « souvent » meilleure que les deux approximations initiales. Mais, de ce point de vue aussi, on peut voir comment « tordre » la situation jusqu'à obtenir des contre-exemples.

Précisons maintenant les choses par le calcul. On obtient facilement la majoration suivante (itération du théorème des accroissements finis par exemple) :

$$\left| f(c+h) - f(c) - \left[f'(c)h + f''(c) \frac{h^2}{2} \right] \right| \leq \frac{M_3^+ h^3}{6}$$

où M_3^+ est le maximum de la dérivée troisième de f sur $[c; c+h]$.

En changeant h en $-h$, on a de même

$$\left| f(c-h) - f(c) - \left[-f'(c)h + f''(c) \frac{h^2}{2} \right] \right| \leq \frac{M_3^- h^3}{6}$$

où M_3^- est le maximum de la dérivée troisième de f sur $[c-h; c]$.

Soit $M = \text{Sup}(M_3^+, M_3^-)$. On peut alors écrire

$$\left| f(c+h) - f(c-h) - 2f'(c)h \right| \leq \frac{Mh^3}{3}$$

ou encore

$$\left| \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} - f'(c) \right| \leq \frac{Mh^2}{3}$$

Exemple

Soit à calculer la dérivée de $f(x) = x^3$ pour $c = 3$ avec $h = 0,01$. Valeur exacte de $f'(3) : 27$.

$$\frac{(3,01)^3 - 3^3}{0,01} = 27,0901, \quad \frac{3^3 - (2,99)^3}{0,01} = 26,9101,$$

$$\frac{(3,01)^3 - (2,99)^3}{0,02} = 27,0001.$$

L'approximation symétrique est la meilleure et cela d'autant plus que la division par $2h$ est moins dangereuse que celle par h .

Mais attention à bien interpréter l'analyse précédente. Elle signifie que « lorsque h devient de plus en plus petit » l'approximation symétrique finira par être meilleure que chacune des approximations latérales. Cela ne veut pas dire (cf. ce qui a été dit pour la figure ci-dessus) que, pour un h donné, on a l'assurance d'avoir une meilleure approximation avec le taux symétrique !

À ce sujet il est intéressant de renvoyer à un article de Jean-Luc GASSER « Mathématiques et Sciences Physiques : problèmes soulevés par le sujet du bac de physique, série S, 1996 » [7] qui raconte les avatars de correction d'un problème proposé en série S en 1996. Un mouvement rectiligne était enregistré par chronophotographie, permettant ainsi de connaître les positions $x(0), x(1), x(2), \dots, x(n-1), x(n), x(n+1), \dots$ aux instants $0, 1, 2, \dots, n-1, n, n+1, \dots$. On demandait de déterminer avec une bonne approximation, la vitesse à l'instant n .

Le corrigé-type, fourni aux correcteurs, proposait $\frac{x(n+1) - x(n-1)}{2}$ et la majorité des correcteurs ont sanctionné les nombreux candidats qui ont répondu $\frac{x(n+1) - x(n)}{1}$ ou encore $\frac{x(n) - x(n-1)}{1}$

L'article cité analyse avec beaucoup de pertinence les implications didactiques de cette affaire où la culture mathématique et la culture physique d'un candidat sont pour le moins mal coordonnées.

Enfin une dernière remarque concernant cette dérivée symétrique : si f est dérivable en c , alors

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} = f'(c),$$

mais l'existence de

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$$

n'implique pas la dérivabilité de f en c .

Exemple

Soit $y = |x|$. Pour $c = 0$,

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} = 0$$

et pourtant la fonction n'est pas dérivable en 0.

Notons d'ailleurs que, si les dérivées à droite et à gauche de c existent, alors $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} = 0$ a pour valeur la moyenne des deux, phénomène qu'on peut comparer au phénomène de Gibbs pour les séries de Fourier aux points de discontinuité de première espèce.

Signalons enfin, en renvoyant le lecteur à la littérature spécialisée (par exemple [3] ou [5]) pour les justifications, que les résultats peuvent encore être nettement améliorés en utilisant le procédé de Richardson qui, en l'occurrence, consiste à remplacer l'approximation $f'_h(c)$ de la dérivée $f'(c)$ obtenue pour la valeur h , par

$$2f'_{h/2}(c) - f'_h(c) \text{ si on a utilisé la forme latérale}$$

ou par

$$1/3 [4f'_{h/2}(c) - f'_h(c)] \text{ si on a utilisé la forme symétrique.}$$

Ce procédé, surtout si on le poursuit, permet de partir d'une valeur de h relativement grande et diminuer ainsi le risque de perdre en précision par amplification d'erreurs d'arrondi.

II. Rappels concernant la méthode de Simpson.

La méthode de Simpson (voir par exemple [3], [4] ou [5]) est un des processus classiques d'intégration numérique. Elle permet d'obtenir, sous certaines conditions de dérivabilité, une approximation de l'intégrale

$$I = \int_a^b f(x) dx.$$

L'idée centrale de cette règle consiste à utiliser sur $[a;b]$ l'arc de parabole défini par les trois points $(a;f(a))$, $(\frac{a+b}{2}; f(\frac{a+b}{2}))$, $(b;f(b))$ comme courbe d'approximation de la courbe représentative de f et d'intégrer sur $[a;b]$ la fonction du second degré correspondante. On obtient :

$$S = \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right].$$

On montre de façon classique (voir par exemple [4] ou [5]) que, sous réserve de l'existence et de la continuité de la dérivée quatrième de f sur $[a;b]$, cette approximation vérifie

$$|I - S| \leq \frac{M(b-a)^5}{2880}$$

où M est le maximum de la dérivée quatrième de f sur $[a;b]$.

Dans ce qui suit, on s'intéresse à l'intervalle centré en $c = \frac{a+b}{2}$ de rayon $h = \frac{b-a}{2}$. Alors, en faisant le changement de variable $t = x - c$, ce qui précède prend la forme suivante

$$I = \int_{-h}^h f(c+t) dt.$$

$$S = \frac{h}{3} [f(c+h) + 4f(c) + f(c-h)].$$

Le changement de variable étant affine, nous gardons la même qualité d'approximation

$$|I - S| \leq \frac{Mh^5}{90},$$

c'est à dire une très bonne approximation pour un h petit.

III. La dérivée de Lanczos.

Considérons la quantité suivante

$$L = \frac{3}{2h^3} \int_{-h}^h t f(c+t) dt$$

et appliquons à l'intégrale la méthode de Simpson :

$$S(L) = \frac{3}{2h^3} \frac{h}{3} [-h^2 f(c-h) + 0 + h^2 f(c-h)] = \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$$

et faisons sommairement le point.

$$S(L) = \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}, \text{ c'est à dire que } S(L) \text{ est à la fois une}$$

approximation de la quantité L et de la dérivée $f'(c)$. En d'autres termes la dérivée $f'(c)$ est approchée par une intégrale ! C'est cette quantité qu'on appelle *dérivée de LANCZOS* de f en c (voir [1] et [2]).

Regardons d'un peu plus près la qualité de cette approximation de $f'(c)$ par L . On a vu précédemment que la formule de Simpson donnait une approximation du 5^e ordre en h . Il en résulte pour la dérivée de Lanczos :

$$L = \frac{3}{2h^3} \int_{-h}^h t f(c+t) dt = \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} + \frac{3}{2h^3} O(h^5)$$

$$= \frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h} + O(h^2)$$

Par ailleurs

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

d'où

$$L = f'(c) + O(h^2).$$

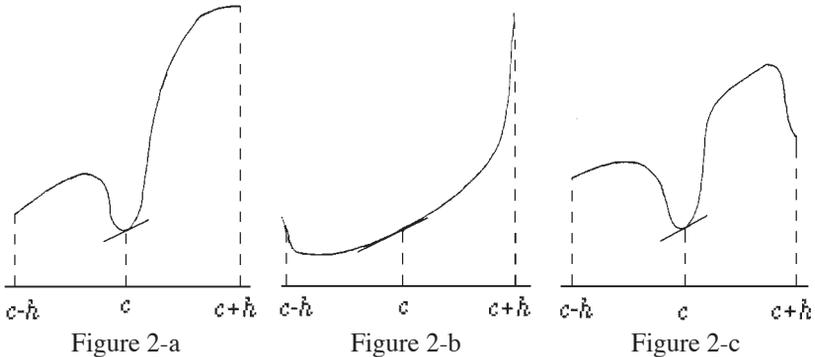
Rappel: La notation de Landau $f = O(h^n)$ signifie que f est dominé par h^n au voisinage de 0, c'est-à-dire qu'il existe deux réels positifs ϵ et k tels que $|h| \leq \epsilon$ implique $|f(h)| \leq k|h|^n$.

On peut donc dire que lorsque h tend vers 0, L et $\frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$ sont des approximations de même qualité de $f'(c)$. Mais une fois de plus, pour un h donné, on ne peut pas prévoir laquelle des deux approximations sera la meilleure et leurs résultats peuvent être sensiblement différents. Cela est évidemment lié à la très grande instabilité potentielle de $f(x)$ au voisinage de c et à deux approches totalement différentes : L est une intégrale qui aura donc tendance à lisser les aspérités, $\frac{f(c+h) - f(c-h)}{2h}$ est par nature très sensible aux valeurs précises de f en $c+h$ et en $c-h$. L'espoir qu'on pouvait avoir une approximation plus stable de $f'(c)$, parce que obtenue par intégration, s'effondre donc !

Exemples

1°) À h égal, les figures de la page suivante parlent d'elles mêmes :

	approximation de Lanczos	approximation symétrique
Figure 2-a	mauvaise	acceptable
Figure 2-b	acceptable	mauvaise
Figure 2-c	mauvaise	mauvaise



2°) Reprenons certains des exemples abordés précédemment et calculons leurs dérivées de Lanczos

a) $f(x) = \sqrt{x}$ pour $c = 10$ et $h = 0,01$

$$f'(10) = 0,158113883 \dots$$

$$\frac{\sqrt{10,01} - \sqrt{10}}{0,01} = 0,15807498$$

$$\frac{\sqrt{10,01} - \sqrt{9,99}}{0,02} = 0,15811398$$

$$\frac{3}{2 \times (0,01)^2} \int_{-0,01}^{0,01} \sqrt{10+r} \, dr = 0,1581158$$

b) Soit $f(x) = x^3$ pour $c = 3$ avec $h = 0,01$. Valeur exacte de $f'(3)$: 27.

$$\frac{(3,01)^3 - 3^3}{0,01} = 27,0901.$$

$$\frac{(3,01)^3 - (2,99)^3}{0,02} = 27,0001.$$

$$\frac{3}{2 \times (0,01)^2} \int_{-0,01}^{0,01} (3+r)^3 \, dr = 27.$$

3°) L'exemple suivant se place dans un contexte plus délicat d'une fonction à fortes oscillations au voisinage de c . Soit la fonction définie pour tout réel non nul par $f(x) = \sin\left(\frac{1}{x}\right)$. Pour c « petit », elle oscillera fortement.

Par ailleurs

$$f'(x) = -\frac{\cos\left(\frac{1}{x}\right)}{x^2}.$$

Prenons $c = 0,1$ et $h = 0,01$. La valeur exacte de la dérivée est $f'(0,1) = 83,907 \dots$

La dérivée symétrique donne 66,052, la dérivée de Lanczos 596,978, soit deux « approximations » totalement exotiques. Et on devine bien que, dans de telles situations, on peut obtenir « n'importe quoi ».

4°) Soit la fonction définie sur $[0;1]$ par

$$f(x) = \frac{\text{Arctan}(\sqrt{x})}{\text{Arctan}(x)}$$

dont la dérivée est le monstre suivant :

$$\frac{\sqrt{1-x^2} \text{Arctan}(x) + 2\sqrt{x}(1+x) \text{Arctan}(\sqrt{x})}{2\sqrt{x}(1+x)\sqrt{1-x^2}(\text{Arctan}(x))^2}$$

Pour $c = 0,8$, la courageuse calculatrice affiche $f'(c) = 3,419\,665$. Avec $h = 0,01$, la dérivée symétrique donne 3,425, la dérivée de Lanczos (via une intégration numérique à la calculatrice) 3,403.

5°) Un dernier exemple avec une fonction classique

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+x+1}}$$

avec

$$f'(x) = \frac{-(2x+1)}{2(x^2+x+1)\sqrt{x^2+x+1}}$$

De toute évidence, $f'(0) = \frac{1}{2}$.

Comparons dérivée symétrique et dérivée de Lanczos pour différentes valeurs de h .

h	dérivée symétrique	dérivée de Lanczos
0,1	-0,496	-0,497
0,01	-0,4999562	-0,49997
0,001	-0,4999995	-0,49998
0,0001	-0,4999999	-0,510

N. B. : L'essentiel des calculs de cet article a été effectué à l'aide d'une T. I. 92.

Bibliographie

- [1] C.W. GROETSCH, *Lanczos' Generalized Derivative*, Amer. Math. Monthly. 105 ; p. 320-326 (1988).
- [2] C. LANCZOS, *Applied Analysis*. Prentice Hall. 1956.
- [3] Y. NOUAZÉ. *Mathématiques et Calculatrices*. Ellipses, 1995.
- [4] J. MARSDEN, A. WEINSTEIN, *Calculus II*. Springer. 1985.
- [5] F.B. HILDENBRAND, *Introduction to Numerical Analysis*. Mc Graw Hill, 1974.
- [6] L. SOLOMON. M.HOCQUEMILLER, *Mathématiques appliquées et calculatrices programmables*. Masson. 1982.
- [7] I.-L. GASSER, *Mathématiques et Sciences Physiques : problèmes soulevés par le sujet de bac de physique, série S, 1998*. Bull. Union Physiciens, N° 807, p. 1435-1454 (1998). Vient de paraître aussi dans REPÈRES-IREM N° 34 (Janvier 1999).

P.S. Au moment de mettre sous presse est paru un excellent article de Luc TROUCHE, *Variations sur la dérivation*, dans le n° 34 (Janvier 1999) de la revue REPÈRES-IREM. Cet article complète et approfondit certains aspects de la dérivation numérique, en particulier ce qui concerne les algorithmes de calcul utilisés par les calculatrices.