MÉTHODES NUMÉRIQUES ET OPTIMISATION

Théorie et pratique
pour l'ingénieur

Jean-Pierre Corriou

Chapitre 1

Interpolation et approximation

1.1 Introduction

L'application effectuée sur ordinateur correspond à un modèle mathématique, en particulier dans les sciences physiques. A supposer que le modèle soit parfait (ce qui n'est jamais le cas), l'erreur principale considérée est l'erreur de calcul, liée à l'utilisation d'une méthode numérique appelée *algorithme* permettant la résolution du problème. Cette erreur est due à l'approximation de notre modèle mathématique par une méthode numérique et est appelée *erreur de troncature*.

Le calcul étant effectué sur ordinateur, un autre type d'erreur intervient, l'*erreur d'arrondi* liée au nombre fini de chiffres utilisé pour la représentation d'un nombre.

Le problème de l'approximation d'une fonction compliquée ou d'un ensemble de données numériques par une autre fonction est appelé approximation et occupe une place importante dans de nombreuses études numériques et d'optimisation.

1.2 Approximation d'une fonction par une autre fonction

Supposons qu'une fonction $f(x)$ ait une forme telle qu'elle soit difficile à obtenir. Dans ce cas, il est nécessaire de l'approximer par une autre fonction $g(x)$ plus facile à obtenir. C'est ainsi que les fonctions $\sin(x)$ ou $\log(x)$ sont approximées par un développement de Taylor d'ordre n , soit un développement limité d'ordre n , c'est-à-dire un polynôme de Taylor de degré n . On obtient ainsi, pour une série de points x_i , les valeurs correspondantes $f(x_i)$ dans une table. L'information sur la fonction $f(x)$ est essentielle; si les valeurs de $f(x_i)$ sont connues avec une certaine précision, la fonction $g(x)$ fournira des approximations de $f(x)$ avec une précision inférieure :

$$f(x) \doteq g(x) \tag{1.2.1}$$

1.2.1 Fonctions d'approximation

Les fonctions d'approximation se mettent fréquemment sous la forme d'une combinaison linéaire d'une classe de fonctions données $g_i(x)$ par exemple sous forme d'un développement en série de Fourier :

$$g(x) = a_0 + a_1 \cos x + a_2 \cos(2x) + \dots + a_n \cos(nx) \\ + b_1 \sin x + b_2 \sin(2x) + \dots + b_n \sin(nx) \tag{1.2.2}$$

ou sous forme d'un développement d'exponentielles :

$$g(x) = a_0 \exp(b_0 x) + a_1 \exp(b_1 x) + \dots + a_n \exp(b_n x) \quad (1.2.3)$$

De tous les développements de ce type, le plus simple est le polynôme d'approximation qui est une combinaison linéaire de monômes :

$$g(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n \quad (1.2.4)$$

L'avantage du polynôme d'approximation est sa facilité à être dérivé ou intégré.

On peut approximer toute fonction continue sur un intervalle donné à un degré de précision quelconque par un polynôme de degré n , d'après le

Théorème d'approximation de Weierstrass :

$$\forall f \text{ continue sur } [a, b], \forall \epsilon > 0, \exists \text{ un polynôme } P_n(x) \text{ de degré } n(\epsilon) \text{ tel que :} \quad (1.2.5)$$

$$|f(x) - P_n(x)| < \epsilon, \quad a \leq x \leq b$$

1.2.2 Approximation polynomiale

1.2.2.1 Polynôme interpolant de degré n

Un critère peut être que, étant donné $(n + 1)$ couples $(x_i, f(x_i))$, le *polynôme d'interpolation* passe par les $(n + 1)$ points :

$$P_n(x_i) = f(x_i) \quad \forall i = 1, \dots, n + 1 \quad (1.2.6)$$

L'approximation n'est aucunement garantie pour toute valeur de x différente de x_i . Comme le polynôme passe par tous les points, on parle également de *collocation*.

1.2.2.2 Polynôme au sens des moindres carrés

Lorsque l'on dispose d'un grand nombre de valeurs n ou que la fonction est connue avec imprécision en un nombre réduit de points, il peut être intéressant de réaliser l'*approximation* par un polynôme de degré m inférieur à n . L'approximation au sens des moindres carrés consiste à rechercher les coefficients du polynôme tel que la somme des carrés des erreurs soit minimale :

$$\min E = \sum_{i=0}^n [P_m(x_i) - f(x_i)]^2 \quad (1.2.7)$$

avec :

$$P_m(x) = \sum_{j=0}^m a_j x^j = a_0 + a_1 x + \dots + a_m x^m \quad (1.2.8)$$

On trouve les coefficients a_j en minimisant le critère E d'où la nullité du gradient en l'absence de contraintes :

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = \dots = \frac{\partial E}{\partial a_m} = 0 \quad (1.2.9)$$

qui résulte en un système de $m + 1$ équations linéaires par rapport aux paramètres a_j .

Ces $(m + 1)$ équations peuvent s'écrire sous la forme :

$$\begin{bmatrix} S_0 & S_1 & \dots & S_m \\ S_1 & S_2 & \dots & S_{m+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ S_m & S_{m+1} & \dots & S_{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_0 \\ t_1 \\ \vdots \\ t_m \end{bmatrix} \quad (1.2.10)$$

avec :

$$S_k = \sum_{i=0}^n x_i^k, \quad t_k = \sum_{i=0}^n x_i^k f(x_i) \quad (1.2.11)$$

soit :

$$\mathbf{S} \mathbf{a} = \mathbf{t} \quad \text{ou :} \quad \mathbf{a} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{t} \quad (1.2.12)$$

Lorsque m est égal à 1, on obtient ainsi la droite des moindres carrés.

1.2.2.3 Polynôme minimax

Les coefficients du polynôme d'approximation $P_m(x)$ doivent être choisis de telle façon que la valeur absolue du plus grand écart : $f(x_i) - P_m(x_i)$, soit minimale :

$$\min \left(\max_i |f(x_i) - P_m(x_i)| \right) \quad (1.2.13)$$

1.2.2.4 Développement en série entière

Si une fonction $f(x)$ est continue et continûment dérivable sur l'intervalle $[x, x_0]$, on peut utiliser son *développement en série de Taylor* au point x_0 :

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + \dots \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(x - x_0)^i}{i!} f^{(i)}(x_0) \end{aligned} \quad (1.2.14)$$

Notons qu'on utilise la convention $0! = 1$.

Dans le cas où $x_0 = 0$, ce développement s'appelle *développement en série de MacLaurin*.

Très souvent, on utilisera le *développement limité à l'ordre n* ou *polynôme de Taylor de degré n* . Il est défini par les $(n + 1)$ premiers termes du développement en série de Taylor selon :

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \dots \\ &\quad + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + \frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n + 1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad \text{avec : } x_0 \leq \xi \leq x \\ &= f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + o((x - x_0)^n) \end{aligned} \quad (1.2.15)$$

Le *reste* $(x - x_0)^{n+1}/(n + 1)! f^{(n+1)}(\xi)$ peut être majoré et fournir ainsi une évaluation de l'erreur commise en tronquant le développement limité à l'ordre n , d'où l'appellation *erreur de troncature*.

Le développement en série de Taylor est dans la pratique numérique assez peu utilisé en tant que tel, mais le développement limité est fréquemment utilisé en tant que référence lors de la conception d'une nouvelle méthode numérique fondée sur la discrétisation.

1.2.2.5 Calcul du polynôme $P_n(x)$

La règle de Horner permet de calculer le polynôme $P_n(x)$ avec un minimum d'opérations, n multiplications et n additions, d'après le développement suivant :

$$P_n(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(a_3 + x(a_4 + \cdots + x(a_{n-1} + xa_n)) \dots))) \quad (1.2.16)$$

1.3 Détermination des polynômes d'interpolation

1.3.1 Calcul du polynôme d'interpolation

Etant donné n points de coordonnées $(x_i, f(x_i))$, il existe un seul polynôme interpolant de degré inférieur ou égal à $n - 1$ passant par les n points :

$$P_{n-1}(x_i) = f(x_i) \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (1.3.1)$$

Les coefficients a_i du polynôme interpolant sont solution du système linéaire de n équations :

$$\begin{aligned} a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \cdots + a_{n-1}x_1^{n-1} &= f(x_1) \\ a_0 + a_1x_2 + a_2x_2^2 + \cdots + a_{n-1}x_2^{n-1} &= f(x_2) \\ \dots &= \dots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \cdots + a_{n-1}x_n^{n-1} &= f(x_n) \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Le déterminant de la matrice des coefficients de ces équations est connu sous le nom de déterminant de Vandermonde :

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} \quad (1.3.3)$$

Rappelons que l'approximation n'est aucunement garantie pour toute valeur de x différente de x_i .

1.3.2 Polynôme d'interpolation de Newton

D'après la définition de la dérivée d'une fonction continue $f(x)$:

$$\left[\frac{df(x)}{dx} \right]_{x_0} = f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad (1.3.4)$$

on pourra définir la *différence divisée* d'ordre 1 :

$$f[x, x_0] = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad (1.3.5)$$

En fait, cette différence divisée est le *rapport* ou *quotient* de la *différence finie* : $(f(x) - f(x_0))$ par la *différence finie* $(x - x_0)$. C'est un taux d'accroissement. Il s'agit donc d'une différence finie divisée en général appelée *différence divisée* que nous retiendrons [Burden and Faires, 2011, Gautschi, 2012, Sauer, 2012, Stoer and Bulirsch, 1996]. Toutefois, dès que l'on aborde la discrétisation des équations différentielles ordinaires et

des équations aux dérivées partielles, concernant l'emploi des schémas de différences dans la *méthode des différences finies*, on emploie fréquemment simplement le terme de *différence finie* alors qu'il s'agit d'un quotient [Allaire, 2007, Epperson, 2013, Sastry, 2006, Schiesser et al., 1994].

On sait d'après le théorème de la valeur moyenne (Figure 1.1) que :
 $\forall f(x)$ continue sur $a \leq x \leq b$ et dérivable sur $a \leq x \leq b, \exists \xi \in [a, b]$ tel que :

$$f'(\xi) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \quad (1.3.6)$$

Figure 1.1 Théorème de la valeur moyenne.

On en déduit que la première différence divisée ou différence divisée d'ordre 1 est :

$$f[x, x_0] = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(\xi), \quad \xi \in [x, x_0] \quad (1.3.7)$$

Le concept de différence divisée se généralise (Tableau 1.1).

Tableau 1.1 Différences divisées

Ordre	Différence divisée	Définition
0	$f[x_0]$	$f(x_0)$
1	$f[x_1, x_0]$	$\frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}$
2	$f[x_2, x_1, x_0]$	$\frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}$
n	$f[x_n, \dots, x_1, x_0]$	$\frac{f[x_n, \dots, x_2, x_1] - f[x_{n-1}, \dots, x_1, x_0]}{x_n - x_0}$

On en déduit que la différence divisée d'ordre n est égale à :

$$f[x_n, \dots, x_1, x_0] = \sum_{i=0}^n \frac{f(x_i)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)} \quad (1.3.8)$$

ou :

$$f[x_n, \dots, x_1, x_0] = \frac{f(\xi)}{n!}, \quad \xi \in [x_0, x_1, \dots, x_n] \quad (1.3.9)$$

L'interpolation linéaire de la fonction $f(x)$ en un point $x \in [x_0, x_1]$ se fera donc selon :

$$f(x) \approx P_1(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_1, x_0] = f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] \quad (1.3.10)$$

Figure 1.2 Approximation de $f(x)$ par $P_1(x)$.

En fait, l'interpolation ainsi définie est une approximation si $f(x)$ n'est pas une fonction linéaire (Figure 1.2) et l'on aura un terme d'erreur $R_1(x)$ tel que :

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] + R_1(x) = P_1(x) + R_1(x) \quad (1.3.11)$$

d'où le terme d'erreur qui s'annule aux bornes x_0, x_1 :

$$R_1(x) = (x - x_0)(f[x, x_0] - f[x_1, x_0]) = (x - x_0)(x - x_1)f[x, x_1, x_0] \quad (1.3.12)$$

soit pour la fonction $f(x)$:

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x, x_1, x_0] \quad (1.3.13)$$

On peut évaluer le terme d'erreur ou *reste* en introduisant un point connu $(x_2, f(x_2))$ si l'on suppose que la fonction $f(x)$ ne change pas trop rapidement sur l'intervalle contenant x_0, x_1, x_2 . Dans ce cas,

$$R_1(x) \approx (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \quad (1.3.14)$$

Si l'interpolation linéaire est insuffisante, on peut rajouter un terme de courbure avec la différence divisée d'ordre 2 pour évaluer la fonction $f(x)$ selon un polynôme de degré 2 :

$$f(x) \approx P_2(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \quad (1.3.15)$$

tandis que l'expression exacte de $f(x)$ est en fait :

$$\begin{aligned} f(x) &= f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \\ &\quad + (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x, x_2, x_1, x_0] \\ &= P_2(x) + R_2(x) \end{aligned} \quad (1.3.16)$$

La formule peut se généraliser à l'ordre n ; la fonction $f(x)$ est la somme d'un polynôme d'interpolation de degré n et d'un reste :

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x) \quad (1.3.17)$$

avec le polynôme d'interpolation de degré n selon la différence divisée :

$$\begin{aligned} P_n(x) &= f[x_0] + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] + \dots \\ &\quad + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})f[x_n, \dots, x_1, x_0] \end{aligned} \quad (1.3.18)$$

tandis que le terme d'erreur correspondant est égal à :

$$\begin{aligned} R_n(x) &= (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)f[x, x_n, \dots, x_1, x_0] \\ &= [\prod_{i=0}^n (x - x_i)]f[x, x_n, \dots, x_1, x_0] \end{aligned} \quad (1.3.19)$$

D'après le théorème de Rolle :

$$\begin{aligned} \forall f(x) \text{ continue et dérivable pour } x \in [a, b], \text{ si } f(a) = f(b), \\ \exists \xi \in [a, b] \text{ tel que : } f'(\xi) = 0 \end{aligned} \quad (1.3.20)$$

En utilisant ce théorème de manière itérative et en remarquant que le reste $R_n(x)$ s'annule en tous les points $x_0, x_1, \dots, x_n$, on estime $R_n(x)$:

$$R_n(x) \doteq \left[\prod_{i=0}^n (x - x_i) \right] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi \in (x, x_n, \dots, x_1, x_0) \quad (1.3.21)$$

ce qui peut permettre de trouver une borne supérieure pour le reste si la fonction $f(x)$ est connue analytiquement.

Le polynôme d'interpolation $P_n(x)$ peut également être vu sous la forme :

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \quad (1.3.22)$$

les coefficients a_i étant évalués selon le schéma récurrent :

$$\begin{aligned} f_0 &= P(x_0) = a_0 \\ f_1 &= P(x_1) = a_0 + a_1(x_1 - x_0) \\ f_2 &= P(x_2) = a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

Les différences divisées peuvent se calculer selon un schéma itératif triangulaire symbolisé par le tableau 1.2. La colonne $k = 0$ correspond aux ordonnées de la fonction

aux points d'abscisse x_i d'après la relation $f[x_i] = f(x_i)$, la colonne $k = 1$ se déduit simplement de la colonne $k = 0$ par une formule du type

$$f[x_i, x_{i-1}] = \frac{f[x_i] - f[x_{i-1}]}{x_i - x_{i-1}} \quad (1.3.24)$$

la colonne $k = 2$ se déduit simplement de la colonne $k = 1$ par une formule du type

$$f[x_i, x_{i-1}, x_{i-2}] = \frac{f[x_i, x_{i-1}] - f[x_{i-1}, x_{i-2}]}{x_i - x_{i-2}} \quad (1.3.25)$$

et ainsi de suite la colonne i se déduit de la colonne $i - 1$ par une relation similaire en triangle.

Tableau 1.2 Calcul itératif triangulaire des différences divisées

	$k = 0$	$k = 1$	$k = 2$	$\dots$	$k = n$
x_0	$f[x_0]$				
x_1	$f[x_1]$	$f[x_1, x_0]$			
x_2	$f[x_2]$	$f[x_2, x_1]$	$f[x_2, x_1, x_0]$	$\ddots$	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0]$
x_n	$f[x_n]$	$f[x_n, x_{n-1}]$	$f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}]$		

1.3.3 Polynôme d'interpolation de Lagrange

Le polynôme d'interpolation de Lagrange (voir un exemple de polynôme de Lagrange sur la Figure 1.3) de degré 2 est égal à :

$$\begin{aligned}
 P_2(x) &= \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) \\
 &+ \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \\
 &= \sum_{i=0}^2 \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \right] f(x_i) = \sum_{i=0}^2 L_i(x) f(x_i)
 \end{aligned} \quad (1.3.26)$$

En généralisant au degré n , le polynôme d'interpolation de Lagrange s'écrit :

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) \quad (1.3.27)$$

où les facteurs $L_i(x)$ sont égaux à :