

INTERPOLATION ET ESTIMATION DE DÉRIVÉES EN DIMENSION d SELON UNE APPROCHE LAGRANGIENNE

ALEXANDRE DAY

RÉSUMÉ. L'interpolation lagrangienne, une approche de base en méthodes numériques, est bien adaptée à la représentation continue de données discrètes en dimension 1. Cet article a pour but de présenter l'extension de cette méthode en dimension arbitraire d , ce qui permettra de calculer les dérivées partielles d'une fonction représentée par un nuage de points.

1. Introduction

Les méthodes d'interpolation et d'estimation de dérivées, à partir de données discrètes représentant une fonction, sont primordiales lors d'études de phénomènes physiques. En effet, ces méthodes trouvent de nombreuses applications dans la simulation de phénomènes astrophysiques ou cosmologiques [Abe11]. Les routines d'interpolation numérique étant peu onéreuses en terme de temps de calcul, elles sont souvent intégrées à des algorithmes plus complexes qui y font constamment appel. D'autres approches plus sophistiquées permettent d'approcher le problème comme la smooth particule hydrodynamics (SPH) [GM77], [Mon92]. Cependant, dans ce dernier cas, il est difficile d'évaluer l'erreur commise et la précision obtenue est limitée.

Tout d'abord, j'exposerai l'interpolation de Lagrange en dimension 1. Ensuite, je présenterai une notation qui sera utile pour démontrer une méthode d'interpolation en dimension d . Enfin, des résultats numériques seront présentés.

2. Interpolation de Lagrange [Bur]

Définition. Pour l'ensemble de $m + 1$ couples $\{x_i, f(x_i)\}_{i=0}^m$ décrivant une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, le problème consiste à trouver une fonction $L : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $L(x_i) = y_i$ pour $i = 0, \dots, m$. On dira alors que $L(x)$ interpole $f(x)$ aux noeuds $\{x_i\}$.

Plus particulièrement nous étudions l'interpolation polynomiale. En dimension 1, il existe un polynôme $L : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de degré m unique qui interpole

J'aimerais tout d'abord remercier Jean-Marc Belley pour ses judicieux conseils durant le projet de stage. De même, je souhaite remercier Virginie Charette et le CRSNG pour leur support financier.

un ensemble de $m + 1$ couples $\{x_i, f(x_i)\}_{i=0}^m$, lequel nous définissons comme le polynôme de Lagrange :

$$(1) \quad L(x) = \sum_i f(x_i) \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad i, j = 0, \dots, m$$

$L(x)$ est bien un polynôme de degré m . De plus, il interpole $f(x)$:

$$(2) \quad L(x_k) = \sum_i f(x_i) \delta_{ik} = f(x_k)$$

Où la définition de δ_{ik} , le delta de Kronecker, est donnée plus bas (13). Démontrons maintenant l'unicité du polynôme.

THÉORÈME 1. *Soient $m + 1$ couples $(x_i, f(x_i))_{i=0}^m$. Alors, il existe un unique polynôme L de degré m tel que $L(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, m$.*

DÉMONSTRATION. Supposons qu'il existe deux polynômes de degré m distincts $L(x)$ et $Q(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ qui interpolent $m + 1$ couples $(x_i, f(x_i))_{i=0}^m$ représentant une fonction f . Par définition, Q et L doivent respecter la relation suivante :

$$(3) \quad Q(x_i) - L(x_i) = 0 \quad i = 0, \dots, m$$

Cependant, on constate que $Q(x) - L(x)$ est au plus un polynôme de degré m et possède donc au plus m racines. Dans l'Éq. (3), il y a plutôt $m + 1$ racines ce qui impose que la seule solution est $Q(x) = L(x)$. □

La figure 1 illustre un exemple d'interpolation de Lagrange pour une fonction définie par morceaux et une fonction exponentielle décroissante oscillante. À gauche : on constate que malgré les discontinuités de la fonction étudiée, on réussit à en faire une bonne approximation dans la région la plus centrée de l'intervalle d'interpolation. L'usage d'un plus grand nombre de noeuds ainsi que l'application à une fonction continue augmente la qualité de l'interpolation comme il est illustré dans la partie de droite. L'interpolation est généralement instable aux extrémités de l'intervalle d'interpolation.

3. Notation multi-indice

Avant d'introduire l'extension de l'interpolation de Lagrange aux dimensions supérieures à 1, il convient d'introduire une notation concise pour des fins de clarté. Un multi-indice de longueur $d \in \mathbb{N}$ est un vecteur $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d)$ où les composantes $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d$ sont des entiers non négatifs. Le multi-indice d'éléments tous nuls est noté $\mathbf{0}$. La norme d'un multi-indice est notée :

$$(4) \quad |\boldsymbol{\alpha}| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_d$$

La dérivée d'un fonction $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ sera notée :

$$(5) \quad D^{\boldsymbol{\alpha}} f(\mathbf{p}) := \frac{\partial^{|\boldsymbol{\alpha}|}}{\partial x^{\alpha_1} \partial y^{\alpha_2} \dots \partial z^{\alpha_d}} f(x, y, \dots, z) \quad \text{avec} \quad D^{\mathbf{0}} f(\mathbf{p}) = f(\mathbf{p})$$

De plus, deux multi-indices de même longueur $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_d)$ sont égaux $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta}$ seulement si $\alpha_1 = \beta_1, \dots, \alpha_d = \beta_d$.

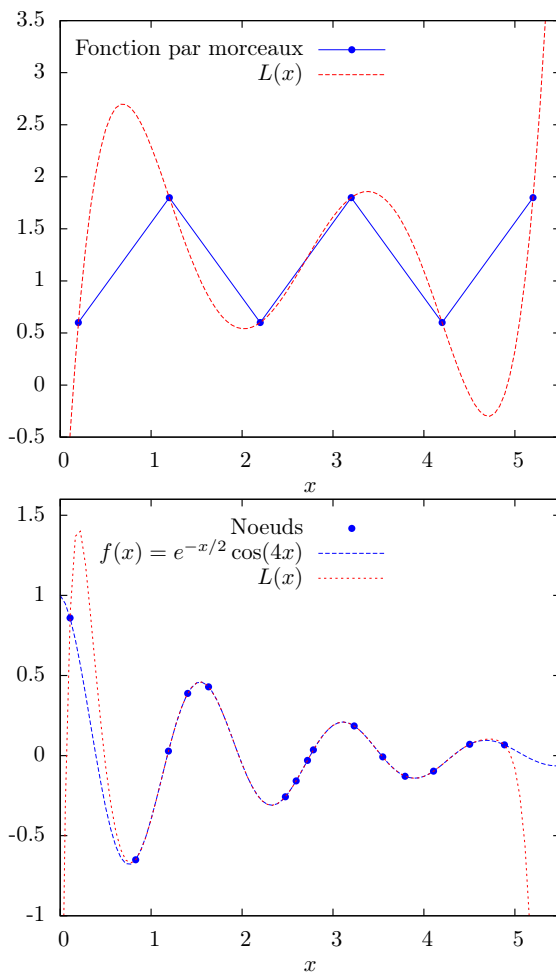


FIGURE 1. Interpolation par un polynôme de Lagrange (rouge). À gauche : fonction définie par morceaux pour une grille de 6 noeuds (en bleu) uniformément espacés. À droite : fonction $f(x)$ indiquée sur la figure interpolée à partir d'une grille aléatoire de 15 points sur un intervalle $x \in [0, 5]$.

3.1. Domaine d'étude de l'interpolation

Soit un ensemble convexe $K \subset \mathbb{R}^d$ et soit $C(K)$, la classe des fonctions réelles de K qui admettent une extension continue et réelle sur un ensemble ouvert contenant K . On notera $C^n(K)$ ($n \in \mathbb{N}$) la classe de fonctions $f \in C(K)$ n -fois continûment dérivables dans le voisinage de K , c'est-à-dire que pour tout multi-indice α tel que

$$(6) \quad 0 \leq |\alpha| \leq n,$$

la dérivée $D^\alpha f(\mathbf{p})$ existe et est continue pour tout point $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ dans un ensemble ouvert contenant K . Prenons σ pour noter la classe de points (possiblement désordonnés) $\{\mathbf{p}_i\}_{i=1}^m \in K$, tel que $\mathbf{p}_i = (x_i, y_i, \dots, z_i)$ et où $f \in C^n(K)$ prend une valeur réelle en $f(\mathbf{p}_i)$. L'objet de cet article est de montrer que, pour un

$\mathbf{p} \in K$ arbitraire et un multi-indice α respectant (6), il est possible de trouver des coefficients $l_0^\alpha(\mathbf{p}; \sigma), \dots, l_m^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$ tels que la dérivée $D^\alpha f(\mathbf{p})$ est approximée par le polynôme interpolant $L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ défini comme :

$$(7) \quad L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = f(\mathbf{p}_0)l_0^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) + \dots + f(\mathbf{p}_m)l_m^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$$

Nous montrerons également que la connaissance de $L_f^{\mathbf{0}}$ suffit à déterminer les polynômes interpolant les dérivées de f :

$$(8) \quad L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = D^\alpha L_f^{\mathbf{0}}(\mathbf{p}; \sigma) \quad \text{et} \quad l_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = D^\alpha l_f^{\mathbf{0}}(\mathbf{p}; \sigma)$$

La façon de déterminer les coefficients l_i^α est présentée à la section suivante.

4. Interpolation en dimension d

4.1. Généralisation

Supposons que la fonction $f \in C^{n+1}(K)$ avec $K \subset \mathbb{R}^d$ admet le développement (7), pour l'instant considéré comme exact. Rappelons également le développement de Taylor à plusieurs variables pour f : Le premier terme, est le polynôme de Taylor $\mathcal{P}_n(\mathbf{p})$ de degré n avec $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_d)$ et $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_d)$ et :

$$(9) \quad \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^\beta}{\beta!} \equiv \frac{(p_1 - q_1)^{\beta_1} (p_2 - q_2)^{\beta_2} \dots (p_d - q_d)^{\beta_d}}{\beta_1! \beta_2! \dots \beta_d!}$$

Le second terme est le reste de Cauchy qui ne fera pas l'objet du présent article. Il est cependant à la base de la façon d'évaluer l'erreur sur l'interpolation. Ainsi, en ne gardant que le polynôme de Taylor de degré n , $\mathcal{P}_n(\mathbf{p})$, nous substituons ce dernier dans (7), i.e. nous posons $f(\mathbf{p}_i) \approx \mathcal{P}_n(\mathbf{p}_i)$, $i = 0, \dots, m$:

$$(10) \quad L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = \sum_{|\beta|=0}^n \frac{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p})^\beta}{\beta!} D^\beta f(\mathbf{p}) l_0^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) +$$

$$\dots + \sum_{|\beta|=0}^n \frac{(\mathbf{p}_m - \mathbf{p})^\beta}{\beta!} D^\beta f(\mathbf{p}) l_m^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$$

$$(11) \quad = \sum_{|\beta|=0}^n D^\beta f(\mathbf{p}) \sum_{i=0}^m \left(l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) \frac{(\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^\beta}{\beta!} \right)$$

Ainsi, si l'on souhaite estimer la dérivée partielle $f^{(\alpha)}$ - où α respecte (6) - en un point $\mathbf{p} \in K$ à partir du nuage de points $\sigma = \{\mathbf{p}_i, f(\mathbf{p}_i)\}_{i=0}^m$, c'est-à-dire calculer $L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$, il suffit d'imposer que la deuxième somme de (11) soit nulle lorsque α est différent de β et égale à l'unité sinon. Cette condition s'exprime comme :

$$(12) \quad \sum_{i=0}^m l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) (\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^\beta = \beta! \delta_\alpha^\beta \quad 0 \leq |\beta| \leq n$$

Où δ est le delta de Kronecker défini comme :

$$(13) \quad \delta_\alpha^\beta = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha = \beta \\ 0 & \text{autrement} \end{cases}$$

Il s'agit dès lors de résoudre le système linéaire (12) afin de déterminer les coefficients $l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$, qui pourront alors être utilisés dans (7). Si nous appliquons D^γ des deux côtés de l'égalité de (12), avec $\gamma = (1, 0, \dots, 0)$ nous obtenons :

$$(14) \quad \sum_{i=0}^m (\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^\beta D^\gamma l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) - \beta_1 \sum_{i=0}^m (\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^{\beta - \gamma} l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = 0$$

Mais en vertu (12), le deuxième terme peut se réécrire comme un delta de Kronecker :

$$(15) \quad \sum_{i=0}^m (\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^\beta D^\gamma l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = \beta_1 (\beta - \gamma)! \delta_\alpha^{\beta - \gamma} = \beta! \delta_\alpha^{\beta - \gamma} = \beta! \delta_{\alpha + \gamma}^\beta$$

D'où par unicité de (12) - dont la condition est énoncée à la section 4.2 - il s'ensuit que :

$$(16) \quad D^\gamma l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = l_i^{\gamma + \alpha}(\mathbf{p}; \sigma)$$

Cette relation est valide pour tout multi-indice γ tel que $|\gamma| = 1$ et donc, par induction, la relation (16) est satisfaite pour tout γ tel que $\gamma + \alpha$ respecte (6). Selon ces mêmes conditions, on obtient que :

$$(17) \quad D^\gamma L_f^\alpha(\mathbf{p}; \sigma) = L_f^{\alpha + \gamma}(\mathbf{p}; \sigma)$$

4.2. Cardinalité de σ

On cherche ici à étudier un système linéaire dont la matrice des coefficients $m_{\beta, i} = (\mathbf{p}_i - \mathbf{p})^\beta$ est carrée. Ainsi, selon la dimension et l'ordre de la dérivée que l'on souhaite estimer, seulement certaines cardinalités de σ seront permises. Le nombre de multi-indices distincts satisfaisant l'inégalité (12) doit donc évaluer le nombre de coefficients $l_i^\alpha(\mathbf{p}; \sigma)$:

$$(18) \quad m + 1 = \frac{(n + d)!}{n!d!}$$

Où d est la dimension et m, n les indices définis dans (12). Bien-sûr, supposant cette dernière condition satisfaite, le système linéaire (12) aura une solution unique si le déterminant de la matrice des coefficients est non-nul $\det m_{\beta, i} \neq 0$.

5. Exemple numérique

Dans cette section nous prenons $d = 2$. Tel qu'énoncé plus haut n, m sont des entiers non négatifs qui respectent (18). Nous choisissons un nuage de points distribués aléatoirement :

$$(19) \quad \sigma = \{\mathbf{p}_i\}_{i=0}^m \subset [0.5, 1.5] \times [0.5, 1.5] \subset \mathbb{R}^2$$

À partir de σ on construit l'ensemble à interpoler $\{\mathbf{p}_i, f(\mathbf{p}_i)\}_{i=0}^m$ pour la fonction $f(x, y) = \cos(xy)$. Nous calculons ensuite $L_f^{(1,1)}(\mathbf{p}; \sigma)$ pour estimer la dérivée partielle $D^{(1,1)} f(\mathbf{p})$ au point $\mathbf{p} = (1.05, 1.05)$. Les résultats sont présentés à la figure 2. Certaines des données de la figure 2 sont présentées dans le tableau 1. L'erreur (en bleu) converge exponentiellement (échelle log) pour le point estimé.

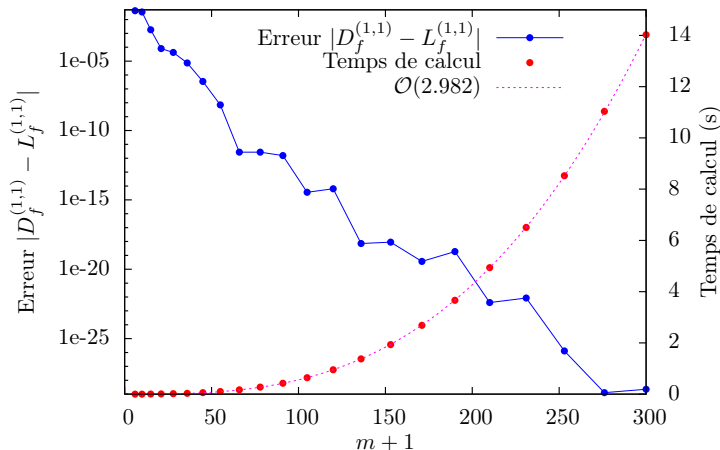


FIGURE 2. Erreur commise sur l'interpolation de $f(x, y) = \cos(xy)$ (en bleu) sur une échelle log et temps de calcul (en rouge).

Cependant, le temps de calcul¹ (points rouges) augmente en puissance de 2.982 (en magenta) en fonction du nombre de points utilisés ($m + 1$). Cette complexité algorithmique est simplement la complexité typique reliée à la résolution d'un système linéaire général. Enfin, la grande précision obtenue dans les calculs a été rendue possible par l'utilisation de la librairie NTL, avec des types à précision quasi arbitraire. L'utilisation d'une grande précision devient particulièrement importante lorsque vient le temps de construire la matrice des coefficients.

TABLEAU 1

Exemple d'interpolation

Nombre de noeuds $D^{(1,1)}f(1.05, 1.05) = -1.3899703375269057631$

n	m	$ D^{(1,1)}f(\mathbf{p}) - L_f^{(1,1)}(\mathbf{p}) $	Temps de calcul (s)
2	6	0.043122	0.000636
3	10	0.035022	0.001519
5	21	0.79752e-4	0.00763
10	66	0.27465e-11	0.169808
16	153	0.89979e-18	1.93244
20	231	0.83731e-22	6.507
23	300	0.22257e-28	14.0281

Références

- [Abe11] T. Abel, *The first stars as seen by supercomputers*, Physics today, avril 2011
- [GM77] R.A. Gingold and J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars, Mon. Not. R. Astron. Soc., 181(1977), pp. 375-398
- [Mon92] J.J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, Annu. Rev. Astron. Astrophys., 30(1992), pp. 543-574.

¹. Il convient de noter que les calculs ont été effectués sur un processeur standard de 2 GHz.

[Bur] R.L. Burden, *Numerical Analysis*, 9^e édition, 872 pages.

ALEXANDRE DAY, DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE, UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE
Courriel: alexandre.day@usherbrooke.ca