Apunts de Càlcul numéric

Aleix Torres i Camps

Mercé Ollé, J.R.Pacha i Juan Sànchez

Índex

1 Zeros de funcions

Teorema 1. *Sigui $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, de classe $\mathscr{C}^2$ tal que*

1. $f(a)f(b) < 0$
2. $f'(x) \neq 0 \forall x \in [a, b]$
3. $f''(x) \geq 0$ *(o* $f''(x) < 0$*)* $\forall x \in [a, b]$
4. *Si c és l'extrem de* $[a, b]$ *en el que* $|f'(x)|$ *és menor, llavors* $|f(c)|/|f'(c)| \leq b - a$.

Llavors, el mètode de Newton convergeix a l'única solució α *de* $f(x) = 0$ *a* $[a, b]$ *per a qualsevol condició inicial* $x_0 \in [a, b]$.

Demostració. Separem en casos.

(a) Si $f(a) < 0$, $f(b) > 0$, $f'' \leq 0$, com que la derivada és sempre positiva i decreix $c = b$.

(b) Si $f(a) > 0$, $f(b) < 0$, $f'' \leq 0$, com que la derivada és sempre negatica i creix $c = b$.

(c) Si $f(a) < 0$, $f(b) > 0$, $f'' \geq 0$, com que la derivada és sempre positiva i creix $c = a$.

(d) Si $f(a) > 0$, $f(b) < 0$, $f'' \leq 0$, com que la derivada és sempre positiva i decreix $c = a$.

Ara, com l'objectiu és trobar zeros, els cassos (a) i (b) són equivalent i (c) amb (d) fent el canvi de f a $-f$. Per passar de (c) a (a) podem canviar $f(x)$ per $-f(-x)$ (també s'ha de canviar els extrems).

Suposem que $a \leq x_0 \leq s$, com que $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \geq x_0$, perquè la derivada és positiva i $f(x_0)$ negativa. Ara, pel teorema del valor mitja $-f(x_0) = f(s) - f(x_0) = f'(\zeta) \cdot (s - x_0) \leq f'(x_0) \cdot (s - x_0)$. Perquè, al estar $x_0 \leq \zeta \leq s$ segur que $f'(x_0) \geq f'(\zeta) \geq f'(s) > 0$. Llavors, aillant s queda $s \geq x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = x_1$. Com que el mateix argument serveix per tot n, tenim que x_n és una successió creixent i fitada. Per tant, tenim que la successió dels x_n convergeix a un punt q.

Ara, calculem el límit a banda i banda de $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ que queda $q = q - \frac{f(q)}{f'(q)}$ i per tant, $f(q) = 0$, així que $q = s$.

Si $s \leq x_0 \leq b$, comencem veient que $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \leq s$. Pel teorema del valor mitjà $f(x_0) - f(s) = f'(\zeta)(x_0 - s) \geq f'(x_0)(x_0 - s) \implies \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \geq (x_0 - s)$. Que, reordenant, és el que volíem. Ara veurem que $x_1 \geq a$, i fem:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \geq x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(b)} \geq x_0 - \frac{f(b)}{f'(b)} + b - x_0 = b - \frac{f(b)}{f'(b)} \geq b - (b - a) = a$$

La primera desigualtat, vé del fet que:

$$f'(x_0) \geq f'(b) \geq 0 \implies \frac{1}{f'(x_0)} \leq \frac{1}{f'(b)} \implies \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \leq \frac{f(x_0)}{f'(b)}$$

La segona, pel teorema del valor mitjà $f(b) - f(x_0) = f'(\zeta)(b - x_0) \geq f'(b)(b - x_0) \implies \frac{f(x_0)}{f'(b)} \leq \frac{f(b)}{f'(b)} - (b - x_0)$. I, l'última, prové d'utilitzar la quarta condició que ens proposaven, és a dir:

$$\frac{|f(c)|}{|f'(c)|} = \frac{f(b)}{f'(b)} \leq b - a$$

Aleshores, hem vist que $a \leq x_1 \leq s$ i, per tant, estem en el cas anterior que ja hem demostrat que convergia a la solució. □

1.1 Mètodes d'iteració. Mètodes de punt fix

Motivació: Busquem s tal que $f(s)=0 \iff s=g(s)$ (per una g adequada). Llavors s serà un zero o una arrel d'f si, i només si, s és un punt fix de g.

La idea és fer la següent succesió x_0 lliure i $x_n = g(x_{n-1})$. Si $x_n \to s$ llavors per g contínua, $g(x_n)$ tendirà a $g(s)$.

Teorema 2. *(Teorema del punt fix) Sigui $g: I=[a,b] \to \mathbb{R}$, contínua tal que:*
i) $g(I) \subset I$
ii) $\forall x_1, x_2 \in I$, $|g(x_2)-g(x_1)| \leq L|x_2-x_1|$ amb L constant $0<L<1$. És a dir, L-Lispstisch.
Llavors, si això es compleix:
a) $\exists! s \in I$ que és un punt fix (i.e. $g(s)=s$).
b) La successió $x_n = g(x_{n-1})$ convergeix cap a s per a qualsevol $x_0 \in I$.
c.1) $|x_n - s| \leq \frac{L^n}{1-L}|x_1-x_0|$
c.2) $|x_n - s| \leq \frac{L}{1-L}|x_n - x_{n-1}|$ $\forall n \in \mathbb{N}$.

Demostració. a) Cal comprovar per inducció que $|x_{r+\nu+1}-x_{r+\nu}| \leq L^{\nu+1}|x_r - x_{r-1}|$ per a cada $\nu \in \mathbb{N}$ i qualsevol $r \in \mathbb{N}$. Ara, com que per $n, m \in \mathbb{N}$ amb $m>n$ es compleix que $|x_m - x_n| = |\sum_{j=n}^{m-1}(x_{j+1}-x_j)| \leq \sum_{j=n}^{m-1}|x_{j+1}-x_j| = \sum_{k=0}^{m-n-1}|x_{k+n+1}-x_{k+n}| \leq [\nu = k+n+1, r=1] \leq \sum_{k=0}^{m-n-1} L^{k+n}|x_1-x_0| \leq L^n|x_1-x_0|\sum_{k=0}^{m-n-1} L^k \leq \frac{L^n}{1-L}|x_1-x_0|$.

Aleshores, tenim que x_n és una successió de Cauchy en un interval tancat i, per tant, té límit. Sigui q aques límit, llavors $q = \lim x_n = \lim g(x_{n-1}) = g(q)$, per tant, q és un punt fix. Suposem que és diferent de s, llavors $|s-q| = |g(s)-g(q)| \leq L|s-q| \iff (1-L)|s-q| \leq 0$. Necessàriament $s=q$.

b) Ve de no utilitzar el punt inicial en cap moment per l'apartat anterior.

c.1) Com que hem vist que $|x_m - x_n| \leq \frac{L^n}{1-L}|x_1-x_0|$, per tant, fent tenir n a infinit, tenim $|x_m - s| \leq \frac{L^n}{1-L}|x_1-x_0|$.

c.2) Teniem $|x_m - x_n| \leq \sum_{k=0}^{m-n-1}|x_{k+n+1}-x_{k+n}| \leq [r=n, \nu=k] \leq \sum_{k=0}^{m-n-1} L^{k+1}|x_n - x_{n-1}|$. Aleshores, fent tendir m a infinit i per la suma geométrica, tenim que $|s-x_n| \leq \frac{L}{1-L}|x_n - x_{n-1}|$, que és el que voliem veure. □

2 Interpolació i aproximació de funcions

2.1 Introducció

El problema d'interpolació correspon a un cas d'aproximació de funcions. Interpolar una funció f en un conjunt de punts (x_k, y_k) per $0 \leq k \leq n$ (amb $x_k \neq x_i$, si $k \neq i$) és trobar una altra funció f^* de manera que a sobre d'aquest punts la nova funció prengui el mateix valor que la funció original: $f^*(x_k) = y_k$ (per $0 \leq k \leq n$).

Ens serà especialment útil quan no coneguem la funció original $f(x)$.

Pregunta: Donada la xarxa de punts (x_k, y_k), per $0 \leq k \leq n$, de quin tipus prenem f^*?

La resposta vé lligada a les sospites o la informació que tinguem sobre la f. Per exemple, si les dades corresponen a un comportament periòdic, prenem f^* entre les funcions trigonomètriques. Si f té assimptotes verticals, prendrem f^* una funció racional, és a dir, quocient de polinomis.

Si sospitem que f té un comoprtament polinomial (o proper), prendrem f^* com un polinomi. S'anomena interpolació polinomial.

2.2 Interpolació polinòmica

Donats $n+1$ punts d'una xarxa (x_k, f_k), per $0 \leq k \leq n$ amb $x_k = x_i$ si, i només si, $k \neq i$, anomanem **interpolació polinòmica** a la determinació d'un polinomi $p(x)$ tal que $p(x_k) = f_k$, per $1 \leq k \leq n$.

Pregunta natural: Existeix $p(x)$? És únic?

Teorema 3. *Existencia i unicitat. Existeix un únic polinomi $p_n(x)$ de grau $\leq n$, tal que interpola, és a dir, $p_n(x_k) = f_k$, per $1 \leq k \leq n$. L'anomenanem el polinomi interpolador de f en $x_0, \ldots, x_n$.*

Demostració. Sigui $p_n(x) = C_0 + C_1(x-x_0) + C_2(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + C_n(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$. Ara, impossem que p_n interpola, és a dir:

$$
\begin{aligned}
&f_0 = p_n(x_0) = C_0 \\
&f_1 = p_n(x_1) = C_0 + C_1(x_1 - x_0) = p_1(x) \\
&f_2 = p_n(x_2) = C_0 + C_1(x_2 - x_0) + C_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = p_2(x) \\
&\cdots \\
&f_k = p_n(x_k) = C_0 + C_1(x_k - x_0)(x_2 - x_1) + \cdots + C_k(x_k - x_0)\cdots(x_k - x_{k-1}) = p_k(x)
\end{aligned}
$$

El qual és un sistema lineal en $C_0, \ldots, C_n$.

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & (x_1 - x_0) & 0 & \cdots & 0 \\
1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \cdots & \prod_{i=0}^{n-1}(x_n - x_i)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{pmatrix}
$$

És un sistema determinat? Només cal veure que el determinant de A sigui diferent de 0. Així és perquè A és una matriu triangular inferior i, per tant, el seu determinant és el producte dels elements de la diagonal, que són tots de la forma $(x_j - x_i)$ amb $i \neq j$ i com diu l'enunciat, les x_i són totes diferents. Aleshores, $\exists C_0, \ldots, C_n$.

Per demostrar la unicitat, suposem que existeixen dos polinomis interpoladors $p_n(x)$ i $q_n(x)$ de grau $\leq n$ amb $p_n(x_k) = q_n(x_k) = f_k$ per $1 \leq k \leq n$. Prenem $r_n = p_n - q_n$, el qual és un polinomi de grau $\leq n$ i quan fem $r_n(x_k) = p_n(x_k) - q_n(x_k) = f_k - f_k = 0$ per $1 \leq k \leq n$. Així que el polinomi r_n és de grau n però té $n+1$ zeros, aleshores únicament pot ser el polinomi identicament 0. $\square$

Pregunta natural: Quin error fem si aproximem $f(x)$ per $p_n(x)$ en $x = x_k$?

Notació: Denotarem $f \in \mathscr{C}^k(a,b)$ si f és $\mathscr{C}^k(I)$ on $[a,b] \subset I$ i I és un interval obert.

Teorema 4. *Si $f \in \mathscr{C}^{n+1}(a,b)$, $x_k \in (a,b)$ per $0 \leq k \leq n$ i $p_n(x)$ el polinomi interpolador. Llavors*

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta(x))}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)$$

on $\zeta(x) \in \langle x_0, \cdots, x_n, x\rangle := (\min(x_0, \cdots, x_n, x), \max(x_0, \cdots, x_n, x))$.

Demostració. Si $x = x_k$, automàticament és cert. Per $x \neq x_k$, $\forall k$ prenem $\phi(z) = f(z) - p_n(z) - a(x)(z - x_0)\cdots(z-x_n)$, amb $a(x)$ tal que $\phi(x) = 0$ (aïllant es veu que existeix i després se'n veu una de més concreta).

Aleshores, es compleix que ϕ s'anul·la en $n+2$ abscisses, que son els punts $x_0, \cdots, x_n, x$. Llavors podem derivar $n+1$ vegades a banda i banda i aplicar el teorema de Rolle per assegurar que existeix un zero a la derivada $n+1$-éssima de $\zeta(x)$. És a dir, si derivem $n+1$ vegades, ens queda: $\phi^{n+1}(z) = f^{(n+1)}(z) - a(x)(n+1)!$ i sabem que, per algun punt $z = \zeta(x)$ (perquè depen de x) la derivada $n+1$-éssima s'anul·la. Llavors, aïllant $a(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta(x))}{(n+1)!}$.

I, com que $\phi(x) = 0$, aïllant, deduïm que:

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta(x))}{(n+1)!}(x-x_0)\cdots(x-x_n)$$

□

2.3 Mètodes de càlcul del polinomi interpolador

Recordem que volem interpolar una xarxa de $n+1$ punts que anomanem (x_k, f_k) per $1 \leq k \leq n$.

Definició 5. Mètode de Lagrange. Proposa trobar el polinomi interpolador de la següent forma:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k l_k(x)$$

que, per definició, són els polinomis de grau n.

$$l_k(x) = \frac{\prod_{i \neq k}(x - x_i}{\prod_{i \neq k}(x_k - x_i}$$

És compleix que $l_k(x_j) = 1$ si $j = k$ i altrament, $l_k(x_j) = 0$. Llavors, $p_n(x_j) = f_j$ ja que tots els termes del sumatori son 0 excepte el que concideix amb j que és $f_j \cdot 1$.

Exemple 1. $f(x) = \sin x$ amb $x = 0, \pi/6, \pi/2$. Per tant, els punts són $(0,0), (\pi/6, 1/2), (\pi/2, 1)$. Si volem interpolar amb un polinomi, cal un polinomi de grau com a molt 2. És a dir, $p_2(x) = f_0 l_0(x) + f_1 l_1(x) + f_2 l_2(x)$. On,

$$\begin{aligned} l_0(x) =& \frac{(x - \pi/6)(x - \pi/2)}{(0 - \pi/6)(0 - \pi/2)} \\ l_1(x) =& \frac{(x - 0)(x - \pi/2)}{(\pi/6 - 0)(\pi/6 - \pi/2)} \\ l_2(x) =& \frac{(x - 0)(x - \pi/6)}{(\pi/2 - 0)(\pi/2 - \pi/6)} \end{aligned}$$

Amb la qual cosa, queda com a polinomi: $\frac{-3}{\pi^2}x^2 + \frac{7}{2\pi}x$.

Ara, si interpolem un punt interior, $0.866025 = f(\pi/3) \approx p_2(\pi/3) = 0.83332$. La diferencia o error és $|f(\pi/3) - p_2(\pi/3)| = \frac{1}{3!}|f^{(3)}(\zeta)||\pi/3 - 0||\pi/3 - \pi/6||\pi/3 - \pi/2|$. Coneixent que la tercera derivada del sinus és el cosinus i podem fitar per 1 i trobar una fita de l'error, la qual dona $\frac{\pi^3}{3 \cdot 6^3} = 0.047$.

Definició 6. Mètode de Newton (diferències dividides). Proposa trobar el polinomi interpoladro de la següent forma:

$$p_n(x) = C_0 + C_1(x - x_0) + C_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + C_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

Impossant que el polinomi $p_n(x)$ interpol·li els punts. Donant-nos un sistema triangular inferior:

$$\begin{aligned} & f_0 = p_n(x_0) = C_0 \\ & f_1 = p_n(x_1) = C_0 + C_1(x_1 - x_0) = p_1(x) \\ & f_2 = p_n(x_2) = C_0 + C_1(x_2 - x_0) + C_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = p_2(x) \\ & \ldots \\ & f_k = p_n(x_k) = C_0 + C_1(x_k - x_0)(x_2 - x_1) + \cdots + C_k(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1}) = p_k(x) \end{aligned}$$

Aleshores, deixant les C en funció de diferències dividides:

$$\begin{aligned} C_0 =& f_0 \\ C_1 =& \frac{(f_1 - f_0)}{(x_1 - x_0)} \\ & \ldots \\ C_k =& \frac{f_k - p_{k-1}(x_k)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})} \end{aligned}$$

Definició 7. Volem expressar les C_i en funció de les diferencies dividides que per definició $f[x_i] = f_i$. Per $0 \leq j \leq n-1$ i $0 \leq i \leq n-j$.

$$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+j}, x_{i+j+1}] = \frac{f[x_{i+1}, \cdots, x_{i+j+1}] - f[x_i, \cdots, x_j]}{x_{i+j+1} - x_i}$$

Aleshores, clarament $C_0 = f_0 = f[x_0]$ i $C_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = f[x_0, x_1]$. I aleshores, per C_2 fem:

$$C_2 = \frac{f_2 - p_1(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{f_2 - (f_0 + f[x_0, x_1](x_2 - x_0))}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} =$$

$$= \frac{\frac{f_2}{x_2 - x_1} - \frac{f_0}{x_2 - x_1} - \frac{f[x_0, x_1](x_2 - x_1)}{x_2 - x_1}}{x_2 - x_1} = \frac{\frac{f_2}{x_2 - x_1} - \frac{f_1}{x_2 - x_1} + \frac{f_1}{x_2 - x_1} - \frac{f_0}{x_2 - x_1} - f[x_0, x_1](x_2 - x_0}{x_2 - x_1} =$$

$$\frac{f[x_1, x_2] + \frac{f_1 - f_0 - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0}{x_2 - x_1}}{x_2 - x_1} = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = f[x_0, x_1, x_2]$$

I, així en general, es pot comprovar que $C_k = f[x_0, \cdots, c_k]$. Per tant,

$$p_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i)$$

Aleshores, apliquem el següent esquema per calcular les diferéncies:

1. Amb x_i, x_{i+1} i f_i, f_{i+1} es calcula $f[x_0, x_1]$.
2. Amb x_i, x_{i+2} i $f[x_i, x_{i+1}], f[x_{i+1}, x_{i+2}]$ es calcula $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$.
3. $\cdots$
4. Amb x_0, x_n i $f[x_0, \cdots, x_{n-1}], f[x_1, \cdots, x_n]$ es calcula $f[x_0, \cdots, x_n]$.

Nota 2. *Què passa quan afeim un punt més? En tal cas, podem aprofitar càlculs previs (cosa que no passa amb Laplace)*

Nota 3. *El coeficient de x^n és $C_n = f[x_0, \cdots, x_n]$.*

Exemple 4. Tenim els punts $(0, 0), (\pi/6, 1/2), (\pi/2, 1)$. Alehores, $f[x_0, x_1] = \frac{1/2 - 0}{\pi/6 - 0} = 3/\pi$ i $f[x_1, x_2] = \frac{1 - 1/2}{\pi/2 - \pi/6} = 3/(2\pi)$. Llavors, $f[x_0, x_1, x_2] = \frac{3/(2\pi) - 3/\pi}{\pi/2 - 0} = -\frac{3}{\pi^2}$. Per últim, $P_n(x) = 0 + 3/\pi(x - 0) - \frac{3}{\pi^2}(x - 0)(x - \pi/6) = -\frac{3}{\pi^2}x^2 + \frac{7}{2\pi}x$.

2.4 Cas particular: Abscisses equiespaiades

Tenim x_0 i h, aleshores, $x_i = x_0 + ih$. Definim l'operador diferència ordinària Δ per:

$$\Delta^0 f(x) = f(x)$$
$$\Delta^1 f(x) = f(x + h) - f(x)$$
$$\Delta^2 f(x) = \Delta f(x + h) - \Delta f(x) = f(x + 2h) - f(x + h) - [f(x + h) - f(x)] = f(x + 2h) - 2f(x + h) + f(x)$$
$$\vdots \quad \vdots$$

Llavors la relació entre les diferències dicidides Δ és:

$$\begin{aligned}
f[x_0] =& f_0 = \Delta^0 f(x_0) \\
f[x_0, x_1] =& \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{\Delta f(x_0)}{h} \\
f[x_0, x_1, x_2] =& \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{1}{2h}[\frac{\Delta f(x_1)}{h} - \frac{\Delta f(x_0)}{h}] = \frac{1}{2h}[\Delta f(x_0 + h) - \Delta f(x_0)] = \frac{1}{2!h^2}\Delta^2 f(x_0) \\
f[x_0, \cdots, x_k] =& \frac{1}{k!h^k}\Delta^k f(x_0)
\end{aligned}$$

I, per tant, el polinomi interpolador és:

$$P_n(x) = \Delta^0 f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{1!h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \cdots + \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!h^n}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})$$

Exemple 5. Tenim els punts $X = (1,2,3,4,5)$ i $f = (1,16,81,256,625)$ i $h = 1$. Llavors les $\Delta = (15,65,175,369)$, $\Delta^2 = (50,110,194)$, $\Delta^3 = (60,84)$ i $\Delta^4 = (24)$. Per últim:

$$P_4(x) = 1 + 15(x-1) + \frac{50}{2}(x-1)(x-2) + \frac{60}{6}(x-1)(x-2)(x-3) + \frac{24}{24}(x-1)(x-2)(x-3)(x-4) = x^4$$

Expressió del polinomi de Lagrange en el cas de xarxa equiespaiada: (Problema 5)

2.5 Interpolació inversa:

En aquest cas, coneixem $(x_k, f(x_k)) = (x_k, f_k)$, per $0 \leq 1 \leq n$ i volem resoldre l'equació $f(x) = c$. Per tal de tenir (una aproximació de) x, podem:

1. Trobar el polinomi interpolardor $p_n(x)$ i resoldre l'equació polinònmica $p_n(x) = c$.
2. O bé, suposem que f és invertible i calculem $x = g(c)$ amb $g = f^{-1}$. Aleshores, interpolem la taula $(f_i, x_i) = (y_i, g_i)$ per $0 \leq i \leq n$. Calculem el polinomi interpolador de $q_n(y)$ que aproxima g i prenem $x_{aprox} = q_n(r)$.

Exemple 6. Tenim els punts $x = (0,1,2,3)$ i $f = (0,1,4,9)$. Volem x tal que $f(x) = 2$.
1. El polinomi interpolador dona $P_3(x) = x^2$ i llavors solucionant $x^2 = 2$ tenim $x = \sqrt{2}$.
2. Calculant les $f[]$ resulten $(1, 1/3, 1/5)$, $(-1/6, -1/60)$ i $(1/60)$. i, per tant, $q_3(y) = 0 + 1(y-0) - \frac{1}{6}(y-0)(y-1) + \frac{1}{60}(y-0)(y-1)(y-2)$. L'aproximació final serà $q_3(2)$.

Abscisses de Txebyshev

Sabem que l'expressió de l'error en la interpolació és (E) i, per tant, si volem el màxim de la funció error a $[a,b]$:

$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - P_n(x)| = \max_{x\in[a,b]} \left\{ \frac{1}{(n+1)!} |f^{(n+1)}(x)| |(x-x_0)\cdots(x-x_n)| \right\} \leq$$
$$\leq \max_{x\in[a,b]} \left\{ \frac{1}{(n+1)!} |f^{(n+1)}(x)| \right\} \max_{x\in[a,b]} \{ |(x-x_0)\cdots(x-x_n)| \}$$

Pregunta P: Com triar $x_0, \cdots, x_n \in [a,b]$ de manera que $\max_{x\in[a,b]} |(x-x_0)\cdots(x-x_n)|$ sigui el mínim possible?

Veiem com: 1. Passem de $[a,b]$ a $[-1,1]$ fent: $\frac{x-a}{b-a} = \frac{y-(-1)}{2} \iff x = \frac{b-a}{2}y + \frac{a+b}{2}$, $x \in [a,b]$ i $y \in [-1,1]$.

El següent polinomi i les seves propietats ens serviran pel problema que vé a continuació:

Definició 8. Definim el polinomi de Txevishev de grau n com:

$$T_n(x) = \cos[n \arccos x]$$

Alguns valors: $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = \cos(\arccos x) = x$, $\cos(2\arccos) = \cos^2(\arccos x) - \sin^2(\arccos x) = x^2 - (1-\cos^2)(\arccos x) = 2x^2 - 1$, veiem que es compleix:

1. $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$ i $T_{n+1} = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$
2. El coeficient de x^n de $T_n(x)$ és 2^{n-1}.
3. $T_n(x)$, $n \geq 1$ té n zeros en $[-1,1]$ de la forma

$$x_k = \cos(\frac{2k+1}{n}\frac{\pi}{2}),\ 0 \leq k \leq n-1$$

4. $T_n(x)$ té $n+1$ extrems en $[-1,1]$ de la forma:

$$\bar{x_k} = \cos\frac{k\pi}{n},\ T_n(\bar{x_k}) = (-1)^k,\ 0 \le k \le n$$

Demostració.

1. Els primers valors ja els hem calculat. Ara, $T_{n+1}(x) = \cos[(n+1)\arccos(x)] = [\arccos(x) = \theta] = \cos n\theta\cos\theta - \sin n\theta \sin\theta = [\sin A \sin B = \frac{1}{2}[\cos(A-B) + \cos(A+B)]] = xT_n(x) - \frac{1}{2}\cos[(n-1)\theta] + \frac{1}{2}\cos[(n+1)\theta] = xT_n(x) - \frac{1}{2}T_{n-1}(x) + \frac{1}{2}T_{n+1}(x) \iff T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$
2. Per la pròpia recurrència, com que al inici comença amb 1,2,... I després es va multiplicant per 2, queda que el coeficient x^n es va multiplicant per 2, considerant el valor inicial, tenim que el valor general és 2^{n-1}.
3. $\cos[n \arccos x] = 0 \iff n\arccos x = \frac{\pi}{2} + kn = \frac{2k+1}{2}\pi \iff \arccos x = \frac{2k+1}{n}\frac{n}{2} \iff x_k = \cos(\frac{2k+1}{n}\frac{\pi}{2})$, per $0 \le k \le n-1$. Estan entre $[-1,1]$ pel propi cosinus.
4. En $(-1,1)$, $T_n'(x) = 0 \iff -\frac{n}{\sqrt{1-x^2}}\sin[n\arccos x] = 0 \iff \sin[n\arccos x] = 0 \iff n\arccos x = k\pi \iff x_k = \cos\frac{k\pi}{n}$ per $1 \le k \le n-1$. Afegim $x_0 = [k=0] = 1$ i $x_n = [k=n] = \cos\pi = -1$. Aquests punts tenen per valor: $T_n(x_k) = \cos[n\arccos(\cos\frac{k\pi}{n})] = \cos(n\frac{k\pi}{n}) = \cos(k\pi) = (-1)^k$.

□

Teorema 9. *La millor elecció dels punt $y_0, \cdots, y_n$ a $[-1,1]$ de manera que el max $|(y-y_0)\dots(y-y_n)|$ sigui el mínim vé donada per les arrels del polinomi de Txebyshev de grau $n+1$ i aquest màxim val $\frac{1}{2^n}$.*

Teorema 10. *Considerem tots els polinomis mònics, $P_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} a_i x^i$ ($a_{n+1} = 1$) i sigui $m = \max_{x\in[-1,1]}|P_{n+1}(x)|$. Llavors $\frac{T_{n+1}(x)}{2^n}$ és un polinomi de grau $n+1$, mónic, que fa mínim el valor de m. Es té qie*

$$\min_{P_{n+1}(x)} m = \min_{P_{n+1}(x)}\max_{x\in[-1,1]}|P_{n+1}(x)|\frac{1}{2^n}$$

Nota 7. *El teorema pre-anterior equival al anterior, només cal prendre $\frac{T_{n+1}(y)}{2^n} = (y-y_0)\cdots(y-y_n)$ amb $y_k = \cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi$, per $0 \le k \le n$.*

Demostració. Està clar que $\frac{T_{n+1}(x)}{2^n}$ és de grau $n+1$, mònic (per la propietat 2) i $\max_{[-1,1]}|\frac{T_{n+1}(x)}{2^n}| = \frac{1}{2^n}$ (per la propietat 4).

Suposem que existeix $P_{n+1}(x)$ mònic tal que $m = \max_{[-1,1]}|P_{n+1}(x)| < \frac{1}{2^n}$. Sigui $Q_n[x] = \frac{T_{n+1}(x)}{2^n} - P_{n+1}(x)$ de grau $\le n$. Ara evaluem aquest polinomi en $x_k = \cos\frac{k\pi}{n+1}$ per $0 \le k \le n+1$. Llavors $Q_n(x_k)0\frac{T_{n+1}(x_k)}{2^n} - P_{n+1}(x_k) = \frac{(-1)}{2^n} - P_{n+1}(x_k)$, ara per k parell $Q_n(x_k) > 0$ i per k parell $Q_n(x_k) > 0$ i per senar $Q_n(x_k) < 0$ llavors (com estan ordenats) existeixen $n+1$ arrels (com a mínim) de $Q_n(x)$ però això contradiu al fet que hem vist que era un polinimo de grau n, és a dir, no existeix un polinomi $P_{n+1}(x)$ diferent de 0. □

Retornant al nostre problema, tenim les $y_0, \dots, y_n$ adequat en $[-1,1]$ són $y_k = \cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi$ per $k = 0,\dots,n$, $y_k \in [-1,1]$. Els corresponents $x_0, \cdots, x_n$ respecte a la pregunta P en $[a,b]$ son $x_k = \frac{b-a}{2}\cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi + \frac{a+b}{2}$, per $k = 0,\dots,n$, $x_k \in [a,b]$. Es compleix que $\max_{x\in[a,b]}|\prod_{k=0}^n(x-x_k)| = \max_{x\in[a,b]}|\prod_{k=0}^n(x - (\frac{b-a}{2}\cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi + \frac{b+a}{2})) = \max_{y\in[-1,1]}|\prod_{k=0}^n\frac{b-a}{2}(y - \cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi)| = (\frac{b-a}{2})^{n+1}\max_{y\in[-1,1]}|\prod_{k=0}^n(y - \cos\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi)|$.

Resumint, l'error quan interpolem $f(x)$ per $P_n(x)$ prenent les abscisses de Txebysev en $[a,b]$ és

$$\max_{x\in[a,b]}|f(x) - P_n(x)| \le \frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}\frac{\max_{x\in[a,b]}|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!}$$

Exemple 8. Interpolem la funció $\sin x$ en $[-1,1]$ per un polinomi de grau 1, prenem les abscisses de Txebyshev.

i) Trobem una fita de l'error independent

Per $n=1$ prenem els zeros de $T_2(x)$: $x_0 = \cos\frac{1}{4}\pi = \frac{\sqrt{2}}{2}$, $f_0 = \sin\frac{\sqrt{2}}{2}$ i $x_1 = \cos\frac{3\pi}{4} = -\frac{\sqrt{2}}{2}$, $f_1 = -\sin\frac{\sqrt{2}}{2}$. Llavors el polinomi $P_1(x) = f_0 l_0(x) + f_1 l_1(x) = [\cdots] = \sqrt{2}\sin(\frac{\sqrt{2}}{2})x$.

ii) $\max_{[-1,1]}|\sin(x) - p_1(x)| \le \frac{1}{2}\frac{1}{2!}\max_{x\in[-1,1]}|f''(x)| = \frac{\sin 1}{4}$.

2.6 Interpolació d'Hermite

Volem un polinomi que coincideix amb la funció i la seva derivada en una xarxa de punts $(x_0, f_0), \cdots, (x_m, f_m)$ i $(x_0, f_0'), \cdots, (x_m, f_m')$.

Veiem que existeix un únic polinomi satisfent aquestes condicions que s'anomena polinomi d'Hermite, el denotem per $H_{m+1}(x)$ i s'expressa

$$H_{2m+1}(x) = \sum_{i=0}^{m} f_i \varphi_i(x) + \sum_{i=0}^{m} f_i' \psi_i(x)$$

Amb

$$\varphi_i(x) = [1 - 2li'(x_i)(x - x_i)]l_i^2, \; \psi(x) = (x - x_i)l_i^2(x)$$

On $l_i(x)$ és el polinomi de Lagrange

$$l_i(x) = \frac{\prod_{k \neq i}(x - x_k)}{\prod_{k \neq i}(x_i - x_k)}$$

En efecte, expressem $H_{2m+1}(x) = \sum_{i=0}^{m} h_i(x) f_i + \sum_{i=0}^{m} \bar{h_i}(x) f_i'$ on $h_i(x)$, $\bar{h_i}(x)$ són polinomis de grau $2m+1$ a determinar. Imposem (per $j = 0, \cdots, m$):

$$\begin{aligned} H_{2m+1}(x_j) &= f_j \\ H_{2m+1}'(x_j) &= f_j' \end{aligned}$$

que es compleix si

i) $h_i(x_j) = \delta_{ij}$, $\bar{h_i}(x_j) = 0$.

ii) $h_i'(x_j) = 0$, $\bar{h_i}'(x_j) = \delta_{ij}$.

Sabem que $l_i(x_j) = \delta_{ij}$, prenem $[l_i(x)]^2$ que és de grau $2m$ i satisfà $(l_i(x_j))^2 = \delta_{ij}$. Llavors, $([l_i(x)]^2)' = 2l_i(x)l_i'(x) \implies ([l_i(x)]^2)'_{|x_j} = 2l_i(x_j)l_i'(x_j) = 2l_i'(x_j)\delta_{ij}$.

Prenem, $h_i(x) = r_i(x)[l_i(x)]^2$, $\bar{h_i}(x) = s_i[l_i(x)]^2$ amb $r_i(x)$ i $s_i(x)$ polinomis de grau 1.

Cal que i), llavors

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= h_i(x_j) = r_i(x_j)[l_i(x_j)]^2 = r_i(x_i)\delta_{ij} \\ 0 &= \bar{h_i}(x_j) = s_i(x_j)[l_i(x_j)]^2 = s_i(x_i)\delta_{ij} \end{aligned}$$

Aleshores, de cada una treiem una condició diferent:

(A) $r_i(x_i) = 1$

(B) $s_i(x_i) = 0$

Per tal d'imposar ii):

$$\begin{aligned} h_i(x) &= r_i'(x)[l_i(x)]^2 + 2r_i(x)l_i(x)l_i'(x) \\ \bar{h_i}(x) &= s_i'(x)[l_i(x)]^2 + 2s_i(x)l_i(x)l_i'(x) \end{aligned}$$

Llavors,

$$\begin{aligned} 0 &= h_i(x_j) = r_i'(x_j)\delta_{ij} + 2r_i(x_j)l_i(x_j)l_i'(x_j) = \delta_{ij}[r_i'(x_i) + 2l_i'(x_i)] \\ \delta_{ij} &= \bar{h_i}(x_j) = s_i'(x_j)\delta_{ij} + 2s_i(x_j)\delta_{ij}l_i'(x_j) = \delta_{ij}[s_i'(x_i) + 2s_i(x_i)l_i'(x_i)] = \delta_{ij}[s_i'(x_i)] \end{aligned}$$

Se'n dedueixen dues condicions més

(A) $r_i(x_i) = 1$

(B) $s_i(x_i) = 0$

(C) $r_i(x_i) + 2l_i'(x_i) = 0$

(D) $s_i'(x_i) = 1$

Llavors tenim 2 condicions per cada un dels polinomis de grau 1, per tant, queden determinats. Obtenim (fent el polinomi o comprovant sabent la solució):

$$\begin{aligned} r_i(x) =& 1 - 2l_i(x_i)(x - x_i) \\ s_i(x) =& (x - x_i) \end{aligned}$$

Substituint $r_i(x), s_i(x)$ en (E) s'obtenen les $\varphi_i(x), \psi_i(x)$ que volíem.

Veiem ara que aquest polinomi interpolador és únic: Suposem que tenim 2 polinomis $P_1(x), P_2(x)$ de grau $2m+1$ que interpolem $\{(x_i, f_i), (x_i, f_i'), i = 0, \dots, m\}$. Prenem $Q(x) = P_1(x) - P_2(x)$ que satisfà (per $i = 0, \dots, m$):

$$\begin{aligned} Q(x_i) =& P_1(x_i) - P_2(x_i) = f_i - f_i = 0 \\ Q'(x_i) =& P_1'(x_i) - P_2'(x_i) = f_i' - f_i' = 0 \end{aligned}$$

$Q(x)$ té com a mínim les $m+1$ arrels $x_0, \cdots, x_m$ amb multiplicitat 2, llavors $Q(x)$ té com a mínim grau $2m+2$, contradicció perquè sabem que com a molt té grau $2m+1$.

2.6.1 Fórmula de l'error:

Suposem que $f \in \mathscr{C}^{2m+2}(I)$ tal que $x_k \in I$ (interval, $k = 0, \dots, m$), llavors $\forall x \in I$ es té

$$f(x) - H_{2m+1}(x) = \frac{f^{(2m+2)}(\zeta(x))}{(2m+2)!}(x - x_0)^2 \cdots (x - x_m)^2$$

on $\zeta(x) \in \langle x_0, \cdots, x_m, x \rangle$.

Demostració. Sigui $\phi(z) = f(z) - H_{2m+1}(z) - a(x)(z - x_0)^2 \cdots (z - x_m)^2$ amb $a(x)$ tal que $\phi(x) = 0$. es compleix:

1. ϕ s'anul·la en $m+2$ punts $x_0, \dots, x_m, x$.
2. Pel T.Rolle $\phi'(z)$ s'anul·la en $m+1$ punts $\zeta_1, \dots, \zeta_{m+1}$.
3. $\phi'(z) = f'(z) - H_{2m+1}'(z) - a(x)[(z - x_0)^2 \cdots (z - x_m)^2]'$
4. $\phi'(x_k) = f'(x_k) - H_{2m+1}'(x_k) - a(x)0 = 0$

és a dir, $\phi'(z)$ s'anul·la en $2m+2$ punts. Pel T.Rolle, $\phi''(z)$ s'anul·la en $2m+1$ punts. Successivament, ϕ^{2m+2}, s'anul·la en 1 punt $\zeta(x)$, és a dir,

$$\phi^{(2m+2)}(\zeta(x)) = 0 \iff f^{(2m+2)}(\zeta(x)) - 0 - a(x)(2m+2)! \iff a(x) = \frac{f^{(2m+2)(\zeta(x))}}{(2m+2)!}$$

De $\phi(x) = 0$ tenim que $f(x) - H_{2m+1}(x) - a(x)(x - x_0)^2 \cdots (x - x_m)^2 = 0$. Substituint $a(x)$:

$$f(x) - H_{2m+1}(x) = \frac{f^{(2m+2)(\zeta(x))}}{(2m+2)!}(x - x_0)^2 \cdots (x - x_m)^2$$

on $\zeta(x) \in \langle x_0, \cdots, x_m, x \rangle$. □

Nota 9. *A la pràctica, calcularem el polinomi d'Hermite am el mètode de les diferències dividides generalitzades. Observem que*

$$f[x_i, x_i] = \lim_{x \to x_i} f[x_i, x] = \lim_{x \to x_i} \frac{f(x) - f(x_i)}{x - x_i} = f'(x_i)$$

3 Bibliografia

1. *Càlcul numéric* de C.Bonet.
2. *Eines bàsiques de Càlcul numéric* de A.Aubanell i altres.
3. *Càlcul numèric* de M.Grau i altres.
4. *Numerical Analysis* de J.Stoer i altres.