Apunts de Càlcul numèric

Aleix Torres i Camps

Mercé Ollé, J.R.Pacha i Juan Sànchez

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. $\square$

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

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 2. *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:

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

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 3. *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:

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

$\square$

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 4. 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 5. 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:

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

Aleshores, deixant les C en funció de diferències dividides:

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

Definició 6. 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, $P_n(x) = 0 + 3/\pi(x-0) - \frac{3}{\pi^2}(x-0)(x-\pi/6) = -\frac{3}{\pi^2}x^2 + \frac{7}{2\pi}x$.

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.