

Capítol 3

Interpolació polinomial

Regresió lineal versus interpolació polinomial

Problema: Tenim dades referents a dues variables X i Y , és a dir $\{x_i, y_i\}$, $i = 0, \dots, n$. Suposem que $x_0 < x_1 < \dots < x_n$. Volem saber quin valor de la variable y hem **esperar** per un valor de $x = \zeta$, on $\zeta \in (x_0, x_n)$.

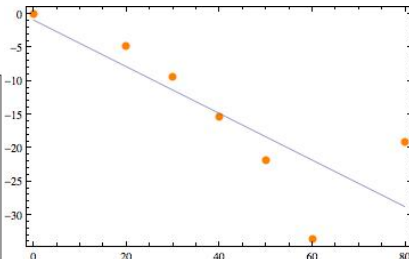
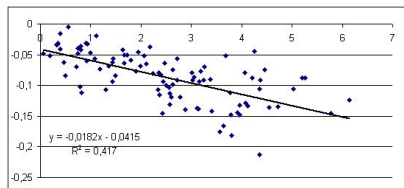
Exemple: Del punt de congelació d'un anticongelant (una solució de glicerina en aigua). Tenim una taula de valors del punt de congelació en graus Celsius (y), en funció de la concentració (%) de glicerina (x).

x	0	20	30	40	50	60	80
y	0	-4.8	-9.5	-15.4	-21.9	-33.6	-19.1

Volem estimar el punt de congelació si la concentració és del 45% (en pes). És a dir $y(\zeta)$ on $\zeta = 45$.

Regresió lineal (o quadràtica...)

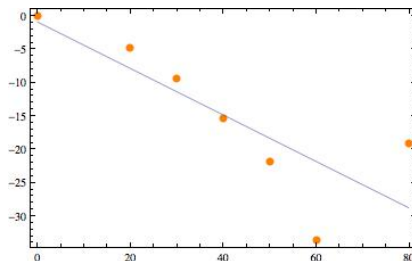
Una (possible) solució (especialment si les dades són moltes i tenen una component probabilística) és calcular la **recta de regressió**; és a dir la **millor** (en algun sentit de la paraula) **aproximació lineal** de les dades.



La **recta de regressió** minimitza la suma del quadrat dels errors comesos en cada node. La seva expressió és

$$y = \hat{a} + \hat{b}x, \quad \hat{b} = \frac{\sum_{i=0}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=0}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad \hat{a} = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}$$

Regresió lineal (o quadràtica...)



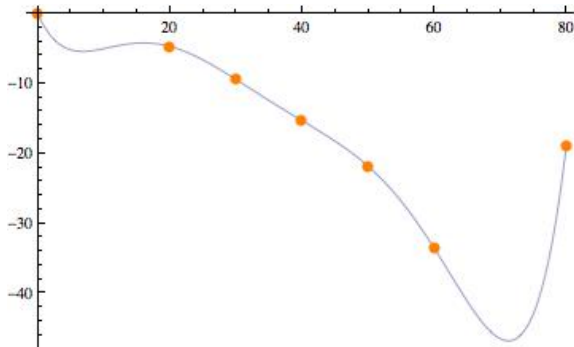
$$\bar{x} = 46.\bar{6} \quad \bar{y} = -17.38\bar{3} \quad \hat{b} = -0.329428571 \quad \hat{a} = -2.01$$

Així

$$y(\zeta = 45) = -2.01 - 0.329428571 \times 45 = -16.83428571.$$

Interpolació polinomial

Una segona solució és buscar un polinomi $p(x)$ que assoleixi exactament els valors de la taula i llavors fer $p(\zeta)$.



La solució d'interpolació

Càlcul del polinomi

Recordem que volem estimar el punt de congelació si la concentració és del 45% (en pes). Podem fer-ho **amb tots els punts de la taula** o bé **considerant els punts més propers**, per exemple els de la següent taula

x	30	40	50	60
y	-9.5	-15.4	-21.9	-33.6

Volem doncs $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$ tal que

$$p(30) = -9.5, \quad p(40) = -15.4, \quad p(50) = -21.9, \quad p(60) = -33.6.$$

Resolent el sistema lineal (amb incògnites a_0, a_1, a_2, a_3)

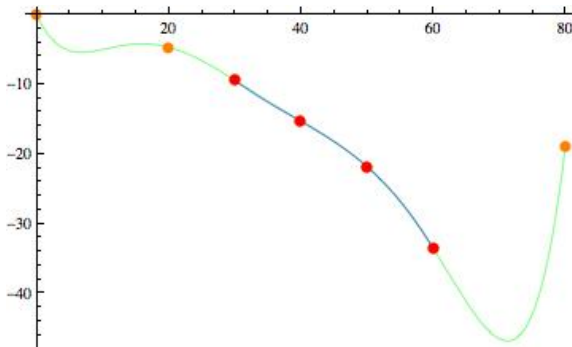
$$\begin{cases} a_0 + a_1 30 + a_2 30^2 + a_3 30^3 & = & -9.5 \\ a_0 + a_1 40 + a_2 40^2 + a_3 40^3 & = & -15.4 \\ a_0 + a_1 50 + a_2 50^2 + a_3 50^3 & = & -21.9 \\ a_0 + a_1 60 + a_2 60^2 + a_3 60^3 & = & -33.6 \end{cases}$$

obtenim $a_0 = 50.6$, $a_1 = -3.98\bar{3}$, $a_2 = 0.089$, $a_3 = -0.0007\bar{6}$.

Un exemple: l'anticongelant

Possible solució

$$p(\zeta = 45) \approx -18.3.$$



$$p(x) = 50.60 - 3.98\bar{3}x + 0.0890x^2 - 0.0007\bar{6}x^3$$

El polinomi interpolador

Teorema d'existència i unicitat

Teorema: Donats $n + 1$ punts $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, amb tots els nodes x_0, x_1, \dots, x_n diferents, existeix un únic polinomi $p_n(x)$ de grau menor o igual a n , tal que

$$p_n(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Demostració: Sigui

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$$

el polinomi buscat. Els seus $n + 1$ coeficients han de verificar el següent sistema lineal de $n + 1$ equacions:

$$\begin{cases} a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \dots + a_nx_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \dots + a_nx_1^n = y_1 \\ \dots \\ a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_nx_n^n = y_n \end{cases}$$

El polinomi interpolador

Teorema d'existència i unicitat (fi de la demostració)

El determinant del sistema és

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{\substack{i,j=0, \\ i>j}}^n (x_i - x_j) \neq 0.$$

Com Δ (s'anomena el **determinant de Vandermonde**) no és zero (hom pot demostrar-ho) el sistema d'equacions lineal plantejat és **compatible i determinat**.

Nota: Òbviament la demostració dona un primer algorisme de càlcul del polinomi interpolador, però ara veurem que hi ha una forma més eficient de calcular-lo ja que el sistema que cal resoldre és més senzill.

Algorismes de càlcul

Mètode alternatiu: Diferències dividides

La idea és expressar el polinomi interpolador dels nodes determinats per $\{(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)\}$ en la forma:

$$p_n(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + \dots + c_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) .$$

Tenim

$$y_0 = p_n(x_0) = c_0$$

$$y_1 = p_n(x_1) = c_0 + c_1(x_1 - x_0) = y_0 + c_1(x_1 - x_0)$$

$$y_2 = p_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$

...

$$y_n = p_n(x_n) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + \dots + c_n(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})$$

Algorismes de càlcul

Mètode alternatiu II: Diferències dividides

Trobar c_0, c_1, \dots, c_n és equivalent a resoldre el sistema lineal triangular $Ac = y$ on:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & (x_1 - x_0) & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \cdots & (x_n - x_0) \cdots (x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix}$$

$$c^T = (c_0 \quad c_1 \quad \cdots \quad c_n) \quad \text{i} \quad y^T = (y_0 \quad y_1 \quad \cdots \quad y_n)$$

Per tant si resollem s'obté:

$$c_0 = y_0, \quad c_1 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}, \quad c_2 = \frac{\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} - \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}, \dots$$

Algorismes de càlcul

Mètode de les diferències dividides de Newton

12

Per calcular els c_j 's no resol·drem el sistema sino que construirem el següent esquema (anomenat **diferències dividides**)

$$\begin{array}{l|l}
 x_0 & f[x_0] = y_0 = c_0 \\
 & f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = c_1 \\
 x_1 & f[x_1] = y_1 \\
 & f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} \\
 & f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = c_2 \\
 x_2 & f[x_2] = y_2 \\
 \vdots & \vdots \\
 \vdots & \vdots \\
 \vdots & f[x_{n-1}, x_n] = \frac{f[x_n] - f[x_{n-1}]}{x_n - x_{n-1}} \\
 x_n & f[x_n] = y_n
 \end{array}
 \quad \dots$$

Llavors: $c_j = f[x_0, x_1, \dots, x_j]$ per $j = 0, 1, \dots, n$

Algorismes de càlcul

Mètode de les diferències dividides (Exemple)

Exemple: Considerem la taula de valors d'una funció f

x	30	40	50	60
y	-9.5	-15.4	-21.9	-33.6

Volem aproximar $f(45)$ usant un polinomi de grau 3.

- La taula de les diferències dividides és

30	-9.5			
		$\frac{-15.4+9.5}{40-30} = -0.59$		
40	-15.4		$\frac{-0.65+0.59}{50-30} = -0.003$	
		$\frac{-21.9+15.4}{50-40} = -0.65$		$\frac{-0.026+0.003}{60-30} = -0.00076$
50	-21.9		$\frac{-1.17+0.65}{60-40} = -0.026$	
		$\frac{-33.6+21.9}{60-50} = -1.17$		
60	-33.6			

Algorismes de càlcul

Mètode de les diferències dividides (Exemple)

14

- El polinomi interpolador $p_3(x)$ és

$$\begin{aligned} p_3(x) = & -9.5 - 0.59(x - 30) \\ & -0.003(x - 30)(x - 40) \\ & -0.00076(x - 30)(x - 40)(x - 50) . \end{aligned}$$

- Finalment: $f(45) \approx p_3(45) = -18.2875$.

Algorismes de càlcul

Últims comentaris

15

Resumint:

- Tenim $n + 1$ dades $\{x_i, y_i\}$, $i = 0, \dots, n$ i busquem un polinomi de grau n que les satisfaci, és a dir que compleixi $p(x_i) = y_i$ per a tota i .
- El polinomi p és únic i s'anomena **polinomi interpolador**.
- Tenim dos formes de calcular-ho (directe o **diferencials dividides**) tot i que la més eficient és aquesta última. Hi ha un mètode alternatiu que s'anomena **Polinomis de Lagrange** però no afegeix cap avantatge en el nostre context.

Pregunta: Un cop tenim el polinomi interpolador $p(x)$, com l'avaluem de forma eficient? És a dir com calcular $p(\zeta)$ fent el número mínim d'operacions?

Resposta: L'Algorisme de Horner.

Algorisme de Horner

Cas I

10

Suposem que $q(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n$. Llavors és possible escriure el polinomi com:

$$q(x) = (\dots (a_nx + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \dots + a_3)x + a_2)x + a_1)x + a_0.$$

Conseqüentment ([Algorisme de Horner](#)):

- Lectura $\rightarrow \{n, (a_i, i = 0, \dots, n), \zeta\}$.
- $q = a_n$.
- Per a $k = n - 1, \dots, 0$ fem $q \leftarrow q \times \zeta + a_k$.
- Escriu q .

Error de la interpolació

Filosofia

17

- Suposem que les dades/nodes $\{x_i, y_i\}$, $i = 0, \dots, n$ responen a una funció f . Les dades responen a una llei.
- És a dir, tot i que NO coneixem f (o és massa complicada la seva expressió), sabem que existeix i, òbviament compleix $f(x_i) = y_i$, $i = 0, \dots, n$.
- Suposem que f és regular (admet derivades dels ordres que siguin necessaris).

Llavors quan calculem $p_n(x)$ el polinomi interpolador de f tenim:

- L'error és zero en els nodes; és a dir $p_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, \dots, n$.
- Però en general $p_n(x) \neq f(x)$ per $x \neq x_i$.

Podem donar una aproximació de l'error comès?

Error de la interpolació

Matemàtiques: Un teorema sobre l'error

Teorema: Sigui f una funció que té les seves $n + 1$ derivades contínues en l'interval $[a, b]$, i sigui M_{n+1} una cota superior de $|f^{(n+1)}(x)|$ a l'interval $[a, b]$.

Sigui p_n el polinomi interpolador de f en $(n + 1)$ nodes $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ donats, de forma que $p_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$.

Llavors, per a tot $x \in [a, b]$ existeix un $\xi_x \in [a, b]$ tal que

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

En particular com $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ tenim que

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |(x - x_0) \cdots (x - x_n)|$$

Error de la interpolació

Comentaris

- 1 L'error en els nodes d'interpolació és zero.
- 2 Si $f(x)$ és un polinomi de grau n , l'error és zero.

- 3 **Acotació general:**

Si $a = x_0 \leq x_1 \leq \dots \leq x_n = b$, i $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ per tot $x \in [a, b]$, llavors:

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} (b-a)^{n+1}.$$

- 4 **Acotació particular (nodes equiespaiats):**

Si $x_i = x_0 + i \cdot h$ per $i = 0, 1, \dots, n$, amb $h = \frac{(b-a)}{n}$, i $|f^{(n+1)}(x)| \leq M_{n+1}$ per tot $x \in [a, b]$, llavors:

$$|f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{4(n+1)} \left(\frac{b-a}{n} \right)^{n+1}.$$

Error de la interpolació

Exemple

Exemple: Interpolem les funcions sinus i cosinus a l'interval $[0, \frac{\pi}{2}]$ per un polinomi de grau 6, emprant nodes equiespaiats. Quin és l'error de truncament?

Solució: Tant per $f(x) = \sin x$ com $f(x) = \cos x$, podem acotar la derivada setena per 1. Llavors, per qualsevol punt $x \in [0, \frac{\pi}{2}]$, podem acotar l'error de truncament per

$$|f(x) - p_6(x)| \leq \frac{1}{4 \cdot 7} \left(\frac{\pi/2}{6} \right)^7 \leq 3.02 \cdot 10^{-6}.$$

Exercici: Quants nodes equiespaiats (i grau del polinomi interpolador) necessitaríem per què l'error de truncament en qualsevol punt de $[0, \frac{\pi}{2}]$ fos més petit que 10^{-10} ?

Resposta: 11 nodes (grau 10). Doncs el valor de $\frac{1}{4(n+1)} \left(\frac{\pi}{2n} \right)^{(n+1)}$ per a $n = 9$ és de l'ordre de 10^{-9} i el de $n = 10$ és 0.3×10^{-10} .

Interpolació d'Hermite

21

Considerem ara el problema on per una certa funció f conexiem la següent informació en els nodes x_i , $i = 0, \dots, n$:

$$\left(\begin{array}{l} x_0 \longrightarrow f(x_0), f'(x_0), \dots, f^{(m_0)}(x_0) \\ x_1 \longrightarrow f(x_1), f'(x_1), \dots, f^{(m_1)}(x_1) \\ \vdots \\ x_n \longrightarrow f(x_n), f'(x_n), \dots, f^{(m_n)}(x_n) \end{array} \right)$$

Volem trobar un polinomi interpolador que compleixi totes aquestes dades, és a dir

$$p^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i)$$

a tot arreu on tenim aquesta informació.

Interpolació d'Hermite

Exemple (i solució)

Tenim la següent taula:

x_i	$x_0 = 0$	$x_1 = 1$	$x_2 = -1$
f	0	0	-1
f'	1	1	
f''	-1		

Com tenim 6 dades haurem de buscar un polinomi de grau 5:

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5$$

$$p'(x) = a_1 + 2a_2x + 3a_3x^2 + 4a_4x^3 + 5a_5x^4$$

$$p''(x) = 2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + 20a_5x^3$$

Ara imposen totes les condicions que tenim:

$$p(0) = p(1) = 0, \quad p(-1) = -1, \quad p'(0) = p'(1) = 1, \quad p''(0) = 0.$$

Interpolació d'Hermite

Exemple (i solució)

Resolem doncs el sistema d'equacions lineals:

$$p(0) = 0 \mapsto a_0 = 0$$

$$p(1) = 0 \mapsto a_0 + a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 0$$

$$p(-1) = -1 \mapsto a_0 - a_1 + 2a_2 - a_3 + a_4 - a_5 = -1$$

$$p'(0) = 1 \mapsto a_1 = 1$$

$$p'(1) = 1 \mapsto a_1 + 2a_2 + 3a_3 + 4a_4 + 5a_5 = 1$$

$$p''(0) = 0 \mapsto 2a_2 = 0$$

$$a_0 = 0 \quad a_1 = 1 \quad a_2 = 0 \quad a_3 = -\frac{9}{4} \quad a_4 = -\frac{1}{2} \quad a_5 = \frac{7}{4}$$

Nota: Hi ha una modificació del mètode de les diferències dividides que permet calcular més eficientment el polinomi d'Hermite. Ho explicarem a classe directament de l'exemple.

Fenomen de Runge

Un fet sorprenent

Pregunta: És cert que l'aproximació del polinomi interpolador millora a l'augmentar el nombre de nodes (i per tant el grau de p_n)?

Exemple (C. Runge(1901)) Sigui $p_n(x)$ el polinomi interpolador de la funció

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \quad x \in [-1, 1].$$

en els punts equiespaiats $x_i = -1 + \frac{2i}{n}$, $i = 0, 1, \dots, n$.

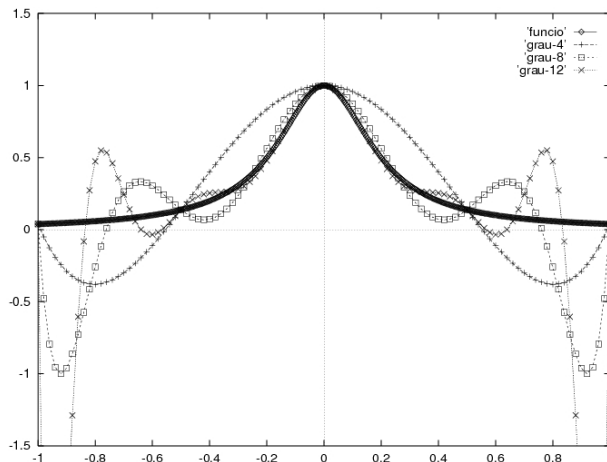
Llavors, si $0.73 \leq |x| < 1$, $\sup_{n \geq 0} |f(x) - p_n(x)| = \infty$.

És a dir l'error prop de l'origen és petit, però prop de -1 i 1 augmenta amb n .

Fenomen de Runge

Gràfiques

25



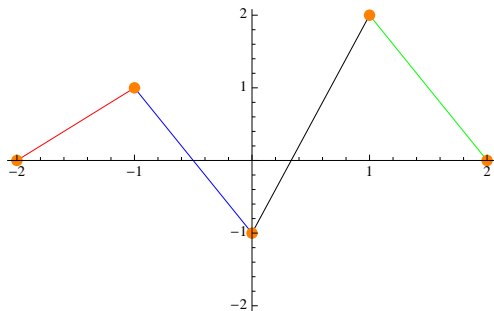
A la figura hi ha representats la funció $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ i els seus polinomis d'interpolació de graus 4, 8 i 12.

Interpolació per Splines

Filosofia del mètode

Hem vist que augmentar el nombre de punts i buscar un polinomi de grau cada cop més gran no és pas una bona idea.

Una alternativa és buscar una **mall** de polinomis de grau baix que assoleixin punts consecutius de les dades i **imposar algunes condicions de regularitat a la funció global**.



Un exemple (qualitatiu) de **Spline Lineal** és el que mostra la figura **Spline Lineal**. Entre dos nodes es proposa un polinomi de grau 1 (una recta

Interpolació per Splines

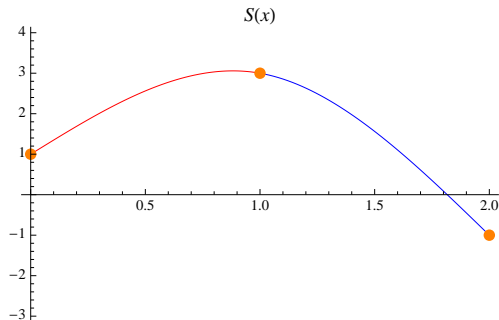
Splines Cúbics

De tots els Splines el més conegut és el **Spline Cúbic**.

$$\{x_i, y_i = f(x_i)\}, \quad a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b$$

volem construir una funció $S : [a, b] \in \mathbb{R}$ tal que:

- $S|_{x \in [x_i, x_{i+1}]} := s_i(x)$ és un polinomi de grau ≤ 3 .
- S és dues vegades derivable a tot l'interval (a, b) .



Interpolació per Splines

Splines Cúbics

Observem que:

- Número de **coeficients a determinar**: $4 \times n = 4n$ ja que tenim 4 coeficients per cadascun dels n polinomis de grau 3 que construïm.
- Número de **condicions** que imposem:
 - Node inicial i final: 2 condicions.
 - Continuitat en els nodes interiors: $2 \times (n - 1)$ condicions.
 - Derivades primeres en els nodes interiors: $n - 1$ condicions.
 - Derivades segones en els nodes interiors: $n - 1$ condicions.

Total número de condicions: $2 + 2(n - 1) + (n - 1) + (n - 1) = 4n - 2$.

Tenim dos graus de llibertat!! $(4n - (4n - 2)) = 2$

Interpolació per Splines Cúbics

Condicions de tancament

Hi ha tres tipus (universals) de condicions de tancament per fixar els coeficients lliures dels splines cúbics.

- **Clamped (o extrems d'Hermite):**

$$S'(x_0) = f'(x_0) \text{ i } S'(x_n) = f'(x_n)$$

- **Free (o extrems naturals):**

$$S''(x_0) = S''(x_n) = 0$$

- **Periòdiques** (només si es compleix que $f(x_0) = f(x_n)$):

$$S'(x_0) = S'(x_n) \text{ i } S''(x_0) = S''(x_n)$$

Interpolació per Splines Cúbics

Exemple

Considerem la taula

x_i	$x_0 = 0$	$x_1 = 1$	$x_2 = 2$
f	1	3	-1

Per tant volem escriure la funció $S(x)$ a l'interval $[0, 2]$ de forma que $S|_{x \in [0,1]} := s_1(x)$ i $S|_{x \in [1,2]} := s_2(x)$ siguin polinomis de grau ≤ 3 :

$$s_1(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3$$

$$s_2(x) = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3$$

Les condicions que imposen són les següents:

- Node inicial i final: $a_0 = 1$ i $b_0 + 2b_1 + 4b_2 + 8b_3 = -1$.
- Continuitat en els nodes interiors ($x_1 = 1$): $a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 3$
i $b_0 + b_1 + b_2 + b_3 = 3$.
- Derivades primeres en els nodes interiors ($x_1 = 1$):
 $a_1 + 2a_2 + 3a_3 = b_1 + 2b_2 + 3b_3$
- Derivades segones en els nodes interiors ($x_1 = 1$):
 $2a_2 + 6a_3 = 2b_2 + 6b_3$

Interpolació per Splines Cúbics

Exemple

I el sistema que hem resoldre és (usarem condicions de **tancament naturals**):

$$a_0 = 1$$

$$b_0 + 2b_1 + 4b_2 + 8b_3 = -1$$

$$a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 3$$

$$b_0 + b_1 + b_2 + b_3 = 3$$

$$a_1 + 2a_2 + 3a_3 - (b_1 + 2b_2 + 3b_3) = 0$$

$$2a_2 + 6a_3 - (2b_2 + 6b_3) = 0$$

$$2a_2 = 0$$

$$2b_2 + 12b_3 = 0$$

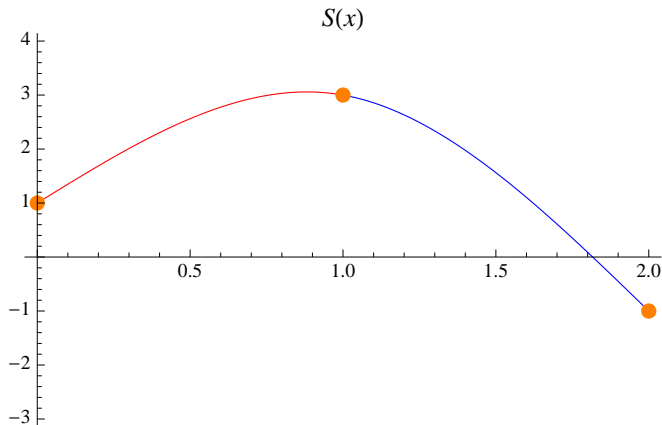
Les solucions són:

$$a_0 = 1, a_1 = 7/2, a_2 = 0, a_3 = -3/2$$

$$b_0 = -2, b_1 = 25/2, b_2 = -9, b_3 = 3/2$$

Interpolació per Splines Cúbics

Exemple



Derivació i integració numèrica

Introducció

Volem calcular la derivada d'una funció f en un punt $a \in \mathbb{R}$ o la integral de f en un interval $[a, b]$:

$$f^{(k)}(a) \qquad \int_a^b f(x) dx$$

Problema/Dificultat

- Tenim l'expressió de f , però és molt complicada; o
- No tenim l'expressió de f , però sí una recepta per avaluar-la; o
- Tenim una tabulació de f , que prové, per exemple, de dades experimentals.

Solució

$$f^{(k)}(a) \approx P_n^{(k)}(a) \qquad \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_n(x) dx$$

on $P_n(x)$ és el **polinomi interpolador** de grau n (a escollir) passant per $n + 1$ nodes (a escollir).

Capítol 4 (Part I)

Derivació numèrica

Derivació numèrica

Introducció

Comencem per aproximar $f'(a)$ (al final direm alguna cosa sobre derivades d'ordre superior, però filosòficament és el mateix). Dues consideracions:

(I) Suposem que f és derivable en a .

$$\text{Si } f'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \longrightarrow f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}, \quad h \approx 0.$$

Sembla doncs una alternativa considerar la **fórmula** de la dreta fent ús de **h molt petites**. Veurem que això no és el cas degut als **errors de cancel·lació**, i que cal buscar alternatives.

Derivació numèrica

Introducció

- (II) Recordem la fórmula de l'error del polinomi interpolador
($x \in \langle x_0, \dots, x_n \rangle$)

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1}(\eta_x)}{(n+1)!} w_n(x), \quad w_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

Per tant

$$f'(x) - (P_n)'(x) = \frac{d}{dx} \left(\frac{f^{n+1}(\eta_x)}{(n+1)!} \right) w_n(x) + \frac{f^{n+1}(\eta_x)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} (w_n(x)).$$

Llavors si $a \in \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ tenim que

$$f'(a) - (P_n)'(a) = \frac{f^{n+1}(\eta_a)}{(n+1)!} \frac{d}{dx} (w_n(x))|_{x=a}.$$

Fórmules de derivació numèrica

Diferències finites

(A) Diferència finita endavant (primer ordre: $f'(a)$)

Nodes: $\{x_0 = a, x_1 = a + h\}$. Polinomi interpolador (exercici):

$$P_1(x) = f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x - a) \rightarrow f'(a) \approx (P_1)'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

Error: Mirem a la fórmula general i substituïm:

$$f'(a) - (P_1)'(a) = \frac{f''(\eta_a)}{2!} (w_1)'(a) = -\frac{f''(\eta_a)}{2!} h$$

on la segona igualtat surt de derivar $w_1(x) = (x - a)(x - (a + h))$ respecte de x i avaluant en $x = a$. **Finalment:**

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\eta_a)}{2!} h, \quad \eta_a \in \langle a, a + h \rangle.$$

Fórmules de derivació numèrica

Diferències finites

(B) Diferència finita endarrere (primer ordre: $f'(a)$)

Nodes: $\{x_0 = a, x_1 = a - h\}$. Polinomi interpolador (exercici):

$$P_1(x) = f(a) + \frac{f(a) - f(a-h)}{h}(x-a) \rightarrow f'(a) \approx (P_1)'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

Error: Mirem a la fórmula general i substituïm:

$$f'(a) - (P_1)'(a) = \frac{f''(\eta_a)}{2!} (w_1)'(a) = \frac{f''(\eta_a)}{2!} h$$

on la segona igualtat surt de derivar $w_1(x) = (x-a)(x-(a-h))$ respecte de x i avaluant en $x = a$. **Finalment:**

$$f'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + \frac{f''(\eta_a)}{2!} h, \quad \eta_a \in \langle a-h, a \rangle.$$

Fórmules de derivació numèrica

Diferències finites

(C) Diferència finita centrada (primer ordre: $f'(a)$)

Nodes: $\{x_0 = a - h, x_1 = a, x_2 = a + h\}$. Polinomi interpolador:

$$P_2(x) = f(a-h) + \frac{f(a) - f(a-h)}{h}(x - (a-h)) + \\ + \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)}{2h^2}(x - (a-h))(x - a)$$

Fent càlculs s'obté

$$f'(a) \approx (P_2)'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

Error:

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\eta_a)}{3!}h^2, \quad \eta_a \in \langle a-h, a+h \rangle.$$

Fórmules de derivació numèrica

Diferències finites per $f'(a)$

Resumint, per calcular numèricament $f'(a)$ hem trobat tres fórmules

1 Diferència finita endavant

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\eta_a)}{2!}h, \quad \eta_a \in \langle a, a+h \rangle.$$

2 Diferència finita endarrere

$$f'(a) = \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + \frac{f''(\eta_a)}{2!}h, \quad \eta_a \in \langle a-h, a \rangle.$$

3 Diferència finita centrada

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - \frac{f'''(\eta_a)}{3!}h^2, \quad \eta_a \in \langle a-h, a+h \rangle.$$

Fórmules de derivació numèrica

Diferències finites

(D) Diferència finita centrada (segon ordre; $f''(a)$)

Nodes: $\{x_0 = a - h, x_1 = a, x_2 = a + h\}$. Polinomi interpolador:

$$P_2(x) = f(a-h) + \frac{f(a) - f(a-h)}{h}(x - (a-h)) + \\ + \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^2}(x - (a-h))(x - a)$$

Fent càlculs s'obté

$$f''(a) \approx (P_2)''(a) = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}.$$

Error: s'estima fent servir el mateix argument anterior (i un polsím de desenvolupament de Taylor...).

$$f''(a) = \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)}{h^2} + \frac{1}{12}f^{(4)}(\eta_a)h^2, \quad \eta_a \in \langle a-h, a+h \rangle.$$

Exemple 1

10

Exemple: Volem calcular la derivada de $f(x) = \sin(x^2)$ al punt $x_0 = 0.5$, (**ups! i no recordem la fórmula de derivació analítica!!**).

Per exemple si prenem $h = 1.e-6$, obtenim (operant amb precisió doble):

$$f'(x_0) \approx 0.968913266924387 \quad (\text{endavant})$$

$$f'(x_0) \approx 0.968911576471054 \quad (\text{endarrere})$$

$$f'(x_0) \approx 0.968912421697721 \quad (\text{centrada})$$

Nota: $f'(x_0) = 0.968912421710645$.

Exemple 2: Usain Bolt als 100m

L'any 2009 (a Berlín), el velocista **Usain Bolt** va situar el record dels 100m en 9.58s. Les dades de la carrera són les següents

x	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
t(x)	0	1.85	2.89	3.78	4.64	5.49	6.31	7.11	7.92	8.74	9.58

on la primera fila (x) és la distància recorreguda en metres i la segona (t) el temps emprat en segons

(font: NBC, <http://www.universalsports.com/news/article/newsid=385633.html>).

Problema: Volem una aproximació de la **velocitat (mitjana)** i **l'acceleració (mitjana)** en diferents intervals de la carrera, és a dir volem estimar:

$$v = \frac{dx}{dt}, \quad a = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2},$$

Exemple 2: Usain Bolt als 100m

Amb derivació numèrica cap endarrere

$$v(t_i) = \frac{dx}{dt}(t_i) \approx \frac{x(t_i) - x(t_i - h)}{h}, \quad 0 < i \leq 10, \quad h = 10$$

obtindrem la taula de **velocitats (en m/s)** a temps t_i (o a distància r_i).

Igualment, utilitzant derivació numèrica cap endarrere sobre la taula de velocitats que acabem d'obtenir,

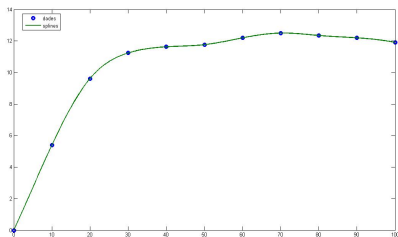
$$a(t_i) = \frac{dv}{dt}(t_i) \approx \frac{v(t_i) - v(t_i - h)}{h}, \quad 0 < i \leq 10, \quad h = 10$$

obtindrem la taula **d'acceleracions (en m/s²)** a temps t_i (o a distància x_i).

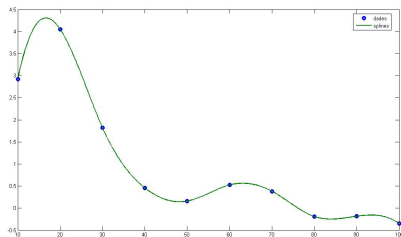
Exemple 2: Usain Bolt als 100m

19

t	0.000	1.850	2.890	3.780	4.640	5.490	6.310	7.110	7.920	8.740	9.580
x	0.000	10.000	20.000	30.000	40.000	50.000	60.000	70.000	80.000	90.000	100.000
v	0.000	5.405	9.615	11.236	11.628	11.765	12.195	12.500	12.346	12.195	11.905
a		2.922	4.048	1.821	0.456	0.161	0.525	0.381	-0.191	-0.184	-0.346



Gràfica de la velocitat



Gràfica de l'acceleració

Errors d'arrodoniment i truncament

Càlcul d'un pas **òptim**

Problema numèric: En les fórmules de derivació numèrica que hem trobat

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\eta_a)}{2!}h, \quad \eta_a \in \langle a, a+h \rangle \quad (\text{per exemple})$$

sembla intuïtiu que, quan més petit agafem el pas, millor aproximació tindrem de $f'(a)$. No obstant aquí teniu una taula del càlcul aproximat de $f'(1.5)$ per $f(x) = x \cos x$ i diferents valors de h cada cop més petits (diferència finita endavant).

h	f'(1.5)	e_a
1e-1	-1.528250381836	1e-1
1e-2	-1.435989186028	1e-2
1e-4	-1.425610330887	1e-4
1e-7	-1.425505384151	1e-7
1e-8	-1.425505279096	1e-10
1e-9	-1.425505394281	1e-7
1e-12	-1.425637385921	1e-4

Errors d'arrodoniment i truncament

Càlcul d'un pas **òptim**

Estudi de les cancel·lacions: Suposem que quan evaluem la funció f en un punt cometem un error però que aquest error és sempre més petit que ε . Aleshores:

$$\begin{aligned} \left| f'(a) - \frac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h} \right| &= \left| f'(a) - \frac{f(a+h) + e_1 - f(a) - e_2}{h} \right| \leq \\ &\leq \left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| + \left| \frac{e_2 - e_1}{h} \right| \leq \frac{M}{2}h + \frac{2\varepsilon}{h}, \end{aligned}$$

on $M = \max_{x \in (a, a+h)} |f''(x)|$. I ara **minimitzem** per trobar la h òptima

$$h^{\text{op}} = \left(\frac{4\varepsilon}{M} \right)^{1/2}.$$

En el nostre exemple anterior tenim que $M = 2$, i si treballem amb precisió doble $\varepsilon < \frac{1}{2} \times 10^{-16}$. Per tant

$$h^{\text{op}} = \left(\frac{4 \times \frac{1}{2} \times 10^{-16}}{2} \right)^{1/2} \approx 10^{-8}.$$

Extrapolació de Richardson

Introducció

10

Segons hem vist el càlcul numèric de derivades es redueix a estimar un límit de la forma

$$F_0 = \lim_{h \rightarrow 0} F(h)$$

per una certa funció $F(h)$. Però ja hem vist que prendre valors de h **arbitràriament petits** no és pas una bona estratègia degut a la potencial cancel·lació de termes.

Problema: Com podem millorar les estimacions, sense fer h massa petit?

Extrapolació de Richardson

Plantejament

Suposem que tenim una fórmula d'integració numèrica:

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{f''(\eta_a)}{2!}h, \quad \eta_a \in \langle a, a+h \rangle \quad (\text{per exemple})$$

De fet podríem escriure-la com

$$F(h) = f'(a) + a_1 h + a_2 h^2 + \dots \quad (1)$$

Proposició: Suposem la fórmula derivació numèrica (1). Definim

$$\begin{aligned} F_1(h) &= F(h), \\ F_{j+1}(h) &= F_j(h) + \frac{F_j(h) - F_j(h/2)}{(1/2)^j - 1}. \end{aligned}$$

Llavors $F_n(h) = f'(a) + b_n h^n + \dots$ (i és un mètode millor)

Extrapolació de Richardson

Exemple d'aplicació

Exemple: Volem calcular numèricament el valor de $f'(0.5)$ per a la funció $f(x) = \sin(x^2)$ utilitzant la fórmula de derivació numèrica cap endavant ($f'(0.5) = 9.689124217106447e-01$).

$$F(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \approx f'(0.5)$$

Considerem tres valors de h :

$$h = 1.e-03, \quad h/2 = 0.5e-03, \quad h/4 = 0.25e-03$$

i obtenim

- $F(1.e-3) = 9.697572226650484e-01$
- $F(0.5e-3) = 9.693349246344281e-01$
- $F(0.25e-3) = 9.691236987561548e-01$

Tenim 3 xifres significatives. Ara en comptes de rebaixar la h apliquem **Richardson**.

Extrapolació de Richardson

Exemple d'aplicació

Recordem que $F_1(h) = F(h)$. I ara volem calcular

$$F_2(h) = F_1(h) + \frac{F_1(h) - F_1(h/2)}{(1/2) - 1}.$$

- $F_2(1.e-3) = 9.689126266038077e-01$
- $F_2(0.5e-3) = 9.689124728778815e-01$

Tenim 6 xifres significatives.

I encara podem calcular

$$F_3(h) = F_2(h) + \frac{F_2(h) - F_2(h/2)}{(1/2)^2 - 1}.$$

- $F_3(1.e-3) = 9.689124216359061e-01$

que té 9 xifres significatives correctes!!

Integració numèrica

Integració numèrica

Introducció

23

Problema: Volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, dx$$

però

- Tenim l'expressió de f , però **no sabem com calcular explícitament una primitiva**; o
- **No tenim l'expressió de f** , però sí una recepta per avaluar-la; o
- Tenim una tabulació de f , que prové per exemple de **dades experimentals**.

Llavors, com hem avançat, podem aproximar la integral mitjançant

$$I(f, a, b) = \int_a^b P_n(x) \, dx \approx \int_a^b f(x) \, dx$$

on P_n és un polinomi interpolador d'un cert grau.

Integració numèrica

Observació important

22

En general quan volguem calcular una integral del tipus

$$\int_a^b f(x) \, dx$$

el que farem és trossejar l'interval $[a, b]$ en $m + 1$ trossos $a = y_0 < y_1 < \dots < y_{m-1} < y_m = b$. Llavors escriurem

$$\int_a^b f(x) \, dx = \int_{y_0}^{y_1} f(x) \, dx + \int_{y_1}^{y_2} f(x) \, dx + \dots + \int_{y_{m-1}}^{y_m} f(x) \, dx.$$

i calcularem numèricament cadascuna de les integrals aproximant la funció f per un polinomi interpolador **convenient** en cadascun dels intervals $[y_j, y_{j+1}]$ (**fórmules compostes**).

Integració numèrica

Observació important

Ara per ara, però, suposarem que volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx I(f, a, b) = \int_a^b P_n(x) \, dx \quad (P_n(x) \text{ Polinomi Interpolador})$$

Fem una partició de l'interval (fixem els nodes per interpolar la funció f a l'interval $[a, b]$): $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$. Per tal d'optimitzar els càlculs escollirem intel·ligentment quins i quants nodes. Segons aquesta tria tindrem un mètode d'integració numèrica o un altre.

Més concretament es pot argumentar (polinomis de Lagrange) que

$$I(f, a, b) = \sum_{i=0}^n A_i f_i, \quad \text{on} \quad f_i = f(x_i) \quad \text{i} \quad A_i = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Observeu que la integral d'un polinomi és trivial!!

Integració numèrica

Fórmules tancandes de Newton-Côtes

Lemma (tria de quins i quants): Si a l'interval $[a, b]$ agafem els nodes **equiespaiats**, és a dir prenem $x_i = a + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$ amb $h = \frac{b-a}{n}$ llavors

$$I(f, a, b) = h \sum_{i=0}^n \alpha_i^{(n)} f(a + ih), \quad \text{on} \quad \alpha_i^{(n)} = \int_0^n \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{t-j}{i-j} dt$$

Idea de la Prova: Sabem (polinomis de Lagrange) que

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i L_i(x) \quad \text{amb} \quad L_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Escrivim

$$\int_a^b P_n(x) dx = \sum_{i=0}^n \int_a^b f_i L_i(x) dx$$

i substituïm $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, n$ amb $h = \frac{b-a}{n}$.

Regla dels trapezis

Fórmules tancandes de Newton-Côtes per $n = 1$

El denotarem per $T(f, a, b)$. És el cas $x_0 = a$ i $x_1 = b$ (per tant $h = b - a$). En aquest cas la fórmula anterior es redueix a

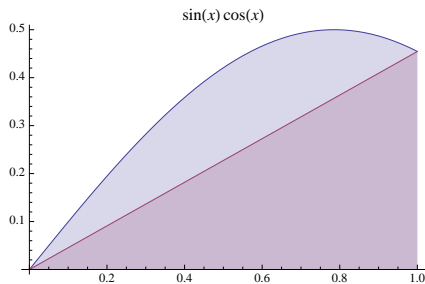
$$T(f, a, b) = \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)].$$

Es pot demostrar que

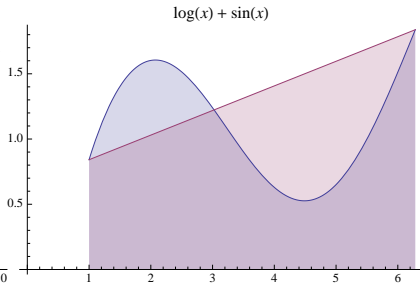
$$T(f, a, b) = \int_a^b f(x) \, dx - \frac{f''(\eta)}{12} h^3, \quad \eta \in [a, b].$$

Regla dels trapezis

Fórmules tancandes de Newton-Côtes per $n = 1$



$$f(x) = \sin(x) \cos(x) \text{ a } [0, 1]$$



$$f(x) = \sin(x) + \ln(x) \text{ a } [1, \pi]$$

En els dos casos aproximem l'àrea per l'àrea d'un trapezi.

Regla de Simpson

Fórmules tancandes de Newton-Côtes per $n = 2$

El denotarem per $S(f, a, b)$ (amb S de Simpson...). És el cas $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ i $x_2 = b$ ($h = (b - a)/2$). En aquest cas la fórmula anterior es redueix a

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

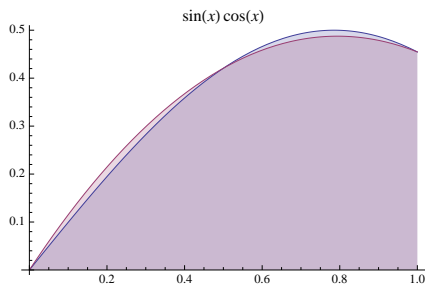
Es pot demostrar que

$$S(f, a, b) = \int_a^b f(x) \, dx - \frac{f''(\eta)}{90} h^5, \quad \eta \in [a, b].$$

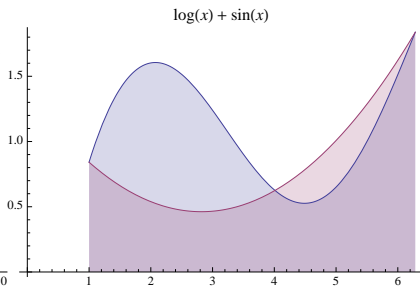
Regla de Simpson

Fórmules tancandes de Newton-Côtes per $n = 2$

28



$$f(x) = \sin(x)\cos(x) \text{ a } [0, 1]$$



$$f(x) = \sin(x) + \ln(x) \text{ a } [1, \pi]$$

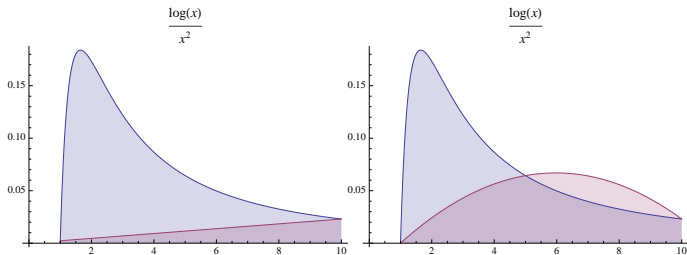
En els dos casos aproximem l'àrea per l'àrea d'un polinomi de grau 2.

Respecte de trapezis estem força millor (almenys en el primer exemple)!

Fórmules d'integració numèrica compostes

29

Problema: Interval $[a, b]$ **gran** o funció allunyada de ser lineal o quadràtica.



$$f(x) = \ln(x)/x^2 \text{ a } [1, 10]$$

Trapezis

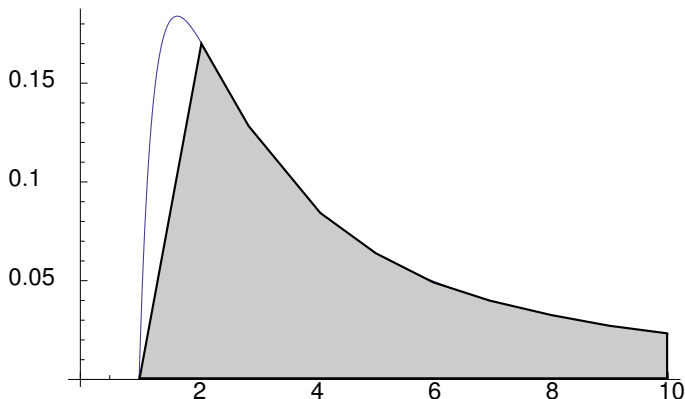
$$f(x) = \ln(x)/x^2 \text{ a } [1, 10]$$

Simpson

L'aproximació a la integral real és molt dolenta

Fórmules d'integració numèrica compostes

30



Solució: Trosejar l'interval i aproximar per Trapezis o Simpson a cada subinterval... **Fórmules (o regles) compostes.**

Regla composta dels trapezis

Fórmules d'integració numèrica compostes

Volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, dx$$

fent ús de la regla dels trapezis. Per fer-ho, primer, trosejem l'interval $[a, b]$ en N subintervalls $y_0 = a < y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N = b$. I ara aplicarem la **regla dels trapezis a cadascun dels intervals**.

$$T_N(f, a, b) = \sum_{i=0}^{N-1} T(f, y_i, y_{i+1}) = \frac{b-a}{2N} \left(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(y_i) + f(b) \right),$$

on la segona igualtat surt de treballar una mica (**exercici**). A més a més:

$$T_N(f, a, b) = \int_a^b f(x) \, dx + \frac{b-a}{12} f''(\eta) h^2, \quad \eta \in (a, b).$$

Regla composta de Simpson

Fórmules d'integració numèrica compostes

Volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, dx$$

fent ús de la **regla de Simpson**. Per fer-ho, primer, trosejem l'interval $[a, b]$ en N subintervals $y_0 = a < y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N = b$. I ara aplicarem la **regla de Simpson a cadascun dels intervals**.

Com que la fórmula de Simpson requereix de tres punts, **imposarem que N sigui parell**.

$$\begin{aligned} S_N(f, a, b) &= \sum_{i=0}^{N/2-1} S(f, y_{2i}, y_{2i+2}) = \\ &= \frac{b-a}{3N} \left(f(a) + 4 \sum_{i=0}^{N/2-1} f(y_{2i+1}) + 2 \sum_{i=1}^{N/2-1} f(y_{2i}) + f(b) \right), \end{aligned}$$

on la segona igualtat surt de treballar una mica (més) (**exercici**).

$$S_N(f, a, b) = \int_a^b f(x) \, dx + \frac{b-a}{180} f^{(4)}(\eta) h^4, \quad \eta \in (a, b).$$

Extrapolació de Romberg

Introducció

Les fórmules d'integració numèrica, $I(h)$ (ja sigui $I(h) = T_N(f, a, b)$ o $I(h) = S_N(f, a, b)$), aproximen el valor de la integral es pot veure que compleixen

$$I(h) = \int_a^b f(x) \, dx + a_2 h^2 + a_4 h^4 + \dots + a_{2n} h^{2n} + \dots$$

Però ja hem vist que pendre valors de h arbitràriament petits no és pas una bona estratègia (en aquest cas degut als errors numèrics propis del mètode).

Problema: Com podem millorar les estimacions, sense fer h massa petit?

Extrapolació de Romberg

Plantejament

Proposició: Suposem la fórmula derivació numèrica definida per $T(h)$
Trapezis. Definim

$$T_1(h) = T(h),$$

$$T_{j+1}(h) = T_j(h) + \frac{T_j(h) - T_j(h/2)}{(1/2)^{2j} - 1}.$$

Llavors

$$T_n(h) = \int_a^b f(x) \, dx + b_{2n} h^{2n} + \dots$$

Extrapolació de Romberg

Exemple d'aplicació

Volem calcular numèricament la integral

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x} dx = \ln(2) = 0.69314718055994529.$$

mitjançant la regla composta dels trapezis

$$T(h) = T_{N=1/h}(1/(1+x), 0, 1).$$

Considerem quatre valors de h : $h = 1$, $h = 1/2$, $h = 1/4$ i $h = 1/8$.

- $T_1(1) = 0.75$
- $T_1(0.5) = 0.70833333333333326$
- $T_1(0.25) = 0.69702380952380949$
- $T_1(0.125) = 0.69412185037185037$

Tenim 2 xifres significatives. Apliquem el mètode de Romberg.

Extrapolació de Romberg

Exemple d'aplicació

Hem de calcular

$$T_2(h) = T_1(h) + \frac{T_1(h) - T_1(h/2)}{(1/2)^2 - 1}.$$

- $T_2(1) = 0.69444444444444$
- $T_2(0.5) = 0.6932539682540$
- $T_2(0.25) = 0.6931545306545$ 5 xifres significatives

I encara podem calcular

$$T_3(h) = T_2(h) + \frac{T_2(h) - T_2(h/2)}{(1/2)^4 - 1}.$$

$$T_4(h) = T_3(h) + \frac{T_3(h) - T_3(h/2)}{(1/2)^6 - 1}.$$

- $T_3(1) = 0.6931746031746$
- $T_3(0.5) = 0.6931479014812$
- $T_4(1) = 0.6931474776448$ 6 xifres sig.: $(0.125)^6 = 3.8 \times 10^{-6}$