Interpolació polinomial

Regresió lineal versus interpolació polinomial

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

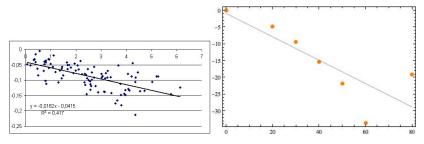
Exemple: Del punt de congelació d'un anticongelant (una solució de glicerina en aigua). Tenim una taula de valors del punt de congelació en graus Celsius (y), en funció de la concentració (%) de glicerina (x).

Γ.	X	0	20	30	40	50	60	80
Γ.	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...)

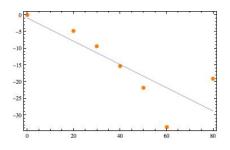
Una (possible) solució (especialment si les dades són moltes i tenen una component probabilística) és calcular la recta de regresió; és a dir la millor (en algun sentit de la paraula) aproximació lineal de les dades.



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

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

Regresió lineal (o quadràtica...)



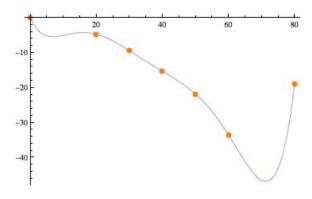
$$\bar{x} = 46.\bar{6}$$
 $\bar{y} = -17.38\bar{3}$ $\hat{b} = -0.329428571$ $\hat{a} = -2.01$

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

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

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

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

Un exemple: l'anticongelant

Possible solució

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

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

El polinomi interpolador

Teorema d'existència i unicitat

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

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

Demostració: Sigui

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

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

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \ldots + a_n x_0^n &= y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \ldots + a_n x_1^n &= y_1 \\ \ldots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \ldots + a_n x_n^n &= y_n \end{cases}$$

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 dóna 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.

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:

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

Tenim

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

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

$$y_2 = p_n(x_2) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + c_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$
...
$$y_n = p_n(x_n) = c_0 + c_1(x_2 - x_0) + \dots + c_n(x_n - x_0)(x_n - x_1) \cdot \dots \cdot (x_n - x_{n-1})$$

Mètode alternatiu II: Diferències dividides

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

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

$$c^T = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_n \end{pmatrix} \quad i \quad y^T = \begin{pmatrix} y_0 & y_1 & \cdots & y_n \end{pmatrix}$$

Per tant si resolem s'obté:

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

Mètode de les diferències dividides de Newton

Per calcular els c_j 's no resoldrem el sistema sino que construirem el següent esquema (anomenat diferències dividides)

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

Mètode de les diferències dividides (Exemple)

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

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

La taula de les diferències dividides és

30
$$-9.5$$

 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.5
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65
 -9.65

Mètode de les diferències dividides (Exemple)

El polinomi interpolador p₃(x) és

$$p_3(x) = -9.5 - 0.59(x - 30) -0.003(x - 30)(x - 40) -0.00076(x - 30)(x - 40)(x - 50).$$

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

Últims comentaris

Resumint:

- Tenim n+1 dades $\{x_i, y_i\}$, $i=0, \ldots n$ 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 diferencies 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 avantage en el nostre context.

Pregunta: Un cop tenim el poliomi 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

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

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

Consequentment (Algorisme de Horner):

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

Error de la interpolació

Filosofia

- Suposem que les dades/nodes $\{x_i, y_i\}$, i = 0, ... 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, ... 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 $p_n(x_i) = f(x_i), i = 0, ..., n$.
- 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 $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ donats, de forma que $p_n(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \ldots, n$.

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

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

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

3 Acotació particular (nodes equiespaiats): Si $x_i = x_0 + i \cdot h$ per i = 0, 1, ..., n, amb $h = \frac{(b-a)}{n}$, i $|f^{(n+1)}(x)| \le M_{n+1}$ 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

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

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 $0.3x10^{-10}$.

ICC

Interpolació d'Hermite

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

$$\begin{pmatrix} x_0 \longrightarrow f(x_0), f'(x_0), \dots, f^{(m_0)}(x_0) \\ x_1 \longrightarrow f(x_1), f'(x_1), \dots, f^{(m_1)}(x_1) \\ \dots \\ x_n \longrightarrow f(x_n), f'(x_n), \dots, f^{(m_n)}(x_1) \end{pmatrix}$$

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:

Xi	$x_0 = 0$	$x_1 = 1$	$x_2 = -1$
f	0	0	-1
f'	1	1	
f"	-1		

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

$$p(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4 + a_5 x^5$$

$$p'(x) = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + 4a_4 x^3 + 5a_5 x^4$$

$$p''(x) = 2a_2 + 6a_3 x + 12a_4 x^2 + 20a_5 x^3$$

Ara imposem totes les condicions que tenim:

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

Interpolació d'Hermite

Exemple (i solució)

Resolem doncs el sistema d'equacions lineals:

$$p(0) = 0 \mapsto a_0 = 0
 p(1) = 0 \mapsto a_0 + a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 = 0
 p(-1) = -1 \mapsto a_0 - a_1 + 2a_2 - a_3 + a_4 - a_5 = -1
 p'(0) = 1 \mapsto a_1 = 1
 p'(1) = 1 \mapsto a_1 + 2a_2 + 3a_3 + 4a_4 + 5a_5 = 1
 p''(0) = 0 \mapsto 2a_2 = 0
 a_0 = 0 a_1 = 1 a_2 = 0 a_3 = -\frac{9}{4} a_4 = -\frac{1}{2} a_5 = \frac{7}{4}$$

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

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

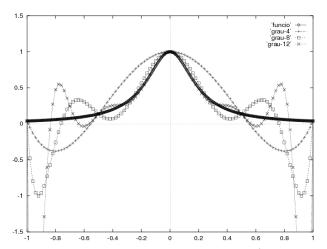
en els punts equiespaiats $x_i = -1 + \frac{2i}{n}$, $i = 0, 1, \dots, n$.

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

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

Fenomen de Runge

Gràfiques



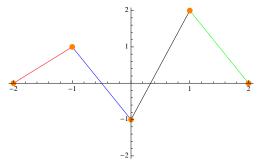
A la figura hi ha representats la funció $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ i els seus polinomis d'interpolació de graus 4, 8 i 12.

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 malla 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 és el que mostra la figura Spline Lineal. Entre dos nodes es proposa un polinomi de grau 1 (una recta

Interpolació per Splines

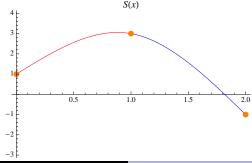
Splines Cúbics

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

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

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 x n = 4n ja que tenim 4 coeficients per cadascun dels n polinomis de grau 3 que construim.
- 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)

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):

$$S'(x_0) = f'(x_0) i S'(x_n) = f'(x_n)$$

• Free (o extrems naturals):

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

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

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

Exemple

Considerem la taula

Xi	$x_0 = 0$	$x_1 = 1$	$x_2 = 2$
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 imposem 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 $(x_1 = 1)$: $a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 3$ $b_0 + b_1 + b_2 + b_3 = 3$.

ICC

- 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 $(x_1 = 1)$: $2a_2 + 6a_3 = 2b_2 + 6b_3$

Exemple

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

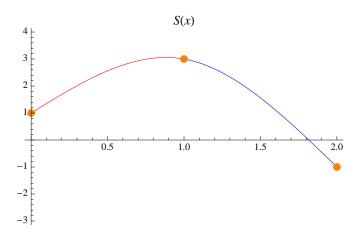
$$a_0 = 1$$
 $b_0 + 2b_1 + 4b_2 + 8b_3 = -1$
 $a_0 + a_1 + a_2 + a_3 = 3$
 $b_0 + b_1 + b_2 + b_3 = 3$
 $a_1 + 2a_2 + 3a_3 - (b_1 + 2b_2 + 3b_3) = 0$
 $2a_2 + 6a_3 - (2b_2 + 6b_3) = 0$
 $2a_2 = 0$
 $2b_2 + 12b_3 = 0$

Les solucions són:

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

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

Exemple



Derivació i integració numèrica

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

$$f^{(k)}(a)$$

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

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

Introducció

$$f^{(k)}(a) \approx P_n^{(k)}(a)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_n(x) dx$$

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

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.

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

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

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

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

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

Diferències finites

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

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

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

Error: Mirem a la fórmula general i substituim:

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

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

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

Diferències finites

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

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

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

Error: Mirem a la fórmula general i substituim:

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

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

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

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:

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

Diferències finites per f'(a)

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

Diferència finita endavant

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

Diferència finita endarrere

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

Diferència finita centrada

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

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 polsim de desenvolupament de taylor...).

$$f''(a) = \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2} + \frac{1}{12}f'^{\nu}(\eta_a) h^2, \quad \eta_a \in < a-h, a+h > .$$

Exemple 1

```
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 (endavant)

f'(x_0) \approx 0.968911576471054 (endarrere)

f'(x_0) \approx 0.968912421697721 (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

Х	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:

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

Exemple 2: Usain Bolt als 100m

Amb derivació numèrica cap endarrere

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

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

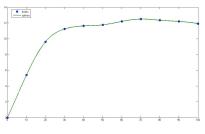
Igualment, utilitzant derivació numèrica cap endarrere sobre la taula de velocitats que acabem d'obtenir,

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

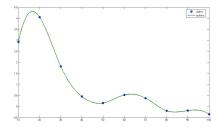
obtindrem la taula d'acceleracions (en m/s^2) a temps t_i (o a distància x_i).

Exemple 2: Usain Bolt als 100m

t	0.000	1.850	2.890	3.780	4.640	5.490	6.310	7.110	7.920	8.740	9.580
х	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
а		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 intuitiu que, quan més petit agafem el pas, millor aproximació tindrem de f'(a). No obstant aqui 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)	ea
1 <i>e</i> – 1	-1.528250381836	1 <i>e</i> – 1
1 <i>e</i> – 2	-1.435989186028	1 <i>e</i> – 2
1 <i>e</i> – 4	-1.425610330887	1 <i>e</i> – 4
1 <i>e</i> – 7	-1.425505384151	1 <i>e</i> – 7
1 <i>e</i> – 8	-1.425505279096	1 <i>e</i> – 10
1 <i>e</i> – 9	-1.425505394281	1 <i>e</i> – 7
1 <i>e</i> – 12	-1.425637385921	1 <i>e</i> – 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:

$$\begin{vmatrix} f'(a) - \frac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h} \end{vmatrix} = \left| f'(a) - \frac{f(a+h) + e1 - f(a) - e_2}{h} \right| \le$$

$$\le \left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| + \left| \frac{e_2 - e_1}{h} \right| \le \frac{M}{2}h + \frac{2\varepsilon}{h},$$

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

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

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

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

Introducció

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

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

per una certa funció F(h). Però ja hem vist que pendre 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?

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 podriem escriure-la com

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

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

$$F_1(h) = F(h),$$

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

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

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:

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

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.

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!!

Capítol 4 (Part II)

Integració numèrica

Introducció

Problema: Volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d} x$$

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.

Observació important

En general quan volguem calcular una integral del tipus

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{dx}$$

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

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

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

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]): $a=x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$. 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

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

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

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, ... n amb $h = \frac{b-a}{n}$ llavors

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

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

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

Escrivim

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

i substituim $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots n$ 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

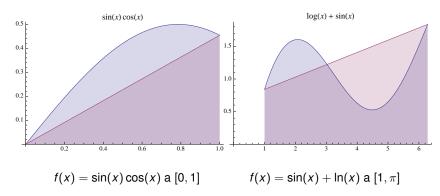
$$T(f, a, b) = \frac{(b-a)}{2} [f(a) + f(b)].$$

Es pot demostrar que

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

Regla dels trapezis

Fórmules tancandes de Newton-Côtes per n = 1



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

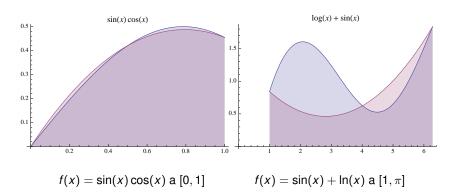
$$S(f,a,b) = \frac{(b-a)}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right].$$

Es pot demostrar que

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

Regla de Simpson

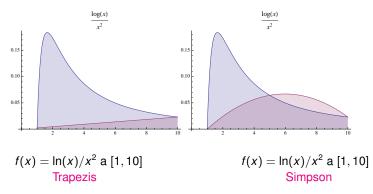
Fórmules tancandes de Newton-Côtes per n = 2



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)!

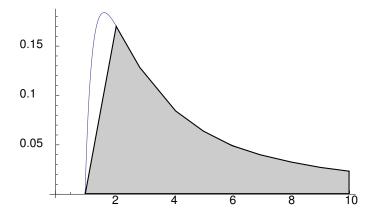
Fórmules d'integració numèrica compostes

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



L'aproximació a la integral real és molt dolenta

Fórmules d'integració numèrica compostes



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

$$\int_{a}^{b} f(x) \, \mathrm{dx}$$

fent ús de la regla dels trapezis. Per fer-ho, primer, trosejem l'interval [a,b] en N subintervals $y_0 = a < y_1 < y_2 < \ldots < y_{N-1} < y_N = b$. 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:

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

Regla composta de Simpson

Fórmules d'integració numèrica compostes

Volem calcular

$$\int_a^b f(x) \, \mathrm{d} x$$

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

$$S_N(f, a, b) = \sum_{i=0}^{N/2-1} S(f, y_{2i}, y_{2i+2}) =$$

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

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

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

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

$$I(h) = \int_a^b f(x) dx + a_2h^2 + a_4h^4 + \ldots + a_{2n}h^{2n} + \ldots$$

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

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

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

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

Exemple d'aplicació

Volem calcular numèricament la integral

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

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.

- $T_1(1) = 0.75$
- \bullet $T_1(0.5) = 0.70833333333333333333$
- $T_1(0.25) = 0.69702380952380949$
- \bullet $T_1(0.125) = 0.69412185037185037$

Tenim 2 xifres significatives. Apliquem el mètode de Romberg.

Exemple d'aplicació

Hem de calcular

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

- \bullet $T_2(0.5) = 0.6932539682540$
- $T_2(0.25) = 0.6931545306545$ 5 xifres significatives

I encara podem calcular

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

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

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

ICC