

SECCIÓ DE MATEMÀTICA APLICADA

EUPVG

Departament de Matemàtica Aplicada i telemàtica

UPC

Apunts de mètodes numèrics

Interpolació polinòmica, càlcul de zeros i integració numèrica

C. Batlle, M. Claverol i R.M. Ros

Prefaci

Dins l'assignatura de Càlcul Infinitesimal de primer curs de les carreres d'enginyeria tècnica s'acostuma a proporcionar algunes idees sobre mètodes numèrics elementals de resolució de certs problemes també elementals. El fet de que els textos (vegeu la bibliografia) existents al mercat abastin molts més temes (i amb molta més profunditat) del que es requereix a aquest nivell ens ha portat a editar aquestes notes, que esperem que alleugerin la tasca tant dels professors com dels estudiants a l'hora de d'exposar a la pizarra i prendre apunts, respectivament.

L'objectiu de qualsevol mètode numèric és, d'una banda, formular un algorisme eficient per resoldre de forma aproximada el problema que es té entre mans i, per altra, proporcionar una acotació de l'error comés emprant aquest algorisme. Nosaltres, en aquests breus apunts, tant sols hem intentat explicar les idees essencials de diversos mètodes numèrics, i mostrar com funcionen a la pràctica. El lector interessat en la justificació de moltes de les afirmacions que fem és convidat a consultar la bibliografia, especialment [1]. D'altra banda, si algú vol implementar els algorismes exposats en un llenguatge de programació d'alt nivell, serà convenient que examini [4]. En general, la bibliografia citada està a l'abast de tothom que hagi seguit un primer quadrimestre de càlcul d'una variable.

Els apunts estan organitzats de la següent manera. A la primera secció tractem la qüestió de la interpolació dels valors d'una funció a partir d'alguns punts coneguts, centrant-nos en la interpolació polinòmica. La segona secció s'ocupa del càlcul dels zeros d'una funció d'una variable, presentant els mètodes de la bisecció, de la *regula falsi*, de la secant i de Newton. La secció tres descriu els mètodes elementals d'integració numèrica, en concret les fórmules dels trapezis i de Simpson, i es veu també com accelerar la convergència amb la integració de Romberg. Finalment, la secció quatre presenta diversos exemples resolts amb un cert detall.

Mètodes numèrics per a altres tipus de problemes, de càlcul de diverses variables, d'àlgebra lineal, d'equacions diferencials, d'anàlisi de senyals o d'inferència estadística, entre molts altres, poden trobar-se a la bibliografia, així com tractaments amb més profunditat del temes aquí tractats.

Esperem corregir en futures edicions els molts errors d'aquesta, que sens dubte els lectors ens faran saber.

Els autors,
Vilanova, febrer de 1993.

Sumari

1 Interpolació de funcions	3
1.1 Interpolació polinòmica	3
1.2 Existència i unicitat	5
1.3 Error d'interpolació	5
1.4 Obtenció del polinomi interpolador	6
1.4.1 Mètode de Lagrange	6
1.4.2 Mètode de Neville	7
2 Zeros de funcions	11
2.1 Mètode de la bisecció	11
2.2 Mètodes de la <i>regula falsi</i> i de la <i>secant</i>	12
2.3 Mètode de Newton	15
3 Integració numèrica	20
3.1 Fórmules de Newton-Cotes tancades	20
3.1.1 Regla del trapezi	20
3.1.2 Regla de Simpson	21
3.1.3 Regles amb un nombre superior de punts	22
3.1.4 Regla del trapezi estesa	23
3.1.5 Regla de Simpson estesa	25
3.1.6 Errors	26
3.1.7 Integració de Romberg	28
3.2 Fórmules de Newton-Cotes obertes	29
4 Exercicis resolts	31

1 Interpolació de funcions

De vegades en el camp de la investigació experimental es disposa d'un seguit d'observacions i ens interessa trobar algun resultat més en condicions no experimentals. Suposem doncs que coneixem un nombre finit de parelles $\{(x_k, y_k)\}$ i que necessitem conèixer per un valor determinat de la variable x el resultat corresponent de l'altra variable y .

Si pensem que les parelles de valors reals donades són punts del pla que formen part de la gràfica d'una funció f de la que només coneixem els $n + 1$ valors donats $f(x_k) = y_k$ (amb $k = 0, 1, \dots, n$ i on $x_k \neq x_j$ si $k \neq j$) ens proposem conèixer aproximadament la funció f per poder calcular nous punts de la gràfica. No cal dir que la funció a obtenir no serà la desconeguda f sinó tan sols una funció p , aproximació de la mateixa (vegeu la figura (1)).

Un altre problema que en ocasions es planteja és el consistent en substituir una funció f coneguda, però complicada, per una funció més senzilla que en sigui una aproximació, i una forma d'aconseguir-ho pot consistir en buscar una funció p que tingui en comú amb aquella $n + 1$ punts.

El tractament matemàtic d'ambdós problemes, quan tenim la taula de punts o quan tenim una funció molt complicada, serà a partir d'ara el mateix.

Les possibles funcions p d'interpolació es poden obtenir seguint diferents procediments, i l'elecció d'aquests sol dependre de la funció, si la coneixem, o del comportament que es preveu per la funció f observant la llista de punts amb que es compta. La funció p buscada pot ser de tipus polinòmic, racional, trigonomètric, etc. Per exemple si la funció f presenta periodicitats convindrà usar una p a base de funcions trigonomètriques, si la funció f creiem que pot presentar asímptotes és convenient buscar una p a partir de funcions racionals i si el comportament de f es proper a un polinomi intentarem una p a escollir entre els polinomis. En aquests apunts només tractarem aquest darrer tipus d'interpolació.

1.1 Interpolació polinòmica

Donada una taula amb $n + 1$ punts (x_k, y_k) amb $k = 0, 1, \dots, n$, $x_k \neq x_j$ si $k \neq j$ existeix un únic polinomi d'interpolació p de grau n tal que

$$p(x_k) = y_k \quad k = 0, 1, 2, \dots, n$$

Observem que per determinar un polinomi de grau n , $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$ cal conèixer $n + 1$ coeficients reals $a_n, a_{n-1}, \dots, a_1, a_0$ i que per fer-ho disposem del valor de $p(x)$ en els $n + 1$ punts donats (x_k, y_k) . Per tant tindrem $n + 1$ incògnites i $n + 1$ equacions.

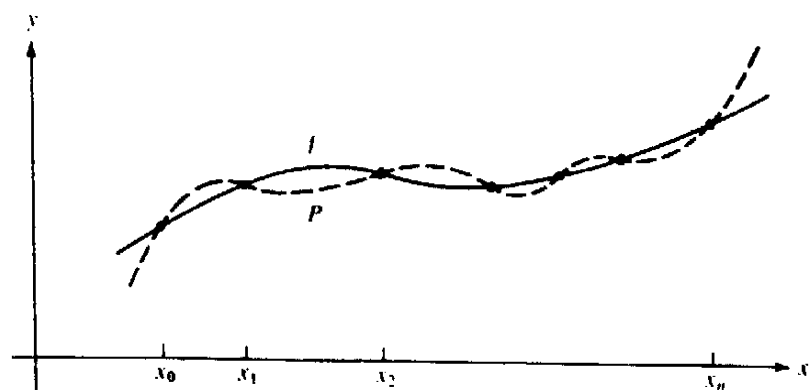
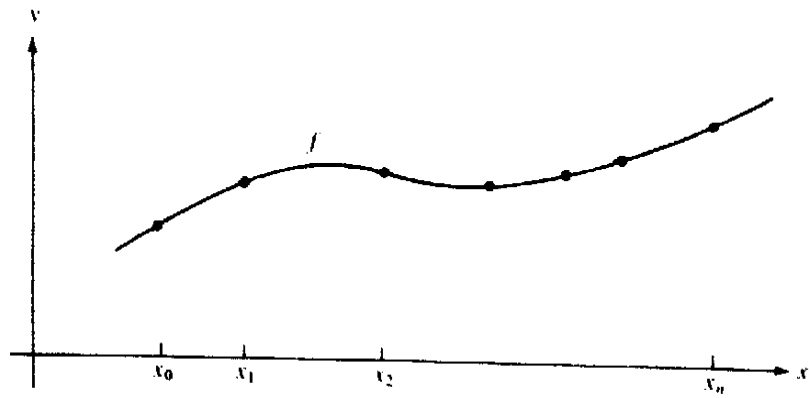
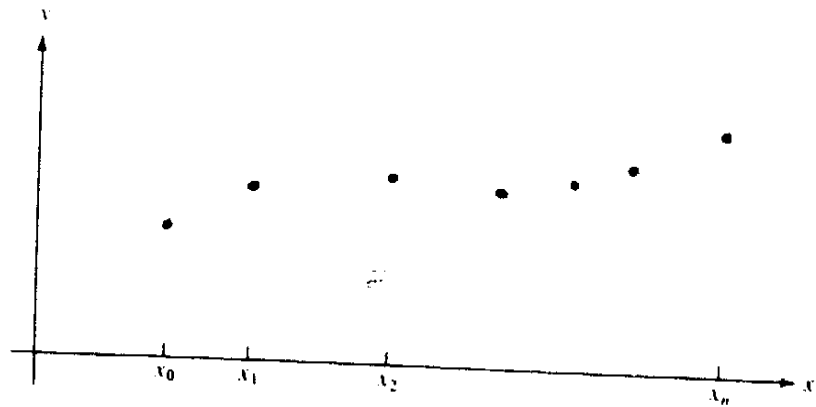


Figura 1: Interpolació polinòmica d'uns punts donats

Estudiarem a continuació l'existència, la unicitat i l'error produït en considerar el polinomi $p(x)$.

1.2 Existència i unicitat

Considerem el polinomi $p(x)$ de grau n que passi pels $n + 1$ punts de coordenades (x_k, y_k) , $k = 0, 1, \dots, n$. Obtenim un sistema lineal de $n + 1$ equacions amb $n + 1$ incògnites:

$$\left. \begin{array}{r} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \dots + a_1 x_0 + a_0 = y_0 \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + a_1 x_1 + a_0 = y_1 \\ \vdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \dots + a_1 x_n + a_0 = y_n \end{array} \right\}$$

Per estudiar la seva compatibilitat cal considerar el determinant de la matriu del sistema:

$$\begin{vmatrix} x_0^n & x_0^{n-1} & \dots & x_0 & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1} & \dots & x_1 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \dots & x_n & 1 \end{vmatrix} = \prod_{k>j} (x_k - x_j)$$

Com sabem que $x_k \neq x_j$ per $k \neq j$, evidentment aquest determinant és diferent de zero, i per tant el sistema plantejat és compatible i determinat, i en conseqüència, existeix una única solució dels coeficients $a_n, a_{n-1}, \dots, a_1, a_0$ del polinomi interpolador.

1.3 Error d'interpolació

Per avaluar l'error que es comet en utilitzar el polinomi d'interpolació p d'ordre n en lloc de la funció f més complicada, donarem una expressió que és vàlida per funcions derivables fins a ordre $n + 1$.

Sigui la funció f classe C^{n+1} . Aleshores per a qualsevol x , existeix un valor $\xi(x)$ que pertany al més petit dels intervals que contenen als punts x_0, x_1, \dots, x_n i x , que satisfà:

$$\text{Error} = f(x) - p(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

Demostració

Si x és igual a algun del x_k per $k = 0, 1, \dots, n$, llavors per la definició del propi polinomi d'interpolació $f(x_k) = p(x_k)$, i l'error $f(x_k) - p(x_k)$ és nul.

Si x és diferent de qualsevol dels x_k per $k = 0, 1, \dots, n$, llavors considerem la funció:

$$g(z) = f(z) - p(z) - a(x)(z - x_0)(z - x_1) \dots (z - x_n)$$

on $a(x)$ és tal que $g(x) = 0$.

Per la definició la funció g s'anulla en $n + 2$ punts, que són: x i els x_k per $k = 0, 1, \dots, n$. Aplicant $n + 1$ vegades el teorema de Rolle a aquesta funció es dedueix que existeix un $\xi(x)$ en el que la derivada $n + 1$ de g és nul·la $g^{(n+1)}(\xi(x)) = 0$. Derivant $n + 1$ vegades la funció g considerada tenim

$$f^{(n+1)}(\xi(x)) - 0 - a(x)(n + 1)! = 0,$$

i, finalment,

$$a(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n + 1)!},$$

valor que substituint en la definició de la funció g , i aïllant ens permet deduir la expressió de l'error donada. \square

Observacions

Cal destacar que si la x està dins de l'interval determinat pel mínim i el màxim de x_0, x_1, \dots, x_n , l'error és petit, i en canvi, si la x està fora, l'error pot ser molt gran. També es pot observar que com més punts tinguem, el valor de $(n + 1)!$ serà més gran i per tant això farà disminuir l'error.

1.4 Obtenció del polinomi interpolador

El procés descrit en provar l'existència de $p(x)$ és possible però molt laboriós quan n no és un número petit. En conseqüència convé utilitzar altres mètodes més còmodes per obtenir el mateix polinomi interpolador, ja que com hem vist abans és únic.

1.4.1 Mètode de Lagrange

Construirem primer uns polinomis anomenats polinomis de Lagrange $l_i(x)$ i a partir d'ells el polinomi interpolador $p(x)$. Siguin:

$$\begin{aligned} l_i(x) &= \frac{(x - x_0) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} \\ &= \frac{\prod_{j=1, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=1, j \neq i}^n (x_i - x_j)} \quad i = 0, 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Evidentment el grau d'aquests polinomis $l_i(x)$ és n , i verifiquen:

$$l_i(x_k) = \begin{cases} 1 & \text{si } k = i \\ 0 & \text{si } k \neq i \end{cases}$$

Lavors definim el polinomi interpolador $p(x)$ per l'expressió següent, anomenada fórmula d'interpolació de Lagrange:

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

que evidentment verifica les condicions exigides $p(x_k) = y_k$ per $k = 0, 1, \dots, n$.

Observacions

Aquest mètode no és particularment eficient si es programa directament degut al gran nombre de càlculs que és necessari fer, sobre tot si el grau del polinomi és alt. A més no dóna cap estimació de l'error comés, acotant $f(x) - p(x)$. De tota manera pot ser útil en els casos en que s'hagin d'interpoliar diverses funcions conegudes per els mateixos valors de les abscises x_k , $k = 0, 1, \dots, n$.

Cal esmentar però que si afegim un punt més (x_{n+1}, y_{n+1}) , al conjunt de punts de partida, per poder fer la interpolació de Lagrange i trobar un polinomi de grau $n+1$, hauriem de començar de nou sense poder aprofitar els càlculs realitzats, el que representa un fort inconvenient a tenir en compte.

EXEMPLE D'APLICACIÓ. Sigui la funció donada per la taula:

x	0	2	3
y	1	3	2

Es demana calcular el valor corresponent a $x = 1$ interpolant polinòmicament mitjançant el mètode de Lagrange.

En la notació utilitzada estem en el cas $n = 2$ i volem calcular, usant el polinomi de segon grau, el valor $p(1)$, sabent que aquest polinomi compleix $p(x_k) = y_k$. Tenim doncs que per $i=0$, $x_0 = 0$, $y_0 = 1$ i definim $l_0(x) = \frac{(x-2)(x-3)}{(0-2)(0-3)}$, per $i=1$, llavors $x_1 = 2$, $y_1 = 3$ i $l_1(x) = \frac{(x-0)(x-3)}{(2-0)(2-3)}$, i finalment per $i=2$, $x_2 = 3$, $y_2 = 2$ de forma anàloga definim $l_2(x) = \frac{(x-0)(x-2)}{(3-0)(3-2)}$.

Aquests polinomis avaluats en el punt $x = 1$ donen respectivament $l_0(1) = 1/3$, $l_1(1) = 1$ i $l_2(1) = -1/3$. Substituint en la definició del polinomi interpolador tenim:

$$p(1) = \sum_{i=0}^2 y_i l_i(1) = 1l_0(1) + 3l_1(1) + 2l_2(1) = 8/3$$

Tal com s'ha fet a l'exemple, no es calcula explícitament el polinomi interpolador $p(x)$, sinó que els càlculs es realitzen substituint-la pel valor que volem avaluar, en aquest cas $x = 1$, i només s'obté $p(1)$.

1.4.2 Mètode de Neville

Aquest procediment, més utilitzat que el de Lagrange, presenta l'avantatge que permet aprofitar els càlculs fets per determinar el polinomi interpolador de grau n per poder trobar el de grau $n + 1$ en afegir un punt més a la taula inicial. El mètode de Neville permet obtenir un polinomi interpolador construint una successió de polinomis de graus creixents que interpolen respectivament conjunts d'abscises més nombrosos.

Sigui P_0 el valor en el punt x de l'únic polinomi de grau 0 que passa pel punt (x_0, y_0) . Només cal assignar el polinomi constant $P_0 = y_0$. De forma anàloga definim els polinomis constants P_1, P_2, \dots, P_n .

Sigui ara P_{01} el valor en el punt x de l'únic polinomi de grau 1 que passa pels punts (x_0, y_0) i (x_1, y_1) serà:

$$P_{01} = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

on recordant que $P_0 = y_0$ i $P_1 = y_1$, i reordenant obtenim l'expressió equivalent:

$$P_{01} = \frac{P_0(x - x_1) + (x_0 - x)P_1}{x_0 - x_1}$$

que evidentment satisfà $P_{01}(x_0) = y_0$ i $P_{01}(x_1) = y_1$. De manera anàloga es defineixen $P_{12}, P_{23}, P_{34}, \dots, P_{n-1, n}$.

Llavors serà P_{012} el valor en el punt x de l'únic polinomi de grau 2 que passa pels punts (x_0, y_0) , (x_1, y_1) i (x_2, y_2) , segons:

$$P_{012} = \frac{P_{01}(x - x_2) + (x_0 - x)P_{12}}{x_0 - x_2}$$

i que compleix que $P_{012}(x_0) = P_{01}(x_0) = y_0$, $P_{012}(x_1) = \frac{y_1(x_1 - x_2) + (x_0 - x_1)y_2}{x_0 - x_2} = y_1$ i $P_{012}(x_2) = P_{12}(x_2) = y_2$.

El mateix es reproduïx per polinomis d'ordre superior. Per exemple, P_{3456} indica el valor en x de l'únic polinomi de grau 3 que passa pels punts (x_3, y_3) , (x_4, y_4) , (x_5, y_5) i (x_6, y_6) .

Seguint el procés acabariem amb el polinomi $P_{01234\dots n-1, n}$ que passa pels $n + 1$ punts donats, es a dir $P_{01234\dots n-1, n}(x_0) = y_0$, $P_{01234\dots n-1, n}(x_1) = y_1$, ..., $P_{01234\dots n-1, n}(x_n) = y_n$, y és el polinomi que volíem calcular.

L'avantatge del mètode de Neville és que per poder trobar aquests valors polinòmics en x , es fa mitjançant la construcció d'un triangle que està format per aquests P 's. Es comença escrivint a l'esquerra una columna amb tots els $n + 1$ valors P_0, P_1, \dots, P_n . A partir d'aquests trobarem la segona columna formada pels n valors dels $P_{01}, P_{12}, P_{23}, \dots, P_{n-1, n}$ que s'obtidran a partir de dos de la primera columna. El $P_{i, i+1}$ s'obté del P_i i el P_{i+1} segons la fórmula exposada abans:

$$P_{i, i+1} = \frac{P_i(x - x_{i+1}) + (x_i - x)P_{i+1}}{x_i - x_{i+1}}$$

com si dos "pares" obtinguessin un "fill". Seguidament a partir d'aquesta segona columna s'obté una tercera columna amb els $P_{012}, P_{123}, \dots, P_{n-2, n-1, n}$ usant fórmules del tipus:

$$P_{i, i+1, i+2} = \frac{P_{i, i+1}(x - x_{i+2}) + (x_i - x)P_{i+1, i+2}}{x_i - x_{i+2}}$$

repetint-se l'esquema de "dos pares un fill", i així successivament.

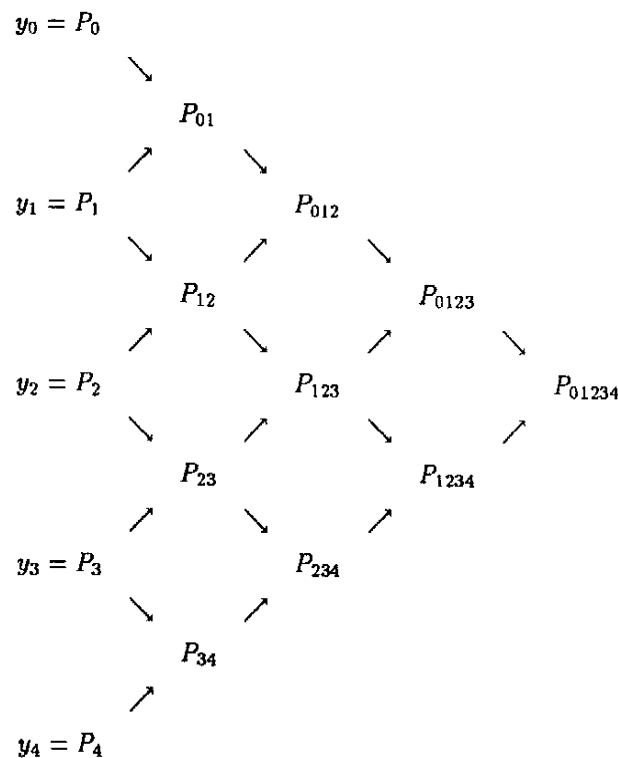
En general, els "pares" de $P_{i+1 \dots i+m}$ són $P_{i+1 \dots i+2 \dots i+m}$ i $P_{i+1 \dots i+m-1}$, i es verifica:

$$P_{i+1 \dots i+m} = \frac{P_{i+1 \dots i+m-1}(x - x_{i+m}) + (x_i - x)P_{i+1 \dots i+2 \dots i+m}}{x_i - x_{i+m}},$$

on observem que els dos "pares" ja coincideixen en les abscises $x_{i+1}, \dots, x_{i+m-1}$.

Seguint amb aquest procediment finalment s'obté a la dreta del tot l'últim "descendent" que és el valor buscat.

Per exemple per $n=4$ es té l'esquema següent:



on P_{01234} és la solució segons el mètode de Neville.

Observacions.

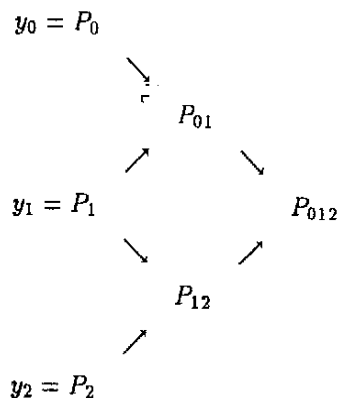
Per controlar la finor del mètode cal vigilar les petites diferències entre els "pares" i els "fills". En general, el màxim de les diferències dels últims valors amb cadascun del seus "pares" ens dóna una idea sobre la fiabilitat del valor obtingut. Com més petites siguin aquestes diferències més fiable serà el valor aconseguit.

EXEMPLE D'APLICACIÓ. Sigui la funció donada per la taula:

x	0	2	3
y	1	3	2

Es demana calcular el valor corresponent a $x = 1$ interpolant polinòmicament mitjançant el mètode de Neville.

En la notació utilitzada estem en el cas $n = 2$ i l'esquema corresponent seria el següent:



on el P_{012} ens donaria el valor del polinomi d'interpolació per $x = 1$.

Tenim així: per $i = 0$, $x_0 = 0$, $y_0 = 1 = P_0$, per $i = 1$, $x_1 = 2$, $y_1 = 3 = P_1$, i per $i = 2$, $x_2 = 3$, $y_2 = 2 = P_2$. Llavors els termes de la segona columna s'obtenen:

$$P_{01} = \frac{P_0(x - x_1) + (x_0 - x)P_1}{x_0 - x_1} = \frac{1(x - 2) + (0 - x)3}{0 - 2}$$

$$P_{12} = \frac{P_1(x - x_2) + (x_1 - x)P_2}{x_1 - x_2} = \frac{3(x - 3) + (2 - x)2}{2 - 3}$$

que, considerats per $x = 1$, donen els valors de $P_{01} = 2$ i $P_{12} = 4$. Els resultats, introduïts en

$$P_{012} = \frac{P_{01}(x - x_2) + (x_0 - x)P_{12}}{x_0 - x_2} = \frac{2(x - 3) + (0 - x)4}{0 - 3},$$

ens permeten calcular, per $x = 1$, el valor final de $P_{012} = 8/3$.

2 Zeros de funcions

El nostre objectiu és resoldre equacions reals d'una variable real, que sempre es poden escriure en la forma

$$f(x) = 0.$$

Per tant, el problema es redueix a trobar els zeros d'una funció real de variable real $f(x)$.

L'eina fonamental serà el teorema de Bolzano:

Si $f(x)$ és contínua en l'interval tancat $[a, b]$, i es verifica $f(a)f(b) < 0$, llavors existeix $\xi \in (a, b)$ tal que $f(\xi) = 0$.

Els mètodes que utilitzarem poden classificar-se en dos grups:

1. Mètodes que no utilitzen la derivada:

- (a) bissecció,
- (b) *regula falsi*,
- (c) secant.

2. Mètodes que utilitzen la derivada. Estudiarem el mètode de Newton.

Val a dir que, a la pràctica, els algorismes més potents utilitzen una combinació dels mètodes anteriors, depenent de la disposició de $f(x)$ a col·laborar. Existeixen també mètodes especials pel cas que $f(x)$ sigui un polinomi, ja que la possibilitat d'arrels múltiples, a més d'enganyar al teorema de Bolzano quan la multiplicitat és parella, presenta dificultats per a tots els mètodes esmentats, especialment per als mètodes de la secant i de Newton, degut a que la derivada és petita al voltant de l'arrel que es busca.

El primer pas per a qualsevol dels mètodes (no estrictament necessari per als mètodes de Newton i la secant però sí convenient), consisteix en trobar l'interval dins el qual estem segurs que hi ha almenys un zero. Per aplicar el teorema de Bolzano, és necessari que la funció sigui contínua en aquest interval tancat. Fet això hom pot passar a utilitzar els mètodes que tot seguit descriurem.

2.1 Mètode de la bissecció

El mètode de la bissecció és un que no pot fallar. La idea és senzilla. Sabem que en un interval $[x_1, x_2]$ hi ha un zero perquè la funció contínua $f(x)$ hi canvia de signe. Avaluem la funció en el punt $x_3 = (x_1 + x_2)/2$, el centre de l'interval. Utilitzem llavors x_3 per substituir x_1 si $f(x_1)$ i $f(x_3)$ tenen el mateix signe i seguim llavors amb $[x_3, x_2]$, o per substituir x_2 si $f(x_2)$ i $f(x_3)$ tenen el mateix signe i continuem en aquest cas amb $[a, c]$. Després d'una d'aquestes

iteracions, l'interval que conté l'arrel ha disminuït la seva longitud per un factor 2. Si després d' n iteracions l'arrel està dins un interval de tamany ϵ_n , després de la següent iteració estarà dins un interval de longitud

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n/2.$$

Per tant, si $\epsilon_0 = x_2 - x_1$ és el tamany de l'interval inicial i volem arribar a conèixer l'arrel amb un error ϵ , haurà de ser $\epsilon = \epsilon_0/2^n$, és a dir, necessitarem efectuar

$$n = \log_2(\epsilon_0/\epsilon)$$

bisecions. Per construcció, és evident que això no pot fallar. Si un interval conté una arrel, la biseció la trobarà. Si en conté un nombre senar, el mètode en trobarà una d'elles.

Quan un mètode convergeix com un factor més petit que 1 multiplicat per l'error del pas anterior elevat a la primera potència, com en el cas de la biseció, on el factor és 1/2, hom diu que la convergència és lineal. Mètodes que convergeixen amb una potència superior

$$\epsilon_{n+1} = \text{constant} \times (\epsilon_n)^m, \quad m > 1$$

s'anomenen superlineals. Convergència lineal vol dir que xifres significatives successives es guanyen linealment amb l'esforç de càlcul.

Donat que els ordinadors utilitzen un nombre fixat, o potser variable per *soft*, però en qualsevol cas finit, de dígits binaris per a representar un nombre real, pot donar-se el cas que, mentre que la nostra funció s'anulli per a un cert valor, no ho faci per cap dels reals que la màquina pot representar. Per tant hom ha de decidir fins quina precisió vol arribar. Per exemple, un error de 10^{-6} és assolible si l'arrel està al voltant de $x = 1$, però no té sentit intentar aconseguir-lo si l'arrel és a la vora de $x = 10^{26}$. Un criteri pràctic pot ser demanar un error final de l'ordre de

$$\alpha(x_1 + x_2)/2$$

on α és la precisió de l'ordinador (el menor nombre real positiu tal que $1 + \alpha$ és encara diferent de 1).

2.2 Mètodes de la *regula falsi* i de la *secant*

Per a funcions que són prou suaus vora l'arrel, els mètodes de la *regula falsi* (posició falsa) i de la *secant* convergeixen generalment més depressa que la biseció, ja que utilitzen més informació sobre la funció. En els dos mètodes se suposa que la funció és aproximadament lineal a la regió d'interès, i la següent millora de l'arrel s'agafa en el punt on la recta talla l'eix. Després de cada iteració un dels punts anteriors s'abandona en favor de la nova aproximació.

L'única diferència entre els dos mètodes està precisament en quin dels punts és abandonat. Mentre que la *regula falsi* es queda amb l'extrem de l'interval anterior on la funció té signe canviat respecte a la nova aproximació, de tal manera que els dos punts continuen tancant una arrel, tal com passava amb la bisecció, el mètode de la secant es queda amb la més recent de les aproximacions anteriors (això requereix una decisió arbitrària en el primer pas), independentment de si el nou interval conté o no el zero que busquem. Quan les coses van bé, el mètode, si en un determinat moment ha escollit l'interval "dolent", torna a posar-se dins d'un de bo al cap d'una estona.

Matemàticament, el mètode de la secant convergeix més ràpidament a la vora d'una arrel d'una funció prou ben comportada. Hom pot demostrar que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon_{k+1} = \text{constant} \times (\epsilon_k)^{1.618\dots}$$

de manera que la convergència és superlineal. El mètode de la secant té, com hem dit, però, la desventatja de que els intervals poden deixar de contenir l'arrel. Per funcions que no co-operin, l'algorisme pot per tant no convergir.

El mètode de la *regula falsi*, com que sovint manté un valor antic, té un ordre de convergència menor. Com que el valor més recent és a vegades l'escollit, sovint el mètode és superlineal.

La figura (2) mostra les primeres iteracions d'una *regula falsi*, mentre que l'actuació del mètode de la secant, amb la mateixa funció i punts inicials, es pot veure a (3).

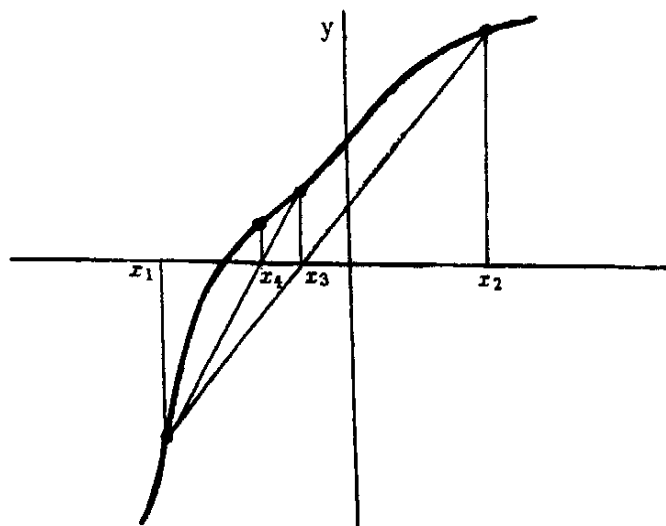


Figura 2: Algunes iteracions d'una *regula falsi*

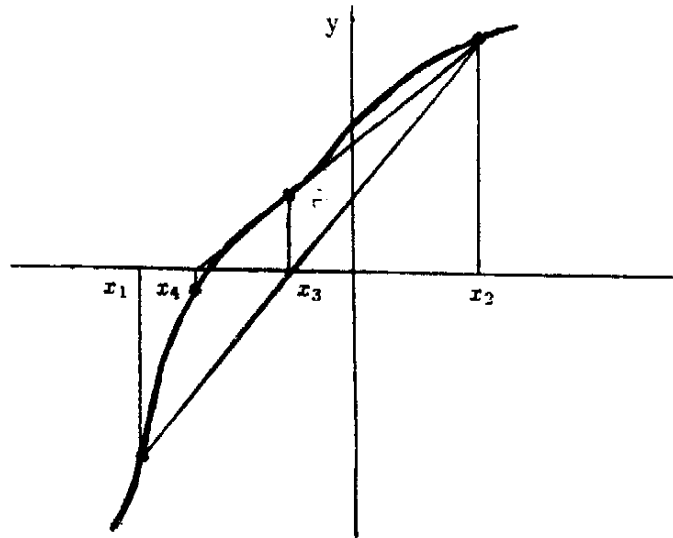


Figura 3: La secant en acció

Analíticament, donats x_1 i x_2 , hom té que l'equació de la recta que passa per $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$ és

$$y = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1)$$

Si anomenem x_3 el punt on aquesta recta talla l'eix de les X, serà

$$0 = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x_3 - x_1)$$

d'on

$$x_3 = x_1 - f(x_1) \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)}$$

Amb el mètode de la secant, ens quedariem amb x_2 i x_3 , mentre que amb la *regula falsi* agafariem x_1 i x_3 si $f(x_2)f(x_3) > 0$, i x_3 i x_2 si $f(x_1)f(x_2) > 0$.

Un exemple on el mètode de la secant fracassa, degut a una mala elecció dels punts inicials, és el mostrat a la figura (4). En canvi la *regula falsi* no hi tindria cap problema, tal com es veu a la figura (5). Finalment, la figura (6) mostra una situació on la *regula falsi* convergeix (com sempre), però ho fa molt lentament, mentre que la bisecció s'acostaria ràpidament a l'arrel.

Una estratègia combinada prou efectiva en qualsevol cas seria utilitzar la *regula falsi* i la bisecció per acostar-se a l'arrel, intercalant passos amb la bisecció quan la *regula falsi* no s'acosti prou depressa, i quan fóssim prou a la vora de l'arrel, sense tenir extrems relatius pel mig, emprar el mètode de la secant per a millorar ràpidament el valor. Tot això, es clar, sempre que no vulguem o no puguem utilitzar la derivada.

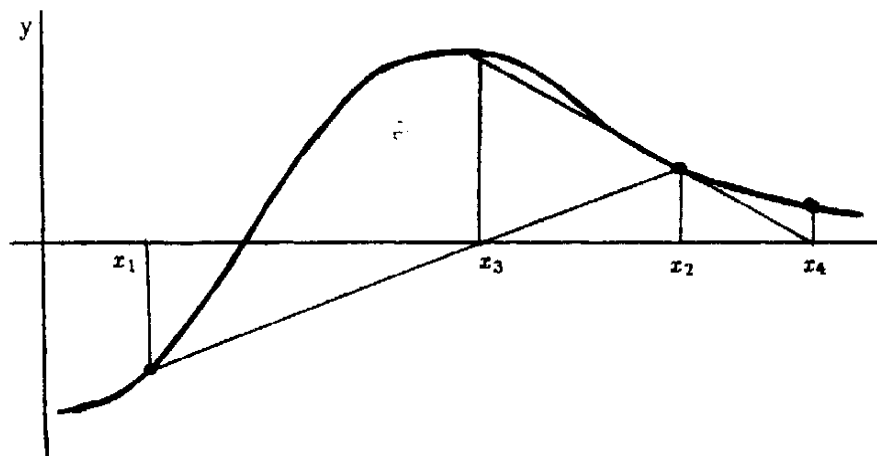


Figura 4: La secant treballant malament

2.3 Mètode de Newton

Aquest mètode es coneix també a vegades amb el nom de mètode de Newton-Raphson i, tal com hem dit, es distingeix dels anteriors pel fet que necessita el coneixement de la funció derivada $f'(x)$ a més de $f(x)$. L'algorisme consisteix en extrapolar la funció per la seva recta tangent en un punt inicial, i agafar com aproximació següent el punt on la recta tangent talla l'eix. A diferència també dels mètodes anteriors, sols ens cal un punt per començar l'algorisme.

Analíticament, el mètode es fonamenta en el desenvolupament de Taylor d'una funció al voltant d'un punt. Anant fins a primer ordre, tenim

$$f(x_2) = f(x_1) + f'(x_1)(x_2 - x_1) + \frac{f''(\xi)}{2}(x_2 - x_1)^2$$

amb ξ entre x_2 i x_1 . Per a valors de $x_2 - x_1$ prou petits i per funcions prou suaus, el reste de Lagrange d'ordre 1

$$R_1(x_2) = \frac{f''(\xi)}{2}(x_2 - x_1)^2$$

pot ser menyspreat i per tant $f(x_2) = 0$ implica

$$0 = f(x_1) + f'(x_1)(x_2 - x_1),$$

és a dir,

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

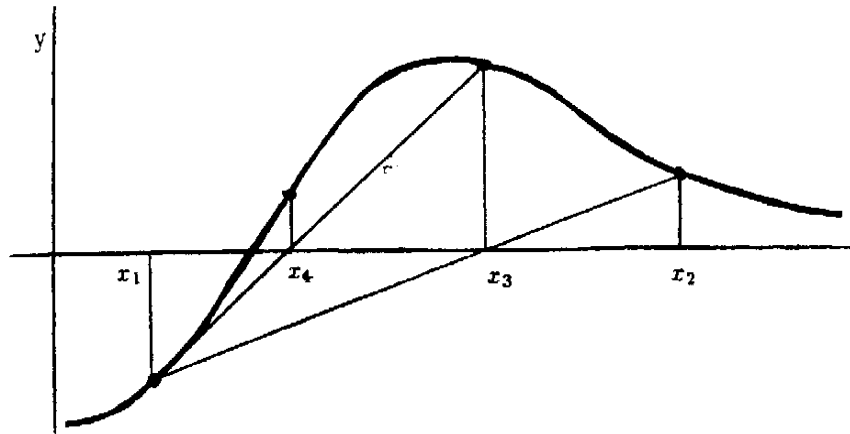


Figura 5: La *regula falsi* on la secant falla

i, en general,

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Gràficament la situació és la mostrada a la figura (7).

Si la diferència entre x_i i l'arrel exacta β és ϵ_i , de manera que $\epsilon_i = x_i - \beta$, tindrem, restant β dels dos membres de l'anterior equació,

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Com que $f(\beta) = 0$, tenim

$$f(x_i) = f'(\beta)\epsilon_i + \frac{f''(\beta)}{2}\epsilon_i^2 + O(\epsilon_i^3)$$

on la notació $O(\epsilon_i^3)$ vol dir termes que van com a mínim com potències de ϵ_i al cub, i que seran per tant molt petits si ϵ_i és petit. De la mateixa manera tenim

$$f'(x_i) = f'(\beta) + f''(\beta)\epsilon_i + O(\epsilon_i^2)$$

Si posem tot això a l'expressió que ens dona l'error de dues iteracions successives, ens queda

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - \frac{f'(\beta)\epsilon_i + 1/2f''(\beta)\epsilon_i^2 + O(\epsilon_i^3)}{f'(\beta) + f''(\beta)\epsilon_i + O(\epsilon_i^2)}$$

Si a la fracció dividim per $f'(\beta)$ i escrivim $\kappa \equiv f''(\beta)/f'(\beta)$, ens quedarà

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - \frac{\epsilon_i + 1/2\kappa\epsilon_i^2 + O(\epsilon_i^3)}{1 + \kappa\epsilon_i + O(\epsilon_i^2)}$$

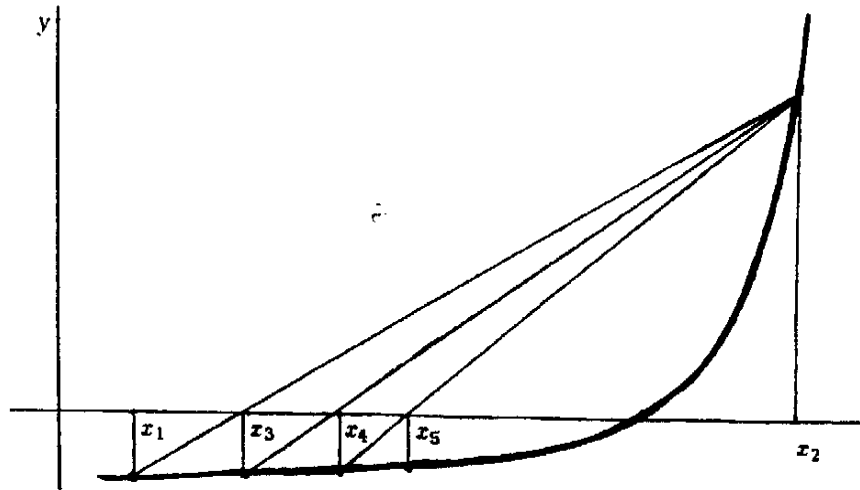


Figura 6: Un problema per biseccionar

Ara expandim el denominador d'acord amb el desenvolupament

$$\frac{1}{1+z} = 1 - z + O(z^2)$$

Ens resulta així

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - (\epsilon_i + 1/2\kappa\epsilon_i^2 + O(\epsilon_i^3))(1 - \kappa\epsilon_i + O(\epsilon_i^2))$$

Multiplicant i agafant fins a termes quadràtics en ϵ ens resulta

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i - (\epsilon_i - \kappa\epsilon_i^2 + 1/2\kappa\epsilon_i^2 + O(\epsilon_i^3))$$

I ara és quan es manifesta la gràcia del mètode de Newton: el terme lineal en ϵ_i desapareix i resulta finalment

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i^2 \frac{f''(\beta)}{2f'(\beta)} + O(\epsilon_i^3)$$

Per tant el mètode de Newton convergeix *quadràticament*, i.e., si en un moment l'error és 10^{-3} serà 10^{-6} al pas següent. S'ha d'anar però amb compte. Tal com passava amb el mètode de la secant, res ens garanteix que ens mantinguem vora un zero. En particular, si ens posem en una zona de derivada quasi zero, o que té un pendent "equivocat", el mètode pot enviar la següent aproximació molt lluny del zero, amb molt poques possibilitats de recuperació. Un exemple d'això es veu a la figura (8).

Naturalment, enxampar un extrem relatiu suposa la defunció immediata de l'algorisme. Una altra patologia que pot presentar-se és quan hom entra en un cicle no convergent, tal com esveu

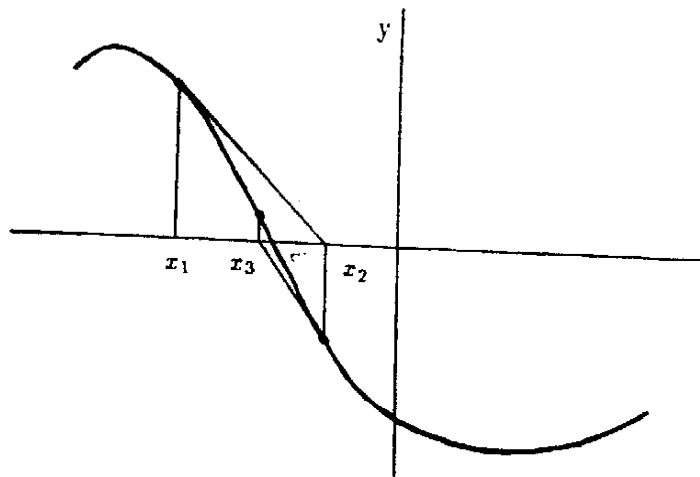


Figura 7: El mètode de Newton

a la figura (9). L'error d'arrodoniment feria que aquest cicle fos inestable, però, encara que finalment entrés en una zona convergent, ens hauria fet perdre força temps.

Resumint, el mètode de Newton, igual que el de la secant, no és convenient en les primeres etapes de la recerca d'una arrel, però una vegada som a la vora, la seva convergència quadràtica fa que sigui el mètode ideal per enllestir la feina aviat.

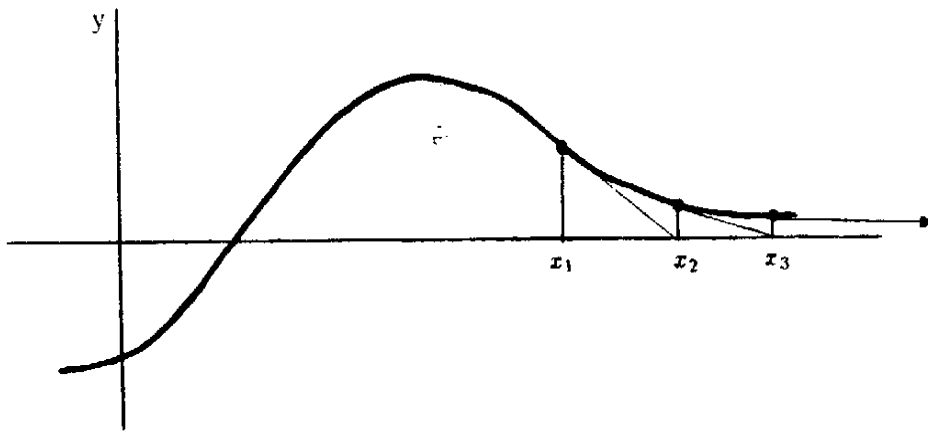


Figura 8: El mètode de Newton agafant la direcció equivocada

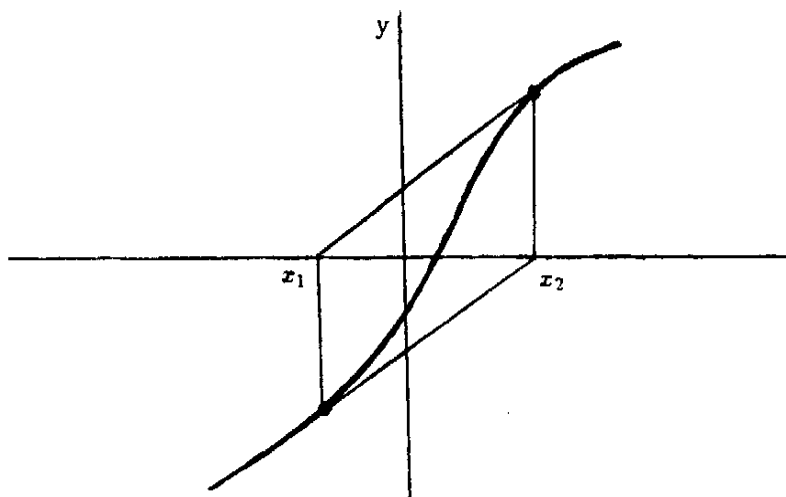


Figura 9: El mètode de Newton donant voltes

3 Integració numèrica

Amb freqüència és necessari obtenir una integral definida d'una funció que no tingui primitiva expressable mitjançant un nombre finit de funcions elementals, o que encara que la tingui resulti molt difícil de determinar. Arran d'això no serà possible aplicar la regla de Barrow per avaluar la integral. En aquestes ocasions es solen usar unes tècniques d'aproximació numèrica, les fórmules de Newton-Cotes, algunes de les quals seguidament exposarem.

Una fórmula d'integració numèrica que utilitza el valor de la funció en els dos extrems $f(a)$ i $f(b)$ s'anomena fórmula tancada. Però, de vegades, pot ser que ens convingui integrar una funció el valor de la qual en un del extrems, o en els dos, o bé és difícil o bé no es pot calcular, com per exemple succeeix quan ens cal fer algunes integrals impròpies. Voldrem llavors una fórmula oberta que calculi la integral usant sols els valors de la funció en els punts interiors de l'interval.

3.1 Fórmules de Newton-Cotes tancades

Sigui f una funció coneguda a $n+1$ punts, els x_0, x_1, \dots, x_n , separats tots entre si per una mateixa distància h . Ens proposem calcular numèricament el valor de $\int_a^b f(x)dx$ coneixent els valors que pren en els punts $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$. Les fórmules d'integració on les abscisses x_i estan distribuïdes uniformement reben el nom de fórmules de Newton-Cotes.

3.1.1 Regla del trapezi

La fórmula més senzilla que podem considerar per calcular una integral definida serà aquella que utilitzi només dos punts, els dos extrems $a = x_0$ i $b = x_1$, on $x_1 = x_0 + h$, i ens proposem obtenir:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$$

Començarem per desenvolupar la funció f segons Taylor al voltant del punt x_0 , fins a ordre 1, així doncs:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + O(x - x_0)^2$$

Substituint aquest en la integral inicial i integrant es té:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = f(x_0)(x_1 - x_0) + f'(x_0)\frac{(x_1 - x_0)^2}{2} + O(x_1 - x_0)^3$$

on només necessitem substituir $f'(x_0)$ per obtenir el resultat final. Per calcular $f'(x_0)$, aplicarem el desenvolupament anterior per x_1 ,

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) + O(x_1 - x_0)^2$$

d'on aïllant, tenim:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} + O(x_1 - x_0)^2$$

Llavors, substituint-l'ho en la última expressió de la integral, així com introduint $h = x_1 - x_0$ s'obté:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \simeq \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_1))$$

o, equivalentment,

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$$

Això s'anomena regla del trapezi, ja que geomètricament (vegeu la figura (10)) correspon a aproximar la funció f per la recta que uneix els dos punts extrems $(a, f(a)) = (x_0, f(x_0))$ i $(b, f(b)) = (x_1, f(x_1))$. Només cal recordar que segons la fórmula de l'àrea del trapezi, semisuma de les dues bases $f(x_0)$ i $f(x_1)$ per l'alçada h , aquesta àrea A és:

$$A = \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} h$$

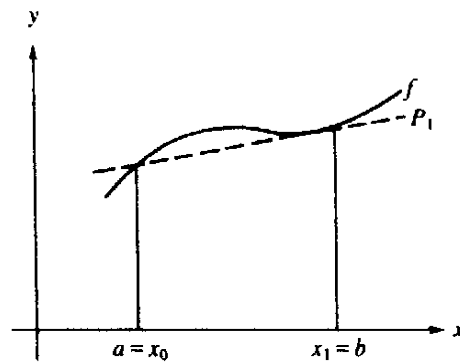


Figura 10: La regla del trapezi

3.1.2 Regla de Simpson

Podem refinar l'aproximació si considerem un punt més, això és, un total de tres punts, els dos extrems i el punt intermig, $a = x_0, x_1, x_2 = b$, on $x_1 = x_0 + h$ i $x_2 = x_1 + h$. Per calcular

$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx$ considerem, com abans, el desenvolupament segons Taylor, per la funció f a l'entorn del punt mig $x_1 = \frac{a+b}{2}$, fins a ordre 2.

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 + O(x - x_1)^3$$

aproximació que substituïda en l'expressió que volem calcular, i integrant dóna:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = 2f(x_1)h + \frac{1}{3}h^3 f''(x_1) + O(h^5)$$

on hem introduït $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$. Ara només ens cal obtenir $f''(x_1)$ a partir del desenvolupament usat amb anterioritat, per $f(x_0)$, $f(x_2)$ i sumant, s'aïlla:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h} + O(h^2)$$

valor que portem a la última integral:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \simeq \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2))$$

o el que és el mateix:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b))$$

expressió que es coneix com la fórmula de Simpson, i és la més popular de les regles d'integració numèrica. Correspon geomètricament (figura (11)) a aproximar la funció per una paràbola que passa pels punts $(a, f(a)) = (x_0, f(x_0))$, $(\frac{a+b}{2}, f(\frac{a+b}{2})) = (x_1, f(x_1))$ i $(b, f(b)) = (x_2, f(x_2))$. Per comprovar-ho només cal integrar l'equació general d'una paràbola $p(x) = Ax^2 + Bx + C$ entre els extrems que estem considerant.

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x)dx &= \int_a^b (Ax^2 + Bx + C)dx = \frac{A}{3}(b^3 - a^3) + \frac{B}{2}(b^2 - a^2) + C(b - a) \\ &= \frac{b-a}{6}(2A(b^2 + ab + a^2) + 3B(b+a) + 6C) \\ &= \frac{b-a}{6}(p(a) + 4p(\frac{a+b}{2}) + p(b)) \end{aligned}$$

3.1.3 Regles amb un nombre superior de punts

De manera anàloga es poden construir fórmules d'integració que incorporin un nombre superior de punts. Per a quatre punts, hi ha la regla 3/8 de Simpson:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}(f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)) + O(h^5)$$

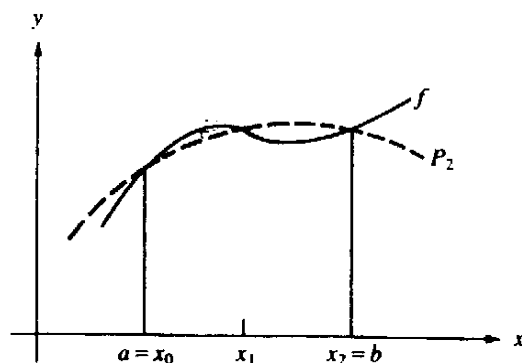


Figura 11: La regla de Simpson

i per a cinc punts, hi ha la regla de Bode:

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}(7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)) + O(h^7)$$

i a partir d'aquest moment les fórmules deixen de tenir nom propi. En general s'anomenen totes elles com fórmules tancades de Newton-Cotes. Aquestes fórmules són apropiades per a ser utilitzades sobre intervals d'integració petits, i per tant cal plantejar-se la utilització segmentada i reiterada de les mateixes.

3.1.4 Regla del trapezi estesa

Suposem que volem utilitzar la regla del trapezi obtinguda abans n vegades per realitzar la integració en els intervals $[x_0, x_1], [x_1, x_2], [x_2, x_3], \dots, [x_{n-1}, x_n]$. Afegint les diferents contribucions que s'obtidrien al aplicar-la en cada subinterval i simplificant aconseguim la regla del trapezi estesa:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)) + O(h^3)$$

on $h = \frac{b-a}{n}$. Aquesta fórmula es pot expressar també de forma equivalent com:

$$T_n = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n} \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^n f(x_i) \right) + O\left(\frac{b-a}{n}\right)^2$$

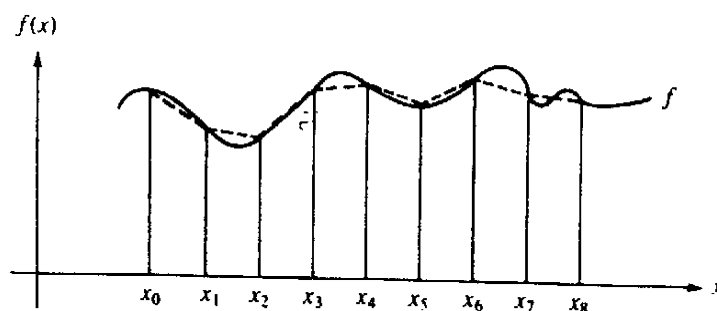


Figura 12: La regla del trapezi estesa

Es evident que s'obtidran aproximacions més bones en augmentar el nombre de punts de la partició considerada, tal com es veu a la figura (12).

Abans de presentar l'extensió de la fórmula de Simpson donem un exemple, que també repetirem després en aquell cas, i ens servirà per comparar els dos mètodes.

EXEMPLE D'APLICACIÓ. Calculeu la integral $\int_0^\pi \sin x dx$ per $n = 4, 8$ i 16 , comparant finalment amb el resultat prou conegut de $\int_0^\pi \sin x dx = 2$.

La partició de l'interval $[0, \pi]$, en el cas $n = 4$ queda com: $x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{4}, x_2 = \frac{\pi}{2}, x_3 = \frac{3\pi}{4}, x_4 = \pi$. Per tant:

$$T_4 = \frac{\pi}{4} \left(\frac{\sin 0 + \sin \pi}{2} + \sin \frac{\pi}{4} + \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{3\pi}{4} \right) = 1.896$$

Per $n = 8$ la partició és: $x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{8}, x_2 = \frac{\pi}{4}, x_3 = \frac{3\pi}{8}, x_4 = \frac{\pi}{2}, x_5 = \frac{5\pi}{8}, x_6 = \frac{3\pi}{4}, x_7 = \frac{7\pi}{8}, x_8 = \pi$. Per tant:

$$T_8 = \frac{\pi}{8} \left(\frac{\sin 0 + \sin \pi}{2} + \sin \frac{\pi}{8} + \sin \frac{\pi}{4} + \sin \frac{3\pi}{8} + \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{5\pi}{8} + \sin \frac{3\pi}{4} + \sin \frac{7\pi}{8} \right) = 1.974$$

Finalment, repetim el mateix procés per $n = 16$. Tenim la partició següent: $x_0 = 0, x_1 = \frac{\pi}{16}, x_2 = \frac{\pi}{8}, x_3 = \frac{3\pi}{16}, x_4 = \frac{\pi}{4}, x_5 = \frac{5\pi}{16}, x_6 = \frac{3\pi}{8}, x_7 = \frac{7\pi}{16}, x_8 = \frac{\pi}{2}, x_9 = \frac{9\pi}{16}, x_{10} = \frac{5\pi}{8}, x_{11} = \frac{11\pi}{16}, x_{12} = \frac{3\pi}{4}, x_{13} = \frac{13\pi}{16}, x_{14} = \frac{7\pi}{8}, x_{15} = \frac{15\pi}{16}, x_{16} = \pi$ i la integral s'obté així

$$T_{16} = \frac{\pi}{16} \left(\frac{\sin 0 + \sin \pi}{2} + \sin \frac{\pi}{16} + \sin \frac{\pi}{8} + \sin \frac{3\pi}{16} + \sin \frac{\pi}{4} \right)$$

$$\begin{aligned}
& + \sin \frac{5\pi}{16} + \sin \frac{3\pi}{8} + \sin \frac{7\pi}{16} + \sin \frac{\pi}{2} + \sin \frac{9\pi}{16} + \sin \frac{5\pi}{8} + \sin \frac{11\pi}{16} + \sin \frac{3\pi}{4} + \\
& + \sin \frac{13\pi}{16} + \sin \frac{7\pi}{8} + \sin \frac{15\pi}{16}) = 1.994,
\end{aligned}$$

valor més proper al resultat correcte, però que encara presenta un error de l'ordre de 10^{-3} .

3.1.5 Regla de Simpson estesa

De la mateixa manera que hem efectuat l'extensió de la regla del trapezi, aplicant successivament la regla de Simpson cada tres punts obtenim la regla de Simpson estesa (vegeu la figura (13)):

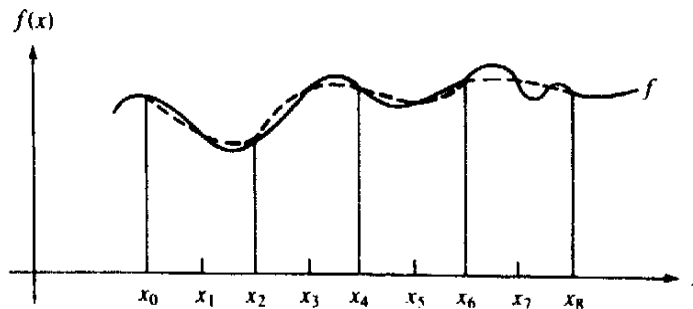


Figura 13: La regla de Simpson estesa

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots \\
&\dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)) + O(h^4)
\end{aligned}$$

on $h = \frac{b-a}{n}$ i n és parell doncs s'aplica l'extensió de tres en tres punts, i així per exemple tenim 0, 1, 2; 2, 3, 4; 4, 5, 6 ..., on evidentment la n final o és 2 o 4 o 6 etcètera. També s'acostuma a presentar la fórmula anterior com:

$$S_n = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{3n} (f(a) + f(b) + 4 \sum_{i \text{ senar}} f(x_i) + 2 \sum_{j \text{ parell}} f(x_j)) + O\left(\frac{b-a}{n}\right)^4$$

Com en el apartat anterior presentem una aplicació d'aquest procediment.

EXEMPLE D'APLICACIÓ. Calculeu $\int_0^\pi \sin x dx$ per $n = 4$ i 8 , comparant amb el resultat exacte de $\int_0^\pi \sin x dx = 2$.

Evidentment les particions de l'interval $[0, \pi]$ per $n = 4$ i 8 són les mateixes realitzades en el cas de la regla del trapezi estesa. Pasem per tant directament a aplicar la fórmula per $n = 4$:

$$S_4 = \frac{\pi}{12}(\sin 0 + 4 \sin \frac{\pi}{4} + 2 \sin \frac{\pi}{2} + 4 \sin \frac{3\pi}{4} + \sin \pi) = 2.005$$

i per $n = 8$:

$$S_8 = \frac{\pi}{12}(\sin 0 + 4 \sin \frac{\pi}{8} + 2 \sin \frac{\pi}{4} + 4 \sin \frac{3\pi}{8} + 2 \sin \frac{\pi}{2} + 4 \sin \frac{5\pi}{8} + 2 \sin \frac{3\pi}{4} + 4 \sin \frac{7\pi}{8} + \sin \pi) = 2.000$$

No hem considerat en aquest cas $n = 16$, ja que per $n = 8$ ja hem aconseguit superar el nivell de precisió obtingut abans amb $n = 16$ usant la regla del trapezi estesa.

3.1.6 Errors

Quan considerem la regla del trapezi estesa, en cada interval $[x_i, x_{i+1}]$ aproximem la funció $f(x)$ per una recta $L_1(x)$. Per tant pel càlcul de l'error:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} E(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} x_{i+1}(f(x) - L_1(x)) dx$$

farem servir la fórmula de l'error de la interpolació lineal:

$$E(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_i)(x - x_{i+1})$$

substituint resulta:

$$\frac{f''(\xi')}{2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} (x - x_i)(x - x_{i+1}) dx = -\frac{1}{2} f''(\xi') \frac{h^3}{6}, \xi' \in (x_i, x_{i+1})$$

i l'error total és:

$$|E| = \frac{nf''(\theta)}{12} h^3 = \frac{(b-a)f''(\theta)}{12} h^2, \theta \in (a, b)$$

on hem suposat f'' contínua en $[a, b]$.

D'aquí es dedueix que és un mètode de segon ordre, és a dir, tendeix a zero com el quadrat de h , i és exacte per polinomis de primer grau.

Normalment és difícil acotar la derivada segona i aleshores el que es fa és calcular aproximacions per $n = 1, 2, 4, 8, \dots$. D'aquesta manera s'aprofiten els càlculs fets en les aproximacions prèvies. Quan la diferència entre una aproximació i la anterior és menor que la cota d'error prefixada es finalitza el procés.

Calculem ara l'error comés per la regla de Simpson estesa. Hem de calcular:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

Si fem el canvi $t = x - x_i$, n'hi ha prou amb trobar:

$$\int_{-h}^h f(x) dx$$

amb l'avantatge de poder fer servir el desenvolupament de f al voltant del zero,

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots + \frac{f^{(5)}(0)}{5!}x^5 + O(x^6)$$

integrant en $[-h, h]$ tenim:

$$\begin{aligned} \int_{-h}^h f(x) dx &= \\ &= 2hf(0) + \frac{f''(0)}{2!} \int_{-h}^h x^2 dx + \frac{f^{(4)}(0)}{4!} \int_{-h}^h hx^4 dx + O(h^7) = \\ &= 2hf(0) + \frac{h^3}{3} f''(0) + \frac{h^5}{60} f^{(4)}(0) + O(h^7) = \end{aligned}$$

Per conèixer el valor de $f''(0)$, fem els desenvolupaments de $f(h) - f(0)$ i $f(-h) - f(0)$ que sumats membre a membre donen:

$$f(h) - 2f(0) + f(-h) = h^2 f''(0) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(0) + O(h^6)$$

d'on podem aïllar:

$$f''(0) = \frac{f(h) - 2f(0) + f(-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(0) + O(h^6)$$

Substituint ara en la integral s'obté:

$$\int_{-h}^h f(x) dx = \frac{h}{3} [f(-h) + 4f(0) + f(h)] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(0) + O(h^7)$$

i desfent el canvi de variable inicial, i comparant amb la fórmula aproximada del mètode de Simpson s'observa que l'error en el terme i-èssim és:

$$E_i = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(x_i) + O(h^7)$$

com tenim $\frac{n}{2}$ sumands ($i = 0, 2, \dots, n$) l'error total, prescindint del signe, és:

$$E = \frac{b-a}{2h} \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\theta) + O(h^6), \theta \in (a, b)$$

Per tant, si h és suficientment petit es té la següent cota d'error:

$$|E| \leq \frac{M^{(4)}(b-a)}{180} h^4$$

Això ens diu que el mètode és de quart ordre, i per tant exacte per polinomis de grau menor o igual que tres.

Com en el cas dels trapezis, pot ser difícil trobar una bona cota d'error, i s'actua de forma anàloga finalitzant el procés quan la diferència entre dues aproximacions consecutives es menor que l'error prefixat.

3.1.7 Integració de Romberg

Hem vist que per obtenir el valor d'una integral pel mètode dels trapezis es calculen aproximacions numèriques $T(h)$ depenents d'un paràmetre h al que en diem pas. El valor exacte es troba quan h tendeix a zero. Però considerar passos h cada vegada més petits comporta dificultats: el nombre d'operacions augmenta enormement i apareixen importants errors d'arrodoniment o per cancel·lació.

El mètode de Romberg es basa en aplicar a la regla dels trapezis un mètode d'accelerar la convergència (mètode d'extrapolació de Richardson) per tal d'evitar les anteriors dificultats.

L'error comés en el cas dels Trapezis és:

$$E = \frac{(b-a)f''(\theta)}{12}h^2, \theta \in (a, b)$$

on $f''(\xi)$ depèn del valor de h . De fet es demostra que aquest error també es pot expressar com:

$$E = a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \dots$$

on les a_i són constants independents de h .

Denotem per I el valor exacte de la integral $\int_a^b f(x)dx$ i per T_n el seu valor aproximat, sent n el nombre de subintervalls, aleshores:

$$I = T_n + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \dots$$

i doblant el nombre de subintervalls tenim:

$$I = T_{2n} + a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + a_4\left(\frac{h}{2}\right)^4 + a_6\left(\frac{h}{2}\right)^6 + \dots$$

Multiplicant la última per quatre i restant-li l'anterior s'obté:

$$3I = 4T_{2n} - T_n - \frac{3}{4}a_4h^4 + \dots$$

és a dir,

$$I = \frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n - \frac{1}{4}a_4h^4 + \dots$$

de manera que ara $\frac{4}{3}T_{2n} - \frac{1}{3}T_n$ aproximen I amb un error de l'ordre de h^4 , mentre que usant el mètode dels trapezis ho feiem amb un error de l'ordre de h^2 .

En les fórmules obertes que s'introdueixen el següent apartat, interessarà, per aprofitar els càlculs, triplicar el nombre de punts i no doblar-l'ho com fins ara. Llavors l'expressió que usarem per aproximar la corresponent integral serà $\frac{9}{8}T_{3n} - \frac{1}{8}T_n$. Expressió que es pot deduir de manera anàloga a la exposada anteriorment.

3.2 Fórmules de Newton-Cotes obertes

Ens plantegem seguidament obtenir una expressió que ens permeti avaluar una integral quan no podem calcular els valors de la funció en les extrems d'integració. Es pot demostrar que en aquest cas l'equivalent de la regla del trapezi estesa ve donat per l'expressió:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = h(f(x_{\frac{1}{2}}) + f(x_{\frac{3}{2}}) + f(x_{\frac{5}{2}}) + \dots + f(x_{n-\frac{1}{2}})) + O(h^3)$$

on hem suprimit els punts extrems dels subintervalls $[x_0, x_1], [x_1, x_2], [x_2, x_3], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ i en el seu lloc hem considerat la partició de l'interval $[x_0, x_n]$ formada pels respectius punts centrals $x_{\frac{1}{2}}, x_{\frac{3}{2}}, x_{\frac{5}{2}}, \dots, x_{n-\frac{1}{2}}$ dels subintervalls esmentats. Evidentment d'aquesta forma queden exclosos els extrems d'integració x_0 i x_n .

Llavors si m és el número de punts mitjans a considerar, tenim una expressió equivalent de la fórmula anterior:

$$T_m = \frac{b-a}{m} (f(a + \frac{1}{2m}) + f(a + \frac{3}{2m}) + f(a + \frac{5}{2m}) + \dots + f(b - \frac{1}{2m})) + O(h^3)$$

De manera semblant a l'expressió donada per las fórmules tancades, la forma més econòmica d'obtenir una expressió amb un error de l'ordre de $\frac{1}{m^4}$ és usant el mètode de Romberg:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{9}{8}T_{3m} - \frac{1}{8}T_m$$

on les T_{3m} i T_m són avaluades segons la fórmula presentada amb anterioritat, i on el subíndex representa el nombre de punts interiors que es fan servir en el càlcul.

EXEMPLE D'APLICACIÓ. Calculeu amb quatre xifres decimals la integral impròpia $I = \int_0^{+\infty} e^{-x^2} dx$.

Al ser una integral impròpia, cal en primer lloc veure si existeix. Això és una regla general: el pitjot pecat que pot cometre algú que utilitzi un mètode numèric és emprar-lo sense assegurar-se primer que allò que vol calcular existeix. En el nostre cas tenim que, per exemple,

$$\lim_{x \rightarrow \infty} e^{-x^2} x^{1.3} = 0,$$

de manera que la integral existeix (de fet es pot calcular exactament, i val $\sqrt{\pi/2}$). Ara podem passar al càlcul numèric.

En primer lloc cal fer un canvi de variable per convertir l'extrem infinit en un extrem finit. Sigui $x = -\log z$. llavors $dx = -\frac{dz}{z}$, i els extrems d'integració són per $x = 0$, $z = 1$, i per $x = +\infty$, $z = 0$. Ens queda així

$$I = - \int_1^0 \frac{e^{-(-\log z)^2}}{z} dz = \int_0^1 \frac{1}{z^{1+\log z}} dz$$

Encara que aquesta darrera integral només presenta problemes en l'extrem $z = 0$, aplicarem la fórmula oberta com si els dos extrems fossin problemàtics. Començarem per calcular els T_m i

després aplicarem el mètode de Romberg $I \approx \frac{9}{8}T_{3m} - \frac{1}{8}T_m$. Per tant caldrà calcular T_m per $m = 1, 3, 9, \dots$ fins que $(\frac{1}{m})^4$ sigui del ordre de 10^{-4} , doncs volem quatre xifres decimals. Segons s'observa en la taula següent, caldrà arribar fins $m = 9$.

m	m^4	$(1/m)^4$
1	1	1
3	81	0.0123
9	6561	0.000152

Donat que l'expressió $\frac{9}{8}T_{3m} - \frac{1}{8}T_m$ dona un error de $(\frac{1}{m})^4$, si volem que aquest error sigui de l'ordre de 10^{-4} haurà de ser $m = 9$, i necessitarem calcular fins $T_{3m} = T_{27}$.

Procedim doncs, amb la funció $f(z) = \frac{1}{z^{1+\log z}}$, a calcular T_m per $m = 1, 3, 9$ i 27 , on els extrems són $a = 0$ i $b = 1$.

$$\text{Per } m = 1, T_1 = f(\frac{1}{2}) = 1.237006.$$

$$\text{Per } m = 3, T_3 = \frac{1}{3}(f(\frac{1}{6}) + f(\frac{1}{2}) + f(\frac{5}{6})) = 0.879938.$$

$$\text{Per } m = 9, T_9 = \frac{1}{9}(f(\frac{1}{18}) + f(\frac{1}{6}) + f(\frac{5}{18}) + f(\frac{7}{18}) + f(\frac{1}{2}) + f(\frac{11}{18}) + f(\frac{13}{18}) + f(\frac{5}{6}) + f(\frac{17}{18})) = 0.886721.$$

$$\text{Finalment per } m = 27, T_{27} = \frac{1}{27}(f(\frac{1}{54}) + f(\frac{1}{18}) + f(\frac{5}{54}) + f(\frac{7}{54}) + f(\frac{1}{6}) + f(\frac{11}{54}) + f(\frac{13}{54}) + f(\frac{5}{18}) + f(\frac{17}{54}) + f(\frac{19}{54}) + f(\frac{7}{18}) + f(\frac{23}{54}) + f(\frac{25}{54}) + f(\frac{1}{2}) + f(\frac{29}{54}) + f(\frac{31}{54}) + f(\frac{11}{18}) + f(\frac{35}{54}) + f(\frac{37}{54}) + f(\frac{13}{18}) + f(\frac{41}{54}) + f(\frac{43}{54}) + f(\frac{5}{6}) + f(\frac{47}{54}) + f(\frac{49}{54}) + f(\frac{51}{54}) + f(\frac{53}{54})) = 0.886284.$$

Llavors $\frac{9}{8}T_3 - \frac{1}{8}T_1 = 0.8353$, també $\frac{9}{8}T_9 - \frac{1}{8}T_3 = 0.8875$ amb un error de l'ordre de 10^{-2} , això és amb dues xifres correctes, i finalment $\frac{9}{8}T_{27} - \frac{1}{8}T_9 = 0.8862$, amb un error de 10^{-4} , és a dir amb quatre xifres decimals.

En realitat per aconseguir el resultat desitjat de 0.8862 només caldria obtenir T_{27} i T_9 , però hem realitzat els càlculs anteriors de T_1 i T_3 perquè el procés quedés més clar, donat que els valors de la funció en els punts $\frac{1}{6}, \frac{1}{2}$ i $\frac{5}{6}$ ens eren necessaris per obtenir els següents T_9 i T_{27} , i en conseqüència calcular T_1 i T_3 només significa efectuar un parell de sumes i un quocient. Com a simple comprovació, $\sqrt{\pi/2} = 0.886227$

4 Exercicis resolts

1. La següent taula

x	1.0	2.0	3.0	4.0
y	1	15	61	157

mostra valors de la funció polinòmica $f(x) = 3x^3 - 2x^2 - x + 1$

- (a) Calculeu els valors interpolats polinòmicament per als punts $x = 2.5$ i $x = 11$.
- (b) Digueu quin és l'error real dels vostres càlculs i expliqueu el motiu d'aquest fet.

Solució:

- (a) Donat que el polinomi interpolador és únic podem obtenir el resultat usant el mètode que volguem, i escollim el de Neville.

Segons la taula es té: per $i = 0$, $x_0 = 1.0$, $y_0 = 1 = P_0$, per $i = 1$, $x_1 = 2.0$, $y_1 = 15 = P_1$, per $i = 2$, $x_2 = 3.0$, $y_2 = 61 = P_2$, i finalment per $i = 3$, $x_3 = 4.0$, $y_3 = 157 = P_3$. Tenim així la primera columna de l'algorisme de Neville.

Començarem per calcular el valor del polinomi interpolador per $x = 2.5$. Els termes de la segona columna són:

$$\begin{aligned} P_{01} &= \frac{P_0(x - x_1) + (x_0 - x)P_1}{x_0 - x_1} = \\ &= \frac{1(2.5 - 2) + (1 - 2.5)15}{1 - 2} = 22 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{12} &= \frac{P_1(x - x_2) + (x_1 - x)P_2}{x_1 - x_2} = \\ &= \frac{15(2.5 - 3) + (2 - 2.5)61}{2 - 3} = 38 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{23} &= \frac{P_2(x - x_3) + (x_2 - x)P_3}{x_2 - x_3} = \\ &= \frac{61(2.5 - 4) + (3 - 2.5)157}{3 - 4} = 13 \end{aligned}$$

Amb aquests resultats podem obtenir els elements de la tercera columna:

$$\begin{aligned} P_{012} &= \frac{P_{01}(x - x_2) + (x_0 - x)P_{12}}{x_0 - x_2} = \\ &= \frac{22(2.5 - 3) + (1 - 2.5)38}{1 - 3} = 34 \end{aligned}$$

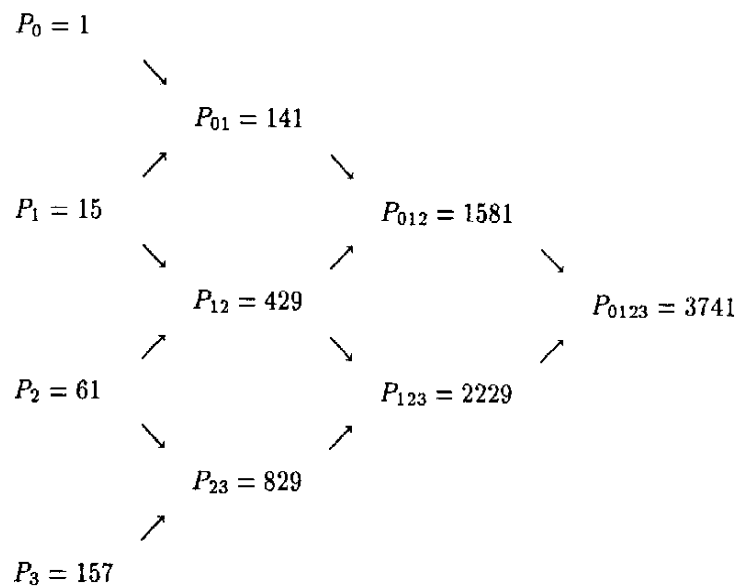
$$\begin{aligned}
 P_{123} &= \frac{P_{12}(x - x_3) + (x_1 - x)P_{23}}{x_1 - x_3} = \\
 &= \frac{38(2.5 - 4) + (2 - 2.5)13}{2 - 4} = 31.75
 \end{aligned}$$

Finalment, l'únic element de la quarta columna és:

$$\begin{aligned}
 P_{0123} &= \frac{P_{012}(x - x_3) + (x_0 - x)P_{123}}{x_0 - x_3} = \\
 &= \frac{34(2 \cdot 5 - 4) + (1 - 2 \cdot 5)31.75}{1 - 4} = 32.875
 \end{aligned}$$

que dona el valor interpolat per $x = 2.5$ en el cas de la funció $f(x)$ donada.

Per $x = 11$, es repeteixen els mateixos passos i el resultat és el següent:



Per tant, el resultat de la interpolació per la funció $f(x)$ en $x = 11$ és **3741**.

- (b) No hi ha cap error donat que quatre punts determinen unívocament el polinomi de tercer grau que passa per ells. En particular es pot comprovar que si substituïm $x = 2.5$ i $x = 11$ en la funció $f(x)$ el valor que s'obté és exactament el corresponent P_{0123} calculat a l'apartat a).

$$f(2.5) = 3(2.5)^3 - 2(2.5)^2 - 2.5 + 1 = 32.875 = P_{0123}$$

$$f(11) = 3 \cdot 11^3 - 2 \cdot 11^2 - 11 + 1 = 3741 = P_{0123}$$

2. Donada la taula

x	-1.3	-0.4	0.1	1.7	1.9	2.3	2.9
y	-0.96	-0.39	0.1	0.99	0.95	0.75	0.24

que correspon a la funció $f(x) = \sin x$, es demana calcular els valors interpolats polinòmicament per $x = 2.5$ i $x = 5$ junt amb una estimació de l'error comés.

Solució:

Com és sabut la interpolació dóna resultats prou bons per punts com $x = 2.5$ que es situa entre els tabulats, però molt erronis per valors com $x = 5$ totalment fora dels que figuren a la taula. Seguidament procedim a aplicar el mètode de Neville i a comprovar la situació descrita.

Segons la taula tenim per $i = 0$, $x_0 = -1.3$, $y_0 = -0.96 = P_0$, per $i = 1$, $x_1 = -0.4$, $y_1 = -0.39 = P_1$, per $i = 2$, $x_2 = 0.1$, $y_2 = 0.1 = P_2$, per $i = 3$, $x_3 = 1.7$, $y_3 = 0.99 = P_3$, per $i = 4$, $x_4 = 1.9$, $y_4 = 0.95 = P_4$, per $i = 5$, $x_5 = 2.3$, $y_5 = 0.75 = P_5$, i finalment $i = 6$, $x_6 = 2.9$, $y_6 = 0.24 = P_6$.

Aquests $P_0, P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6$ ens donen els termes de la primera columna de l'algorisme de Neville. Calculem les restants columnes per $x = 2.5$.

Els valors $P_{01}, P_{12}, P_{23}, P_{34}, P_{45}, P_{56}$ de la segona columna vénen donats per:

$$\begin{aligned} P_{01} &= \frac{P_0(x - x_1) + (x_0 - x)P_1}{x_0 - x_1} = \\ &= \frac{-0.96(2.5 + 0.4) + (-1.3 - 2.5)(-0.39)}{-1.3 + 0.4} = 0.179999 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{12} &= \frac{P_1(x - x_2) + (x_1 - x)P_2}{x_1 - x_2} = \\ &= \frac{-0.39(2.5 - 0.1) + (-0.4 - 2.5)0.1}{-0.4 - 0.1} = 0.492000 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{23} &= \frac{P_2(x - x_3) + (x_2 - x)P_3}{x_2 - x_3} = \\ &= \frac{0.1(2.5 - 1.7) + (0.1 - 2.5)0.99}{0.1 - 1.7} = 0.322500 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{34} &= \frac{P_3(x - x_4) + (x_3 - x)P_4}{x_3 - x_4} = \\ &= \frac{0.99(2.5 - 1.9) + (1.7 - 2.5)0.95}{1.7 - 1.9} = 1.230000 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{45} &= \frac{P_4(x - x_5) + (x_4 - x)P_5}{x_4 - x_5} = \\
&= \frac{0.95(2.5 - 2.3) + (1.9 - 2.5)0.75}{1.9 - 2.3} = 1.650000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{56} &= \frac{P_5(x - x_6) + (x_5 - x)P_6}{x_5 - x_6} = \\
&= \frac{0.75(2.5 - 2.9) + (2.3 - 2.5)0.24}{2.3 - 2.9} = 2.280000
\end{aligned}$$

Amb aquests resultats podem calcular la tercera columna:

$$\begin{aligned}
P_{012} &= \frac{P_{01}(x - x_2) + (x_0 - x)P_{12}}{x_0 - x_2} = \\
&= \frac{0.179999(2.5 - 0.1) + (-1.3 - 2.5)0.492}{-1.3 - 0.1} = 0.581143
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{123} &= \frac{P_{12}(x - x_3) + (x_1 - x)P_{23}}{x_1 - x_3} = \\
&= \frac{0.492(2.5 - 1.7) + (-0.4 - 2.5)0.3225}{-0.4 - 1.7} = 0.419357
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{234} &= \frac{P_{23}(x - x_4) + (x_2 - x)P_{34}}{x_2 - x_4} = \\
&= \frac{0.3225(2.5 - 1.9) + (0.1 - 2.5)1.23}{0.1 - 1.9} = 0.524166
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{345} &= \frac{P_{34}(x - x_5) + (x_3 - x)P_{45}}{x_3 - x_5} = \\
&= \frac{1.23(2.5 - 2.3) + (1.7 - 2.5)1.65}{1.7 - 2.3} = 0.390000
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{456} &= \frac{P_{45}(x - x_6) + (x_4 - x)P_{56}}{x_4 - x_6} = \\
&= \frac{1.65(2.5 - 2.9) + (1.9 - 2.5)2.28}{1.9 - 2.9} = 0.768000
\end{aligned}$$

Utilitzant aquestes dades calculem la quarta columna amb els respectius valors de:

$$\begin{aligned}
P_{0123} &= \frac{P_{012}(x - x_3) + (x_0 - x)P_{123}}{x_0 - x_3} = \\
&= \frac{0.581143(2.5 - 1.7) + (-1.3 - 2.5)0.419357}{-1.3 - 1.7} = 0.484071
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{1234} &= \frac{P_{123}(x - x_4) + (x_1 - x)P_{234}}{x_1 - x_4} = \\
&= \frac{0.419357(2.5 - 1.9) + (-0.4 - 2.5)0.524166}{-0.4 - 1.9} = 0.460369
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{2345} &= \frac{P_{234}(x - x_5) + (x_2 - x)P_{345}}{x_2 - x_5} = \\
&= \frac{0.524166(2.5 - 2.3) + (0.1 - 2.5)0.87}{0.1 - 2.3} = 0.499772
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{3456} &= \frac{P_{345}(x - x_6) + (x_3 - x)P_{456}}{x_3 - x_6} = \\
&= \frac{0.87(2.5 - 2.9) + (1.7 - 2.5)0.768}{1.7 - 2.9} = 0.012
\end{aligned}$$

Substituint aquests en les fórmules dels P_{01234} , P_{12345} , P_{23456} obtenim els termes de la cinquena columna:

$$\begin{aligned}
P_{01234} &= \frac{P_{0123}(x - x_4) + (x_0 - x)P_{1234}}{x_0 - x_4} = \\
&= \frac{0.484071(2.5 - 1.9) + (-1.3 - 2.5)0.460369}{-1.3 - 1.9} = 0.470739
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{12345} &= \frac{P_{1234}(x - x_5) + (x_1 - x)P_{2345}}{x_1 - x_5} = \\
&= \frac{0.460369(2.5 - 2.3) + (-0.4 - 2.5)0.499772}{-0.4 - 2.3} = 0.473504
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{23456} &= \frac{P_{2345}(x - x_6) + (x_2 - x)P_{3456}}{x_2 - x_6} = \\
&= \frac{0.499772(2.5 - 2.9) + (0.1 - 2.5)0.012}{0.1 - 2.9} = 0.430091
\end{aligned}$$

A partir d'aquests, aplicant les fórmules corresponents, obtenim els valors de la sisena columna:

$$\begin{aligned}
P_{012345} &= \frac{P_{01234}(x - x_5) + (x_0 - x)P_{12345}}{x_0 - x_5} = \\
&= \frac{0.470739(2.5 - 2.3) + (-1.3 - 2.5)0.473504}{-1.3 - 2.3} = 0.472122
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_{123456} &= \frac{P_{12345}(x - x_6) + (x_1 - x)P_{23456}}{x_1 - x_6} = \\
&= \frac{0.473504(2.5 - 2.9) + (-0.4 - 2.5)0.430091}{-0.4 - 2.9} = 0.461664
\end{aligned}$$

Finalment obtenim el valor del polinomi interpolador en el punt $x = 2.5$, calculant l'únic terme de la darrera columna, el $P_{0123456}$:

$$\begin{aligned}
P_{0123456} &= \frac{P_{012345}(x - x_6) + (x_0 - x)P_{123456}}{x_0 - x_6} = \\
&= \frac{0.472122(2.5 - 2.9) + (-1.3 - 2.5)0.461664}{-1.3 - 2.9} = 0.467640
\end{aligned}$$

Com ja hem dit, no s'arriba a determinar el polinomi interpolador $P(x)$, sinó només el valor d'aquest en el punt que ens interessa. El valor de $P(2.5)$ és igual a $P_{0123456}$, és a dir, **0.467640**.

Per trobar l'error considerem el màxim de les diferències degudes a la darrera iteració, sense considerar el signe. Així doncs, restem a l'última columna els resultats de la penúltima

$$|P_{0123456} - P_{012345}| = 0.004482$$

$$|P_{0123456} - P_{123456}| = 0.005976$$

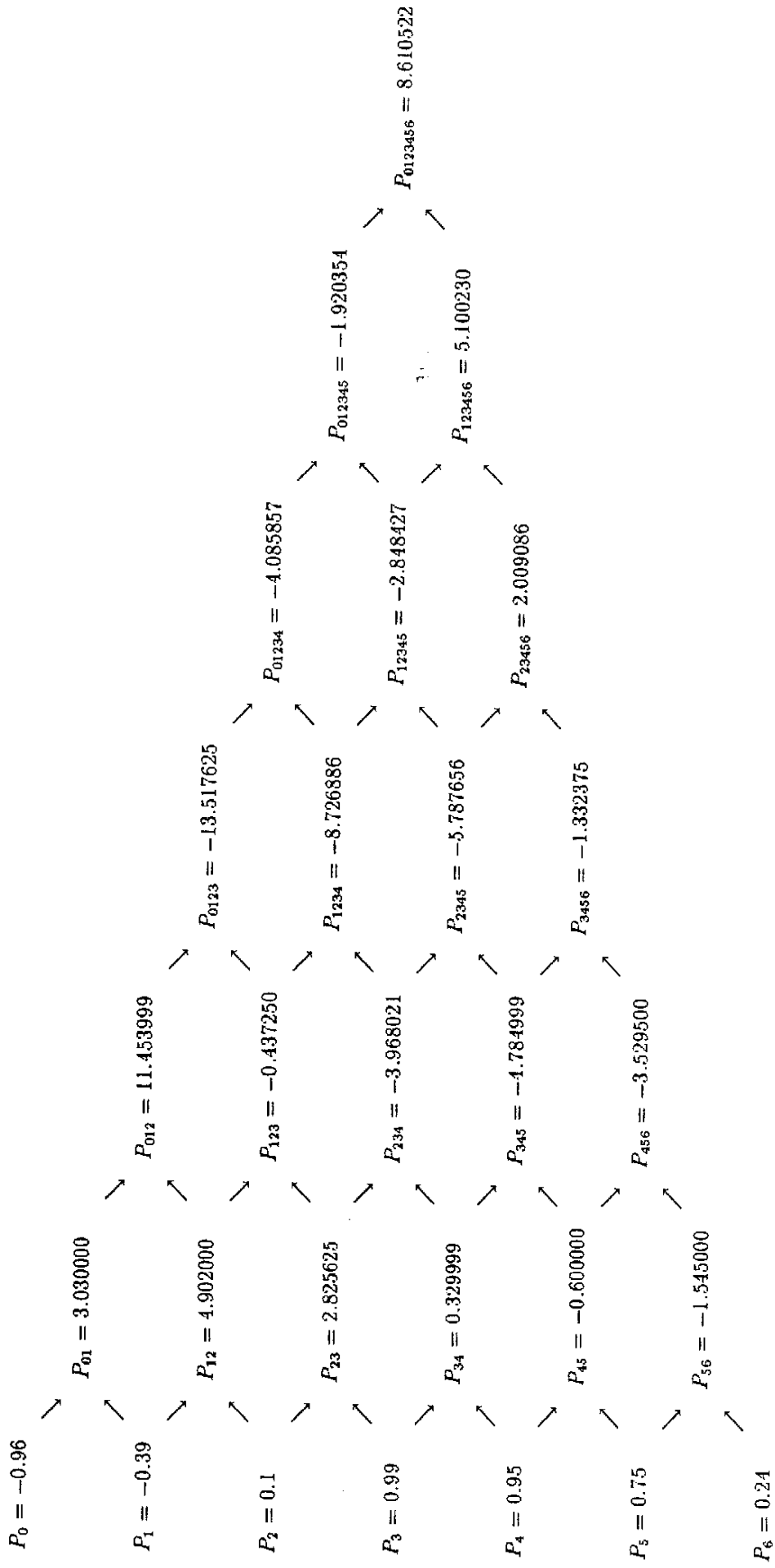
i escollim el més gran d'ells com l'error comés. En aquest cas ens dona $0.005976 \simeq 0.006$.

Procedint anàlogament, calculem el valor interpolat per $x = 5$. Com es dedueix de l'esquema (vegeu la pàgina següent), tenim que la solució és **8.610522**. Per obtenir l'error considerem el màxim de les diferències corresponents a la darrera iteració. Restant la penúltima columna a l'última,

$$|P_{0123456} - P_{012345}| = 10.530876$$

$$|P_{0123456} - P_{123456}| = 3.510292$$

es pot observar que el màxim és el primer d'ells i, per tant, l'error és aproximadament de 10, resultat que era d'esperar ja que $x = 5$ està molt lluny de l'interval de les dades.



3. La gràfica de la funció $f(x) = \log x - 2 \cos x$ té tres zeros a l'interval $(0, 8)$. Calculeu-los amb quatre xifres decimals exactes, usant el mètode que vulgueu.

Solució:

En primer lloc, basant-nos en el teorema de Bolzano, cercarem intervals que continguin a cadascuna de les arrels.

Calculem alguns valors de la funció. S'observa que $x = 0$ no és del domini i si fem $\lim_{x \rightarrow 0^+} f(x) = -\infty$, com $f(2) = 1.525441 > 0$ ja tenim un primer interval $(0, 2)$.

Si volem aplicar el mètode de Newton necessitem una bona aproximació inicial que es pot aconseguir per exemple amb el mètode de bisecció. També necessitarem conèixer $f'(x)$ donat que la fórmula recurrent de les aproximacions successives és:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

En aquest cas, $f'(x) = \frac{1}{x} + 2 \sin x$.

Considerem el punt mig de l'interval $(0, 2)$, és a dir, $x = 1$ i apliquem bisecció. El canvi de signe entre $x = 1$ i $x = 2$, ja que $f(1) = -1.08 < 0$ i $f(2) = 1.525441 > 0$. Per tant, l'arrel que cerquem està a $(1, 2)$. Agafem $x_0 = 1.5$ com a punt inicial pel mètode de Newton. Calculem les successives aproximacions fins tenir coincidència, al menys, en quatre xifres decimals:

$$x_1 = 1.400817$$

$$x_2 = 1.401289$$

$$x_3 = 1.401289$$

El mètode ha convergit ràpidament cap al valor **1.4013**, que ens dona la primera arrel.

Per localitzar la segona arrel considerem l'interval $(2, 6)$, ja que $f(2) = 1.525441 > 0$, $f(6) = -0.128581 < 0$. Fent servir bisecció obtenim el punt $x = 4$, amb $f(4) = 2.693582 > 0$. Considerem llavors l'interval $(4, 6)$ i prenem el punt mig $x_0 = 5$ per iniciar el mètode de Newton, que dona:

$$x_1 = 5.606639$$

$$x_2 = 5.759800$$

$$x_3 = 5.782364$$

$$x_4 = 5.782917$$

$$x_5 = 5.782918$$

Tenim doncs la segona arrel **5.7829** amb quatre xifres decimals exactes.

Finalment considerem l'interval $(6, 8)$, on $f(6) = -0.128581 < 0$, $f(8) = 2.370442 > 0$.

Comencem el mètode de Newton amb $x_0 = 7$, punt mig de l'interval $(6, 8)$:

$$x_1 = 6.699275$$

$$x_2 = 6.623415$$

$$x_3 = 6.616994$$

$$x_4 = 6.616946,$$

obtenint la tercera i última arrel **6.6169** amb la precisió sol·licitada .

4. Trobeu els zeros de $f(x) = \sin x + x^2 + 3x$ amb un error menor que 10^{-4} .

Solució:

Primer esbrinarem quants zeros té aquesta funció, estudiant les seves derivades:

$$f'(x) = \cos x + 2x + 3 \quad f''(x) = -\sin x + 2.$$

S'observa que $f''(x)$ no es pot anular mai i això ens diu, aplicant el teorema de Rolle, que $f'(x)$ com a molt té un zero. Per tant, de la mateixa manera, es dedueix que $f(x)$ en té com a molt dos.

Un d'ells és evident i és $x = 0$. Busquem l'altre, si és que existeix.

Es veu fàcilment que d'existir l'arrel no pot ser un punt positiu ja que $f(0) = 0$ i la funció és estrictament creixent a la dreta del zero,

$$f'(x) = \cos x + 2x + 3 > 2x + 2 > 0$$

L'última acotació només és certa si $x > -1$ i, en particular, és certa si $x > 0$.

Si considerem ara només valors negatius de x , trobem que la funció pren valors tant positius com negatius:

$$f(-1) = -2.841470985 \quad f(-5) = 10.95892427$$

Prenem $x_0 = -3$, punt mig de l'interval $(-5, -1)$, com a primera aproximació, i apliquem el mètode de Newton:

$$x_1 = -3.03536849$$

$$x_2 = -3.03504085$$

$$x_3 = -3.03504082$$

El valor **-3.0350** ens dona l'arrel amb quatre xifres decimals exactes.

5. Calculeu numèricament, utilitzant el mètode que vulgueu, el valor de la integral

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2},$$

amb quatre xifres decimals exactes

Solució:

Escollim la regla de Simpson estesa pel seu nivell de presició. La usarem per $n = 4, 8, \dots$ fins aconseguir les xifres exactes que ens demanen.

Començarem per considerar la partició de l'interval $[0, 1]$ en el cas concret de $n = 4$.

Tenim $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{4}$, $x_2 = \frac{1}{2}$, $x_3 = \frac{3}{4}$, $x_4 = 1$, i llavors:

$$\begin{aligned} S_4 &= \frac{1-0}{12} \left(\frac{1}{1+0} + 4 \frac{1}{1+(\frac{1}{4})^2} + 2 \frac{1}{1+(\frac{1}{2})^2} + 4 \frac{1}{1+(\frac{3}{4})^2} + \frac{1}{1+1} \right) = \\ &= 0.7853921 \end{aligned}$$

Per $n = 8$ tenim que la partició de l'interval $[0, 1]$ ve donada per $x_0 = 0$, $x_1 = \frac{1}{8}$, $x_2 = \frac{1}{4}$, $x_3 = \frac{3}{8}$, $x_4 = \frac{1}{2}$, $x_5 = \frac{5}{8}$, $x_6 = \frac{3}{4}$, $x_7 = \frac{7}{8}$ i $x_8 = 1$. Podem aprofitar els valors de la funció $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ en els punts de la partició corresponent a $n = 4$. En total tenim

$$\begin{aligned} S_8 &= \frac{1-0}{24} \left(\frac{1}{1+0} + 4 \frac{1}{1+(\frac{1}{8})^2} + 2 \frac{1}{1+(\frac{1}{4})^2} + 4 \frac{1}{1+(\frac{3}{8})^2} + 2 \frac{1}{1+(\frac{1}{2})^2} + \right. \\ &+ \left. 4 \frac{1}{1+(\frac{5}{8})^2} + 2 \frac{1}{1+(\frac{3}{4})^2} + 4 \frac{1}{1+(\frac{7}{8})^2} + \frac{1}{1+1} \right) \\ &= 0.7853981 \end{aligned}$$

Comparant aquest resultat amb l'anteriorment obtingut de $S_4 = 0.7853921$, veiem que no ens cal repetir de nou el procés per S_{16} , ja que ja hem aconseguit el valor aproximat de la integral amb quatre xifres decimals exactes:

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \simeq 0.7854$$

6. Calculeu numèricament, usant la regla de Simpson, la integral

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx,$$

amb quatre xifres decimals exactes.

Solució:

Per obtenir les xifres sol·licitades calcularem S_4, S_8, S_{16}, \dots fins que coincideixin les quatre primeres xifres dels resultats.

Si $n = 4$ la partició corresponent de l'interval $[0, 1]$ és: $x_0 = 0, x_1 = \frac{1}{4}, x_2 = \frac{1}{2}, x_3 = \frac{3}{4}$ i $x_4 = 1$. En conseqüència

$$S_4 = \frac{1-0}{12} \left(e^{-0^2} + 4e^{-(\frac{1}{4})^2} + 2e^{-(\frac{1}{2})^2} + 4e^{-(\frac{3}{4})^2} + e^{-1^2} \right) = 0.7468553$$

Quan $n = 8$, els punts a considerar coincideixen parcialment amb els anteriors i per tant podrem aprofitar alguns dels càlculs. La partició ve donada per $x_0 = 0, x_1 = \frac{1}{8}, x_2 = \frac{1}{4}, x_3 = \frac{3}{8}, x_4 = \frac{1}{2}, x_5 = \frac{5}{8}, x_6 = \frac{3}{4}, x_7 = \frac{7}{8}$ i $x_8 = 1$. Aleshores:

$$S_8 = \frac{1-0}{24} \left(e^{-0^2} + 4e^{-(\frac{1}{8})^2} + 2e^{-(\frac{1}{4})^2} + 4e^{-(\frac{3}{8})^2} + 2e^{-(\frac{1}{2})^2} + 4e^{-(\frac{5}{8})^2} + 2e^{-(\frac{3}{4})^2} + 4e^{-(\frac{7}{8})^2} + e^{-1^2} \right) = 0.746826$$

on les quatre primeres xifres decimals coincideixen amb les obtingudes en l'aproximació anterior. Per tant

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx \simeq 0.7468$$

Bibliografia

- [1] AUBANELL, A., BENSENY, A., DELSHAMS, A., *Eines Bàsiques de Càlcul Numèric*, Manuals de la U.A.B., Bellaterra, 1991.
- [2] BURDEN, R.L., FAIRES, J.D., *Anàlisis Numèric*, Grupo Editorial Iberoamericano, México, 1985.
- [3] FIOL, M., SANVICENTE, E., ALEGRE, I., YEBRA, J.L.A., *Anàlisis Numèric*, CPET, Universitat Politècnica de Catalunya.
- [4] PRESS, W.H., FLANNERY, B.P., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T., *Numerical recipes in C*, Cambridge University Press, 1988.
- [5] RALSTON, A., *Introducción al Anàlisis Numèric*, Limusa, México, 1986.