

Mètodes bàsics de Càlcul Numèric

J. Tomás Lázaro Ochoa
Antoni Gomà Nasarre

P06/05005/00995.

Mòdul 5

Índex

Introducció	5
Objectius	8
Coneixements previs	9
1. Zeros de funcions	11
1.1. Mètode de la bisecció	11
1.2. Mètode de Newton	16
1.2.1. Idea geomètrica	16
1.3. Mètode de la secant	22
1.3.1. Idea geomètrica	22
2. Interpolació de funcions	26
2.1. Introducció	26
2.2. Existència i unicitat del polinomi interpolador	27
2.3. Mètode de Lagrange	28
2.4. Mètode de Newton	33
2.5. Fórmula de l'error en la interpolació polinomial	42
2.6. Interpolació inversa	44
2.7. Interpolació d'Hermite	46
2.7.1. Fórmula de l'error en la interpolació d'Hermite	49
2.8. Fenomen de Runge	50
3. Aplicacions de la interpolació de funcions	52
3.1. Derivació numèrica	52
3.1.1. Introducció	52
3.1.2. Diferències cap endavant i diferències centrades	53
3.2. Integració numèrica	58
3.2.1. Introducció	58
3.2.2. Regla dels trapezis composta	59

3.2.3. Regla de Simpson composta.....	62
Resum	66
Exercicis d'autoavaluació	67
Solucionari	69
Glossari	91
Bibliografia	92

Introducció

Durant molt anys, la creença que l'única manera d'arribar a la solució d'un problema matemàtic era a partir d'un procés analític i exacte, més o menys complex, va fer que les **matemàtiques** fossin moltes vegades referides amb el nom de ciències exactes. No va ser fins els anys 40 i, més concretament, fins l'any 1947, amb la fundació de l' **Institute of Numerical Analysis**, a Los Angeles (EU), que la comunitat matemàtica va començar a pensar en la possibilitat de resoldre problemes no de manera exacta sinó aproximada, amb una precisió arbitrària i a partir d'un nombre finit de passos d'un determinat algorisme numèric. Des d'aleshores, el seu desenvolupament ha estat vertiginós i avui en dia és una branca fonamental dins la matemàtica moderna.

La intenció d'aquest breu eina de Càlcul Numèric és presentar algunes de les eines més bàsiques (i no per això menys importants) que l'Anàlisi Numèrica posa al nostre abast a l'hora de resoldre de manera aproximada problemes de difícil (per no dir, de vegades, impossible) resolució analítica. S'ha fet un esforç per reduir al màxim els continguts teòrics (que podeu trobar en molts llibres sobre el tema i, en particular, en la bibliografia ressenyada al final del mòdul), posant especial èmfasi en la seva simplicitat. Hem volgut que sigui un material de consulta àgil, amb algorismes clarament destacats, exemples resolts i comentaris sobre aquells punts més importants.

Com podreu observar al llarg d'aquest mòdul, cada concepte o mètode numèric anirà acompanyat d'exemples resolts i d'activitats proposades, en els quals els algorismes estudiats s'aplicaran a problemes concrets. Aquestes activitats es separen en dos tipus diferents:

- Un primer tipus, *manual*, en el qual es demana a l'estudiant que desenvolupi un algorisme i efectui els seus càlculs amb l'ajut de paper, llapis i una calculadora científica estàndard.
- Un segon tipus, a un nivell de programació més elevat, en el qual l'estudiant ha de saber resoldre aquestes activitats amb l'ajut d'un **software** adequat, típicament una **calculadora simbòlica**, tot i que també seria possible la seva programació en algun llenguatge usual: C, C++, FORTRAN, etc. En aquest mòdul la calculadora simbòlica escollida ha estat la *Wiris*, de manipulació fàcil i grans possibilitats docents.

Cal destacar que aquest mòdul és la versió en paper d'un projecte més ambiciós en el qual la gran majoria dels exemples i activitats són interactives. Això permet visualitzar de manera molt docent les idees geomètriques que

justifiquen molts mètodes numèrics, i també la manipulació i exploració per part de l'estudiant de gran quantitat d'exemples.

Sembla natural, per tant, preguntar-se per la necessitat de saber resoldre aquests algorismes de manera manual quan disposem d'instruccions (veureu molts exemples en la calculadora Wiris) que ens busquen una solució numèrica d'un problema donat. Aquesta és una pregunta habitual a molts nivells dins la docència actual de la matemàtica.

Segurament el Càlcul Numèric és un bon exemple que justifica ambdós coneixements. Si bé és bàsic conèixer els mètodes numèrics implementats en la nostra calculadora simbòlica per a la resolució ràpida d'un problema, no menys important és poder determinar quan i quins són els mètodes més adequats per a cada situació. Si el programari ens proporciona velocitat i comoditat de càlculs, el coneixement de cada mètode ens ha d'aportar una visió crítica dels seus resultats i una elecció correcta en la seva aplicació.

Per acabar, només volem comentar que els apartats que formen aquest mòdul són tres:

- Zeros de funcions,
- Interpolació (polinòmica) de funcions,
- Aplicacions de la interpolació de funcions,

tot i que aquest últim es pot considerar un petit apèndix del segon.

Algunes definicions bàsiques

Abans de començar, permeteu-nos recordar de manera molt breu una sèrie de definicions bàsiques dins l'Anàlisi Numèrica:

Sigui x un nombre real i $\tilde{x}$ una seva aproximació. Aleshores es defineix l'**error absolut** d'aquesta aproximació com a

$$e_a(\tilde{x}) = x - \tilde{x},$$

quantitat que ens dóna una idea de *quant lluny* es troba l'aproximació $\tilde{x}$ del valor a calcular x . L'**error relatiu** es defineix com a

$$e_r(\tilde{x}) = \frac{e_a(\tilde{x})}{x},$$

i proporciona una estimació de l'error en l'aproximació proporcional a la magnitud del valor x buscat. Atès que en principi x no és conegut, l'error relatiu

s'acostuma a aproximar per

$$e_r(\tilde{x}) \simeq \frac{e_a(\tilde{x})}{\tilde{x}}.$$

Suposeu, per exemple, que donat un nombre real $x = 2.5748679212874355403 \dots$ el volem representar emprant un nombre determinat de xifres decimals, diguem-ne 6. Com podem fer-ho i quin és l'error que cometem en cada possibilitat?

- Una primera possibilitat és el que es diu representació **per truncament**, que consisteix a considerar de x únicament les xifres decimals determinades. Així, en el nostre exemple l'aproximació per truncament a sis xifres decimals del valor x és donada per

$$x_1 = 2.574867.$$

L'error comès en aquest cas compleix que $|e_a(x_1)| = |x - x_1| \leq 10^{-6}$.

- L'altra manera de fer-ho és l'anomenada representació **per arrodoniment**, que consisteix en la idea següent: es considera x_2 coincidint amb x en sis xifres decimals, incrementant-se en 1 aquesta darrera xifra si el setè decimal del nombre x és més gran o igual que 5. Per exemple, en el nostre cas, escriurem

$$x_2 = 2.57486\underline{8}$$

ja que la setena xifra decimal de x ($x = 2.574867\underline{9}212874355403 \dots$) és 9, valor superior a 5. En altres paraules, aquesta representació per arrodoniment amb 6 xifres decimals del nombre x ve donada per la següent idea: es considera l'aproximació de x per truncament, x_1 , i l'aproximació x_2 , que consisteix a augmentar en una unitat la sisena xifra decimal de x_1 ; aleshores, d'aquests dos valors s'escull el que és més proper a x .

Si representem el nombre x per la seva aproximació per arrodoniment x_2 l'error absolut comès satisfà

$$|e_a(x_2)| = |x - x_2| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-6}.$$

Noteu que aquest error és inferior (o igual) a l'obtingut en la representació per truncament.

En general, encara que no és estrictament cert, si x_2 és una aproximació per arrodoniment de x que compleix $|e_a(x_2)| = |x - x_2| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-k}$, s'acostuma a dir que x i x_2 **coincideixen en les primeres k xifres decimals**. El mateix es diu si x_1 és aproximació per truncament de x que satisfà que $|e_a(x_1)| = |x - x_1| \leq 10^{-k}$.

Objectius

L'objectiu bàsic d'aquest mòdul és introduir l'estudiant en l'ús d'eines numèriques per a resoldre equacions i per a aproximar funcions, les seves derivades i les seves integrals. En particular, els objectius docents que es pretenen aconseguir en aquest mòdul són:

1. Presentar a l'estudiant maneres aproximades de resolució de problemes que no permeten una resolució analítica.
2. Introduir els mètodes bàsics del Càlcul Numèric com a eina habitual de treball.
3. Familiaritzar l'estudiant amb l'ús d'algorismes numèrics i la seva aplicació amb la calculadora bàsica, programant o amb la utilització de **software** comercial.

Coneixements previs

És fonamental que l'estudiant hagi adquirit les habilitats bàsiques relatives a les funcions d'una variable, tant des del punt de vista del seu càlcul -especialment derivació- com de la seva interpretació geomètrica. Per a això, n'hi ha prou amb la comprensió dels mòduls previs.

És també molt important i útil demostrar certa habilitat amb la calculadora Wiris, atès que servirà de plataforma per a aplicar i implementar els algorismes numèrics que presentarem.

1. Zeros de funcions

Sovint, en situacions pràctiques, convé trobar solucions aproximades d'equacions que de manera analítica no podem (o sabem) resoldre. El Càlcul Numèric és, dins la Matemàtica Aplicada, la disciplina que s'ocupa d'aquest problema, presentant mètodes de resolució i estudiant les seves característiques. Per aquesta raó, moltes calculadores simbòliques, entre elles la Wiris, tenen incorporats mòduls de resolució aproximada d'equacions.

Tot i això, convé conèixer quins són els mètodes numèrics més usats i quines són les circumstàncies que ens porten a una solució satisfactòria del nostre problema amb aquests mètodes.

Veurem de seguida que totes les equacions que volem resoldre es poden pensar com una certa funció f igualada a zero, motiu pel qual aquest tema s'acostuma a conèixer com a **zeros de funcions**. És interessant comentar que, en el cas de funcions polinòmiques, l'ordre **resol_numèricament** de la Wiris ja té incorporats mètodes numèrics que ens donen, si escau, valors aproximats de tots els zeros o arrels (vegeu la figura 1).

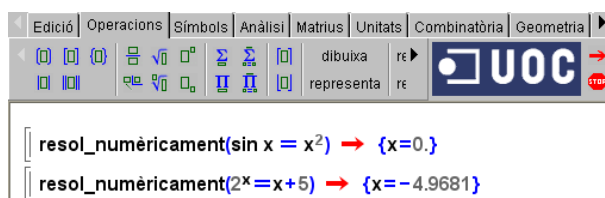


Figura 1: L'ordre **resol_numèricament** a la Wiris

1.1. Mètode de la bisecció

Aquest és, sens dubte, el mètode més simple per a trobar una solució aproximada α de l'equació $f(x) = 0$ un cop coneixem un interval al qual pertany. Està motivat pel resultat següent:

Teorema (Bolzano): sigui $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una funció contínua que compleix $f(a) \cdot f(b) < 0$ (és a dir, $f(a)$ i $f(b)$ tenen signes oposats). Aleshores, existeix $\alpha \in (a, b)$ que satisfà que $f(\alpha) = 0$.

Abans d'explicitar el seu algorisme, il·lustrarem de manera intuïtiva el seu ús amb un exemple concret.

Exemple 1

Suposeu que volem trobar una solució aproximada de l'equació $\sin x = x^2$.

Observeu que això equival a trobar un punt d'intersecció entre les corbes

$$\begin{cases} y = \sin x \\ y = x^2, \end{cases}$$

les quals es tallen per a $x = 0$ i per a un cert valor α que pertany a l'interval $[0.25, 1]$ (veure Figura 2). Per a trobar α de manera aproximada,

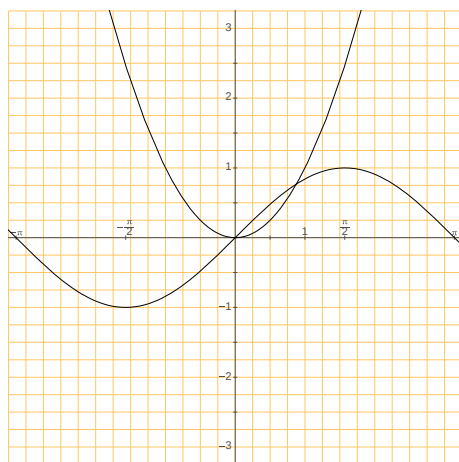


Figura 2: Les funcions $\sin x$ i x^2

el primer que fem és escriure la nostra equació de la forma $f(x) = 0$ amb $f(x) = \sin x - x^2$. Noteu que f és una funció contínua. A més, $f(0.25) = \sin(0.25) - (0.25)^2 = 0.1849039593 > 0$ i $f(1) = \sin(1) - 1^2 = -0.1585290152 < 0$, per tant, aplicant el **teorema de Bolzano** podem assegurar que existeix (com a mínim) un valor $\alpha \in [0.25, 1]$ que compleix $f(\alpha) = 0$ i, en conseqüència, que satisfà que $\sin \alpha = \alpha^2$.

Considerem ara el punt mitjà entre 0.25 i 1, és a dir $(0.25 + 1)/2 = 0.625$, i calculeu $f(0.625) = 0.1944722729 > 0$. Atès que $f(0.625)$ és posi-

Observeu que del fet que $f(a) \cdot f(b) < 0$ no es dedueix que existeixi una única arrel $\alpha \in (a, b)$ de la funció $f(x)$ sinó que n'hi podria haver moltes; l'únic que assegura aquest teorema és que, al menys, n'existeix una.

tiu, i usant que $f(1) < 0$, podem concloure que dins l'interval $[0.625, 1]$ tenim (com a mínim) un zero de f . Novament, considerarem el punt mitjà d'aquest últim interval: $(0.625 + 1)/2 = 0.8125$. Avaluant f en aquest punt trobem $f(0.8125) = 0.0658524053 > 0$. Aquest valor és positiu i, per tant, podem deduir que f té (com a mínim) un zero α dins l'interval $[0.8125, 1]$.

De manera anàloga, procedim fins a aconseguir trobar un interval de longitud prou petita que contingui α . Aquest interval ens proporciona una aproximació del zero que busquem.

Mètode de la bisecció

Algorisme:

Suposem que un zero α de la funció $f(x)$, contínua, es troba dins l'interval $[a, b]$. Aleshores,

- 1) Anomenem $x_0 = a$, $x_1 = b$ i definim $x_2 = (x_0 + x_1)/2$, punt mitjà de l'interval $I_0 = [x_0, x_1]$.
- 2) Calculem $f(x_2)$ i comparem amb $f(x_0)$ i $f(x_1)$: si $f(x_0) \cdot f(x_2) < 0$, aleshores, aplicant el teorema de Bolzano, sabem que dins l'interval $[x_0, x_2]$ hi ha (com a mínim) un zero de f . En aquest cas prenem com a nou interval, l'interval $[x_0, x_2]$. Si, en canvi, es dona $f(x_2) \cdot f(x_1) < 0$, aleshores prenem com a nou interval $[x_2, x_1]$.
- 3) En general, donat un interval $[x_k, x_j]$, calculem el seu punt mitjà $x_* = (x_k + x_j)/2$ i prenem com a nou interval aquell dels dos subintervalls $[x_k, x_*]$ que $[x_*, x_j]$ que presenti un canvi de signe de la funció f .

La calculadora Wiris permet aplicar el mètode de la bisecció per a obtenir el valor del zero d'una funció contínua que pertany a un interval. Cal indicar com a arguments a l'ordre **resol_numèricament** la funció que volem igualar a 0, l'interval i el nom del mètode que volem fer servir (vegeu la figura 3).

- **Convergència:** observeu que aquest procés proporciona una successió d'interval·ls, per exemple:

$$I_0 = [x_0, x_1], \quad I_1 = [x_2, x_1], \quad I_2 = [x_2, x_3], \dots,$$

A banda de fer el càlcul directe d'un zero d'una funció amb la Wiris, és interessant que assageu de programar el mètode per a assolir la precisió volguda.

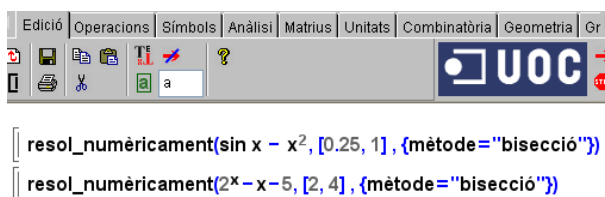


Figura 3: El mètode de la bisecció amb la Wiris

encaixats $I_0 \supset I_1 \supset I_2 \dots \supset I_n \supset \dots$, de manera que α , zero de f està contingut en tots ells; a més la longitud de cada interval és sempre la meitat de l'anterior. Concretament, si l'interval I_0 té longitud $b - a$ aleshores I_1 té longitud $\frac{b-a}{2}$, I_2 en té $\frac{b-a}{2^2}$, I_3 en té $\frac{b-a}{2^3}$ i, en general, l'interval I_n té longitud

$$\frac{b-a}{2^n}.$$

Noteu que la longitud d'aquests intervals es va fent cada cop més petita i que, en canvi, continuen contenint un zero de f .

• Quan s'atura aquest procés?

Si bé hem vist que, conceptualment, aquest procés portat fins a l'infinit proporciona exactament el zero α que busquem, cal donar un criteri que ens permeti obtenir una aproximació prou satisfactòria de α en un nombre finit de passos. Més concretament, podem saber *a priori* quantes iteracions del **mètode de la bisecció** cal efectuar per a obtenir α amb una precisió ε donada? Aquesta precisió ε no és una altra cosa que una fita de l'error absolut màxim $|e_n(\alpha)|$ amb el qual volem conèixer α i serà, habitualment, del tipus 10^{-5} , 10^{-8} , 10^{-12} , ..., en funció del nostre problema i de les nostres necessitats.

Així doncs, suposeu que volem aconseguir α amb una precisió ε (també s'acostuma a dir *amb un error inferior o igual a ε*). Sabem que si l'interval inicial és $[a, b]$, aleshores la longitud de l'interval I_N , obtingut després de N iteracions, és $(b-a)/2^N$. Per tant, n'hi ha prou de demanar que

$$\varepsilon = \frac{b-a}{2^N} \quad (1.1)$$

ja que d'aquesta manera qualsevol valor $x \in I_N$ es trobarà a una distància de α més petita o igual que ε , la precisió demanada. Podem prendre així qualsevol dels dos extrems de I_N com a aproximació de α . A més, de la igualtat (1.1) es dedueix que

$$\begin{aligned} 2^N &= \frac{b-a}{\varepsilon} \Rightarrow \ln 2^N = \ln \left(\frac{b-a}{\varepsilon} \right) \Rightarrow N \ln 2 = \ln \left(\frac{b-a}{\varepsilon} \right) \\ \Rightarrow N &= \left\lceil \frac{\ln \left(\frac{b-a}{\varepsilon} \right)}{\ln 2} \right\rceil + 1, \end{aligned} \quad (1.2)$$

on $[x]$ indica la part entera del nombre x .

Recordeu que ...

... la **part entera** d'un nombre real x es defineix de la manera següent: si considerem tots els nombres enters que són més petits o igual que x , aleshores la part entera de x , que denotem per $[x]$, és el més gran d'aquests nombres. Així, per exemple, $[3.7] = 3$. En canvi, $[-3.4] = -4$.

• **Avantatges i desavantatges del mètode de la bisecció:**

- Sempre convergeix cap al zero buscat α , ja que la successió d'interval·ls que s'obté conté sempre α i la longitud d'aquests interval·ls tendeix cap a zero.
- Malauradament, la seva convergència és molt lenta.
- Tot i això, abans d'utilitzar qualsevol altre mètode per a trobar un zero d'una funció, és molt habitual aplicar dues o tres iteracions del mètode de la bisecció per a tenir una bona aproximació inicial d'aquest zero.

Exemple 2

Suposeu que volem calcular α , zero de $f(x) = \sin x - x^2$ que es troba en l'interval $I_0 := [a, b] = [0.625, 1]$ usant el mètode de la bisecció.

Quantes iteracions N necessitem per a obtenir una precisió de $\varepsilon = 10^{-3}$?

Aplicant la fórmula anterior, tenim que

$$N = \left\lceil \frac{\ln \left(\frac{0.375}{10^{-3}} \right)}{\ln 2} \right\rceil + 1 = [8.55 \dots] + 1 = 8 + 1 = 9,$$

on 0.375 és la longitud de l'interval $[0.625, 1]$. Aleshores,

n	I_n	Longitud de I_n
0	$[0.625, 1]$	0.375
1	$[0.8125, 1]$	0.1875000000
2	$[0.8125, 0.90625]$	0.0937500000
3	$[0.859375, 0.90625]$	0.0468750000
4	$[0.859375, 0.8828125]$	0.0234375000
5	$[0.87109375, 0.8828125]$	0.0117187500
6	$[0.87109375, 0.876953125]$	$5.859375000 \cdot 10^{-3}$
7	$[0.8740234375, 0.876953125]$	$2.929687500 \cdot 10^{-3}$
8	$[0.87548828125, 0.876953125]$	$1.464843750 \cdot 10^{-3}$
9	$[0.87548828125, 0.876220703125]$	$0.7324218750 \cdot 10^{-3}$

Observeu que $0.7324218750 \cdot 10^{-3} \leq 10^{-3}$ i per tant, podem dir que α és aproximadament 0.87548828125 (o també 0.876953125) amb una precisió de $\varepsilon = 10^{-3}$. En realitat, podem prendre com a aproximació amb aquesta precisió de 10^{-3} qualsevol dels punts de l'últim interval.

Noteu que la convergència ha estat força lenta. Quantes iteracions N hau-

rien calgut per a obtenir α amb una precisió de $\varepsilon = 10^{-7}$? Com abans,

$$N = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{0.375}{10^{-7}}\right)}{\ln 2} \right\rceil + 1 = [21.83 \dots] + 1 = 21 + 1 = 22.$$

Activitat 1

Apliqueu el mètode de la bisecció per trobar totes les solucions de l'equació

$$e^{-x} = x^4 \text{ amb una precisió* de } 10^{-2}.$$

Activitat 2

L'equació $2 \sin x = x$ té un zero en el punt $\alpha_0 = 0$. Trobeu, fent servir el mètode de la bisecció, el zero α que té en l'interval $[\pi/2, \pi]$ amb un error inferior a 10^{-2} .

* També s'acostuma a dir amb un error de 10^{-2} o amb un error més petit o igual que 10^{-2} .

Activitat 3

L'equació $2^x = x + 5$ té una solució (per comprovació directa) en $x = 3$. Feu servir el mètode de la bisecció per a trobar les dues solucions de l'equació $(2.2)^x = (1.1)x + 5.5$ amb una precisió de 10^{-2} . Com a ajuda vegeu en la figura 4 les gràfiques de les funcions $(2.2)^x$ i $(1.1)x + 5.5$.

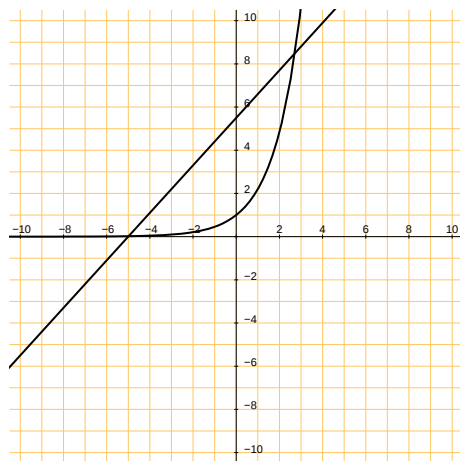


Figura 4: Gràfiques de les funcions $(2.2)^x$ i $(1.1)x + 5.5$

1.2. Mètode de Newton

1.2.1. Idea geomètrica

El mètode de Newton es basa en l'aproximació de la gràfica $y = f(x)$ en un cert punt $(x_0, f(x_0))$ per la seva recta tangent. Recordeu que l'equació de la

recta tangent a $y = f(x)$ en un punt $(x_0, f(x_0))$ és donada per

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

Observeu que aquesta recta equival al polinomi de Taylor de grau 1 de la

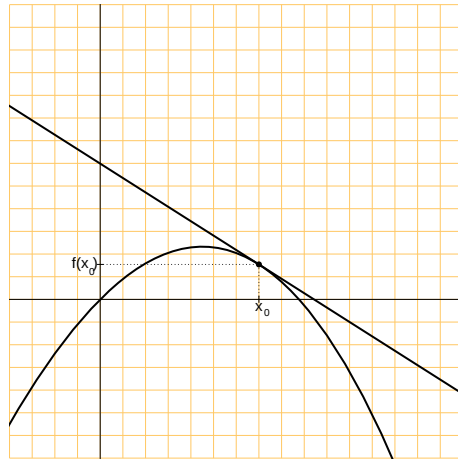


Figura 5: Recta tangent a $y = f(x)$ en el punt $(x_0, f(x_0))$

funció $f(x)$ al voltant del punt x_0 . La idea del mètode consisteix a prendre com a nova aproximació x_1 de α (zero de $f(x)$) el punt on la recta

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

talla l'eix $y = 0$. És a dir:

$$0 = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0),$$

de manera que, aïllant, s'obté

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Repetim aquesta construcció a partir del punt x_1 , considerant ara la recta tangent a la gràfica $y = f(x)$ en el punt $(x_1, f(x_1))$ (vegeu la figura 6)

i així, obtenim

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

De manera similar calcularem x_3, x_4 , etc.

El mètode de Newton és també conegut com a *mètode de Newton-Raphson*.

Mètode de Newton

Algorisme:

- 1) Prenem x_0 aproximació (prou a prop) de α , zero de $f(x)$.
- 2) Calculem la successió d'aproximacions $\{x_k\}_{k \geq 1}$ a partir de la recurrència

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k \geq 0. \quad (1.3)$$

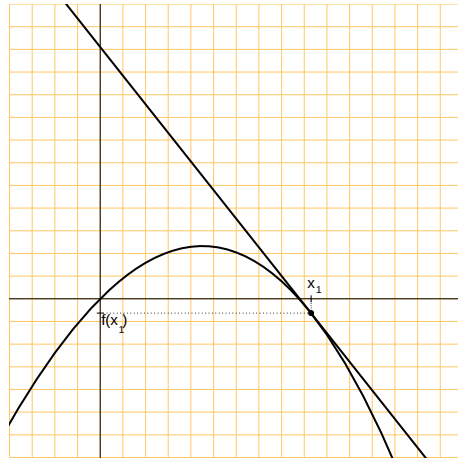


Figura 6: Recta tangent a $y = f(x)$ en el punt $(x_1, f(x_1))$

Exemple 3

Calculem l'arrel $\alpha \in [0.25, 1]$ de la funció $f(x) = \sin x - x^2$ (vegeu l'exemple 1.1) emprant ara el mètode de Newton. Així doncs, prenem com a primera aproximació el valor $x_0 = 0.5$ i obtenim els iterats $x_1, x_2, x_3, \dots$ a partir de la fórmula (1.3), que en aquest cas equival a

$$x_{k+1} = x_k - \frac{\sin x_k - x_k^2}{\cos x_k - 2x_k}.$$

La taula següent mostra aquests iterats i també les corresponents estimacions de l'error absolut (màxim) comès:

Iterat	Valor obtingut	$ x_k - x_{k-1} $
x_0	0.5	
x_1	2.37412465206752493	1.87412465206752493
x_2	1.4702796165662753	0.903845035501249632
x_3	1.05947583635088301	0.41080378021539229
x_4	0.905826786045670765	0.153649050305212244
x_5	0.877711878259780792	0.0281149077858899725
x_6	0.876727420147095326	0.0009844581126854665
x_7	0.876726215396866427	$1.2047502288986 \cdot 10^{-6}$
x_8	0.876726215395062446	$1.8039811 \cdot 10^{-12}$

Activitat 4

Apliqueu el mètode de Newton per trobar els zeros de l'equació $e^x - 2 = x$ amb un error més petit que 10^{-12} .

- La calculadora Wiris també permet aplicar el mètode de Newton, passant en aquest cas com a arguments la funció, el punt x_0 on volem començar les

iteracions i la indicació del mètode que volem fer servir (vegeu la figura 7).

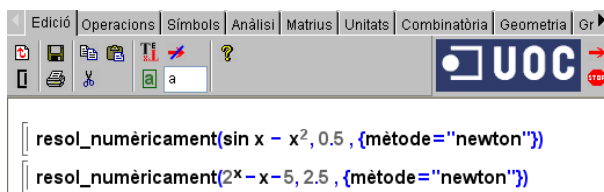


Figura 7: Aplicació del mètode de Newton amb la Wiris

- El mètode de Newton convergeix ràpidament. L'estudi de la velocitat de convergència dels mètodes numèrics presentats escapa al propòsit d'aquests apunts. Només us volem dir que, en condicions adequades, el mètode de Newton té ordre de convergència quadràtic. Això vol dir que l'error en la iteració determinada és aproximadament el quadrat de l'error en la iteració anterior: si per exemple aquest fos $\varepsilon_k \simeq 10^{-2}$, l'error de l'aproximació següent seria del tipus $\varepsilon_{k+1} \simeq (10^{-2})^2 = 10^{-4}$.
- S'acostuma a precedir d'unes quantes iteracions del *mètode de la bisecció* (vegeu el subapartat 1.1) que permetin localitzar l'arrel i proporcionar un valor inicial x_0 proper a aquesta.
- Presenta problemes de convergència en la proximitat de punts crítics de la funció $f(x)$, és a dir, punts on $f'(x) = 0$, ja que el terme $f(x_k)/f'(x_k)$ pot fer-se molt gran (vegeu la figura 8). Un cas particular d'aquesta situació

És interessant que assageu de programar el mètode de Newton amb el nombre d'iteracions que us interessi. La calculadora Wiris us facilita les eines per fer-ho.

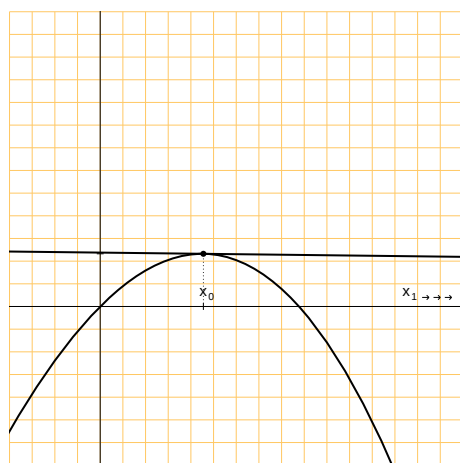


Figura 8: Exemple de divergència de Newton a prop d'un extrem relatiu

es dona quan l'arrel α que busquem és múltiple: $f(\alpha) = f'(\alpha) = \dots = f^{(n)}(\alpha) = 0$ i $f^{(n+1)}(\alpha) \neq 0$, amb $n \neq 0$.

Exemple 4

Volem comprovar com es comporta el mètode de Newton per a calcular una arrel de la funció $f(x) = \cos x - 1$. Ja sabem que aquesta arrel es troba en $\alpha = 0$, però volem aprofitar-ho per a poder comparar les aproximacions obtingudes amb l'arrel real i motivar alguna reflexió didàctica. En aquest cas, prenem per exemple $x_0 = 1$ com a valor inicial i obtenim les aproximacions següents $x_1, x_2, x_3, \dots$ a partir de la fórmula

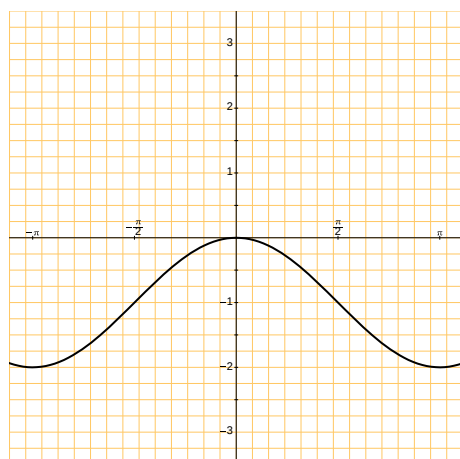
$$x_{k+1} = x_k - \frac{\cos x_k - 1}{-\sin x_k} = x_k + \frac{\cos x_k - 1}{\sin x_k}.$$

Els resultats es mostren en la taula següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
1	0.453698	0.546302
2	0.222876	0.230822
3	0.110974	0.111902
4	0.0554301	0.0555439
5	0.027708	0.0277221
6	0.0138531	0.0138549
7	0.00692644	0.00692666
8	0.0034632	0.00346324
9	0.0017316	0.0017316
10	0.0008658	0.0008658
11	0.0004329	0.0004329
12	0.00021546	0.00021744
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
24	$5.28444 \cdot 10^{-8}$	$5.28436 \cdot 10^{-8}$
25	$2.64218 \cdot 10^{-8}$	$2.64226 \cdot 10^{-8}$

Observeu que convergeix cap a $\alpha = 0$ molt lentament: en comptes de fer-ho de manera quadràtica, és a dir, amb un comportament de l'estimació de l'error del tipus $|x_{k+1} - x_k| \simeq |x_k - x_{k-1}|^2$, el que tenim és una convergència de tipus lineal (concretament $|x_{k+1} - x_k| \simeq 0.5|x_k - x_{k-1}|$). Això és degut al fet que $\alpha = 0$ és un zero doble de la funció $f(x)$, ja que $f(0) = f'(0) = 0$ i $f''(0) \neq 0$. Per tant, quan x_k s'apropa a α , $f'(x_k)$ pren valors propers a 0 i provoca errors en les aproximacions successives.

En casos com aquest, quan sospitem que l'arrel buscada α és doble, podem fer servir l'anomenat *mètode de Newton modificat*, on la recurrència és donada per

Figura 9: Gràfica de la funció $f(x) = \cos x - 1$ **Mètode de Newton modificat (α arrel doble)****Algorisme:**

- 1) Prenem x_0 aproximació (prou a prop) de α , zero (suposadament) doble de $f(x)$.
- 2) Calculem la successió d'aproximacions $\{x_k\}_{k \geq 1}$ a partir de la recurrència

$$x_{k+1} = x_k - 2 \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k \geq 0. \quad (1.4)$$

Exemple 5

En l'exemple anterior, prenent $x_0 = 1$ i fent servir la fórmula recurrent

$$x_{k+1} = x_k - 2 \frac{\cos x_k - 1}{-\sin x_k} = x_k + 2 \frac{\cos x_k - 1}{\sin x_k},$$

s'obté la taula següent de valors aproximats de $\alpha = 0$:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
1	-0.092605	1.0926
2	$6.6236 \cdot 10^{-5}$	0.092671
3	$-2.38962 \cdot 10^{-14}$	$6.6236 \cdot 10^{-5}$

Observeu que ara la convergència cap a l'arrel $\alpha = 0$ és molt més ràpida que en l'exemple anterior.

Activitat 5

Feu servir el mètode de Newton per a trobar les dues solucions de l'equació

En general, si sospitem que α és un zero de multiplicitat m de $f(x)$, és a dir, $f \in \mathcal{C}^{m+1}$ i $f(\alpha) = f'(\alpha) = f''(\alpha) = \dots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0$, $f^{(m)}(\alpha) \neq 0$, aleshores el mètode de Newton modificat s'escriu

$$x_{k+1} = x_k - m \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

$$(2.2)^x = (1.1)x + 5.5.$$

Activitat 6

Demostreu que es pot calcular $\sqrt{7}$ emprant únicament sumes, restes, multiplicacions i divisions. Observeu que $\sqrt{7}$ és el zero positiu de l'equació $f(x) = 0$ amb $f(x) = x^2 - 7$ i escriviu en aquest cas l'esquema de Newton.

Activitat 7

Apliqueu el mètode de Newton modificat per trobar, amb un error inferior a 10^{-7} , l'arrel α de multiplicitat major que 1 que el polinomi $p(x) = x^4 - 8x^3 + 24x^2 - 32x + 16$ té prop de $x_0 = 3$.

1.3. Mètode de la secant

1.3.1. Idea geomètrica

El mètode de la secant comença, a diferència dels mètodes anteriors, a partir de dues aproximacions inicials x_0 i x_1 . Aleshores, es calcula la recta que uneix els punts $(x_0, f(x_0))$ i $(x_1, f(x_1))$ que és donada per l'equació

$$y - f(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_1).$$

Aquesta recta és en general **secant** a la gràfica $y = f(x)$, és a dir, la talla de manera no tangent, i d'aquí rep el nom el mètode. L'iterat següent, x_2 , és aquell punt on la recta talla l'eix $y = 0$. És a dir, substituint $y = 0$ en l'equació anterior, i anomenant x_2 el valor de x corresponent, tenim

$$0 - f(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x_2 - x_1),$$

d'on, aïllant x_2 obtenim

$$x_2 = x_1 - f(x_1) \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}.$$

La figura 10 mostra geomètricament com s'obté x_2 : els punts marcats corresponen a $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ i el punt de tall de la recta amb $y = 0$ correspon a l'aproximació x_2 . De manera anàloga, l'iterat següent l'obtindrem amb la fórmula

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

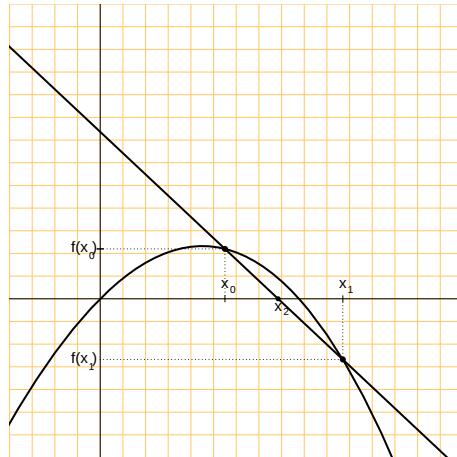


Figura 10: Primera iteració del mètode de la secant

Mètode de la secant

Algorisme:

- 1) Prenem x_0, x_1 aproximacions de α , zero de $f(x)$.
- 2) Calculem la successió d'aproximacions $\{x_k\}_{k \geq 2}$ a partir de la recurrència

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k \geq 1. \quad (1.5)$$

- Aquest mètode s'acostuma a aplicar quan l'avaluació de la funció derivada $f'(x)$ és **costosa**, és a dir, complicada de calcular o bé que requereix moltes operacions i, per tant, no interessa fer servir el mètode de Newton.
- Observeu, a partir de l'algorisme presentat, que els nous iterats es calculen de la següent manera:

A partir dels iterats:	es calcula:
x_0, x_1	x_2
x_1, x_2	x_3
x_2, x_3	x_4
...	...

Hi ha una variant del mètode de la secant anomenat **regula falsi** i que funciona de la manera següent:

- Comencem amb dos valors inicials x_0, x_1 de manera que $\alpha \in [x_0, x_1]$.
- Calculem x_2 amb la fórmula

$$x_2 = x_1 - f(x_1) \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}.$$

Aleshores menyspreem entre x_0 i x_1 aquell que la seva imatge per f tingui el mateix signe que $f(x_2)$. Així, per exemple, si $f(x_0) > 0$, $f(x_1) < 0$ i $f(x_2) < 0$, menyspreem x_1 i considerarem com les dues darreres aproximacions **bones** x_0 i x_2 . D'aquesta manera, aplicant el **teorema de Bolzano** (vegeu el subapartat 1.1) podem assegurar que $\alpha \in [x_0, x_2]$. La recurrència continua amb

$$x_3 = x_2 - f(x_2) \frac{x_2 - x_0}{f(x_2) - f(x_0)},$$

i així successivament.

L'avantatge de la **regula falsi** respecte del **mètode de la secant** és, fonamentalment, assegurar que l'arrel α buscada es troba sempre dins l'interval considerat en cada pas. Malgrat això el nombre de comparacions que necessita pot fer que ens calguin moltes iteracions per a obtenir el zero buscat amb la precisió volguda.

Exemple 6

Com a resum dels mètodes presentats (bisecció, Newton i secant), calculem numèricament una aproximació de l'arrel α que la funció $f(x) = 4 \sin x + 1 - x$ té en l'interval $[-\pi, -\pi/2]$. Aquesta és la taula resultant:

n	Bisecció	Newton	Secant
0	$[-\pi, -\pi/2]$	$-\pi$	$-\pi$
1	$[-2.35619449, -1.57079633]$	-2.31327412	$-\pi/2$
2	$[-2.35619449, -1.96349541]$	-2.21444913	-1.97378600
3	$[-2.35619449, -2.15984495]$	$-2.\underline{21}009292$	-2.36694993
4	$[-2.25801972, -2.15984495]$	$-2.\underline{2100}8394$	-2.19144324
5	$[-2.25801972, -2.20893233]$	$-2.\underline{21008394}$	-2.20882694
6	$[-2.23347603, -2.20893233]$		$-2.\underline{21009}521$
7	$[-2.22120418, -2.20893233]$		$-2.\underline{21008}393$
8	$[-2.\underline{215068}26, -2.\underline{208932}33]$		$-2.\underline{21008394}$
$\vdots$	$\vdots$		
22	$[-2.\underline{2100843}2, -2.\underline{21008394}]$		
23	$[-2.\underline{21008413}, -2.\underline{21008394}]$		

Destaquem les xifres decimals que coincideixen amb l'anterior aproximació i que, numèricament, podem considerar com a correctes, subratllant-les. Més precisament, considereu per exemple les aproximacions $x_3 = -2.21009292$ i $x_4 = -2.21008394$ obtingudes utilitzant el mètode de Newton. Observeu que coincideixen en les quatre primeres xifres decimals

(2100). Si calculem la seva diferència s'obté

$$|x_4 - x_3| = |(-2.21008394) - (-2.21009292)| = 0.00000898 = 0.898 \cdot 10^{-5} < 10^{-5}$$

Sabem que el nostre mètode ens proporciona cada vegada millors aproximacions de l'arrel α buscada a mesura que calculem més iteracions. Per tant, podem dir que la **millora** que comporta l'aproximació x_4 respecte de la seva precedent, x_3 , és inferior a 10^{-5} . És a dir, podem pensar que l'arrel α comença de la forma $\alpha = -2.2100 \dots i$, encara que no sigui estrictament correcte, que $|e_a(x_4)| = |\alpha - x_4| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^{-4}$ si prenem x_4 aproximació per arrodoniment de α .

Vegeu també com s'aplicarien amb la Wiris els mètodes estudiats per a trobar una aproximació de la solució que l'equació $4 \sin x + 1 = x$ té en l'interval $[-\pi, -\pi/2]$ (vegeu la figura 11).

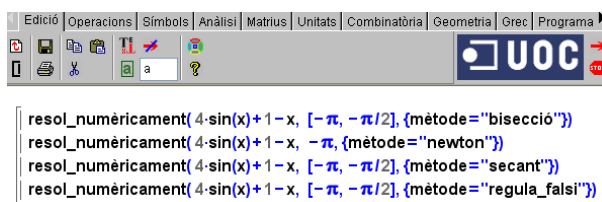


Figura 11: Càlcul d'una arrel de l'equació $4 \sin x + 1 = x$ amb la Wiris

Activitat 8

Trobeu α que compleixi $\ln \alpha = 3/\alpha$ amb un error inferior a 10^{-5} usant els mètodes de la secant i de la regla falsi.

2. Interpolació de funcions

2.1. Introducció

Suposeu que coneixem una taula de valors per a una determinada funció $f(x)$, és a dir, un conjunt de valors $\{x_k\}$ -que anomenem *abscisses*- i les seves imatges $f(x_k)$ que, de manera abreujada, escriurem com la f_k :

x_k	1	2	4	5	8
f_k	10	5	2	4	14

Aleshores, a partir d'aquesta informació, som capaços de donar una aproximació per a valors x propers a l'interval $[1, 8]$ que no siguin cap de les abscisses anteriors?

Aquest és l'objectiu principal de l'anomenat **problema de la interpolació**, que consisteix a trobar una funció $g(x)$, semblant a f , de manera que la seva imatge en les abscisses $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ coincideixi amb la de $f(x)$, és a dir, $g(x_k) = f_k$ per a $k = 0, 1, \dots, n$.

En primer lloc, i com a norma general, cal decidir quin és el **tipus** de funció que pot reproduir millor el comportament de la funció donada $f(x)$. Així, per exemple:

- Escollirem $g(x)$ com a combinació de funcions $\sin x$, $\cos x$, si la funció $f(x)$ presenta un comportament **periòdic**.
- Si $f(x)$ presenta valors molt grans (positius o negatius), concentrats en certs punts -possible comportament asimptòtic- buscarem $g(x)$ una **funció racional**, és a dir, quocient de dos polinomis.
- Si, en canvi, $f(x)$ presenta un comportament **suau**, sense grans variacions, considerarem $g(x)$ un **polinomi**; en aquest cas s'acostuma a escriure $p(x)$ en lloc de $g(x)$.

Aquest últim cas és el més senzill, rep el nom d'*interpolació polinomial* i és el que tractarem en aquests apunts.

Amb la calculadora Wiris podeu calcular el polinomi interpolador. Vegeu una possible sintaxi corresponent a l'exemple anterior en la figura 12 o, una sintaxi alternativa, en la figura 13.

$$\text{interpolador}(\{1,2,4,5,8\},\{10,5,2,4,14\},x) \rightarrow -\frac{5}{252} \cdot x^4 + \frac{5}{21} \cdot x^3 + \frac{7}{36} \cdot x^2 - \frac{146}{21} \cdot x + \frac{1042}{63}$$

Figura 12: Interpolant amb la Wiris (1)

$$\begin{aligned} &A=\text{punt}(1,10); B=\text{punt}(2,5); C=\text{punt}(4,2); D=\text{punt}(5,4); E=\text{punt}(8,14); \\ &\text{interpolador}(\{A,B,C,D,E\},x) \rightarrow -\frac{5}{252} \cdot x^4 + \frac{5}{21} \cdot x^3 + \frac{7}{36} \cdot x^2 - \frac{146}{21} \cdot x + \frac{1042}{63} \end{aligned}$$

Figura 13: Interpolant amb la Wiris (2)

Podem destacar que la interpolació, a l'igual que el càlcul de zeros de funcions, és una eina del Càlcul Numèric que ens permet donar solucions aproximades a certs problemes de la vida quotidiana. Una mostra d'aquest fet és l'exemple següent: suposeu que es té el cens d'una certa població P en quatre moments diferents dels últims quaranta anys

any	1970	1980	1990	2000
nombre d'habitants	40543	35977	51068	65429

Aleshores, podem donar una xifra aproximada del nombre d'habitants que tenia aquesta població P l'any 1992? Al final d'aquest tema vosaltres mateixos podreu donar una resposta a aquesta pregunta.

2.2. Existència i unicitat del polinomi interpolador

Respecte del problema d'interpolació, en el cas polinomial, es té el resultat següent (la demostració del qual podreu trobar en la majoria de llibres de Càlcul Numèric):

Teorema: Donats $n + 1$ punts $(x_0, f_0), (x_1, f_1), (x_2, f_2), \dots, (x_n, f_n)$, amb les abscisses x_k totes diferents, existeix un únic polinomi $p_n(x)$ de grau menor o igual que n tal que $p(x_k) = f_k$ per a tot $k = 0, 1, 2, \dots, n$.

- Es diu que $p_n(x)$ **interpol**a* la funció $f(x)$ en els punts (x_k, f_k) , per a $k = 0, 1, \dots, n$.
- Observeu que les abscisses en el problema d'interpolació polinomial s'acostumen a numerar a partir del subíndex 0 (és a dir, $x_0, x_1, \dots$).
- Una manera **directa** de trobar $p_n(x) = a_n x^n + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$

* També es diu que $p_n(x)$ és el **polinomi interpolador de grau més petit o igual que n** de la taula $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$.

que interpoli $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$ és plantejar el sistema lineal de $n + 1$ equacions i $n + 1$ incògnites següent

$$p_n(x_k) = f_k \quad k = 0, 1, 2, \dots, n,$$

és a dir,

$$\begin{cases} a_n x_0^n + \dots + a_2 x_0^2 + a_1 x_0 + a_0 = f_0 \\ a_n x_1^n + \dots + a_2 x_1^2 + a_1 x_1 + a_0 = f_1 \\ \vdots \\ a_n x_n^n + \dots + a_2 x_n^2 + a_1 x_n + a_0 = f_n \end{cases}$$

i resoldre'l (vegeu la figura 14). Tanmateix, a la pràctica, aquest no és el

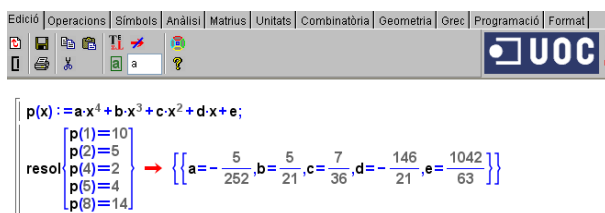


Figura 14: Resolució directa del polinomi interpolador

mètode més eficaç.

En els apartats següents es mostren alguns dels mètodes usuals per a calcular el polinomi interpolador d'una taula $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$ donada.

2.3. Mètode de Lagrange

Aquest és el mètode més senzill, des del punt de vista conceptual, per a obtenir el polinomi interpolador $p_n(x)$ en els punts (x_k, f_k) , $k = 0, 1, \dots, n$. A partir de la taula donada es construeixen els $n + 1$ polinomis següents:

$$L_i(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_1)(x_i - x_2)(x_i - x_3) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)},$$

per a $i = 0, 1, \dots, n$, és a dir,

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \cdots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3) \cdots (x_0 - x_n)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3) \cdots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \cdots (x_1 - x_n)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3) \cdots (x - x_n)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3) \cdots (x_2 - x_n)}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$L_n(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3) \cdots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1)(x_n - x_3) \cdots (x_n - x_{n-1})}.$$

Aquests $L_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n$ s'anomenen *polinomis de Lagrange* i verifiquen les propietats següents:

1) Cada $L_i(x)$ és un polinomi de grau n .

2) $L_i(x_j) = \delta_{ij}$ per a tot $i, j = 0, 1, \dots, n$ i on δ_{ij} és l'anomenada funció **Delta de Dirac**:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j, \\ 1 & \text{si } i = j. \end{cases}$$

3) Observeu que també es poden escriure de la forma següent:

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0, \dots, n \\ j \neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Aleshores, el **polinomi interpolador de Lagrange** en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=0, \dots, n}$ s'obté a partir de

$$p_n(x) = f_0 L_0(x) + f_1 L_1(x) + \dots + f_n L_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i L_i(x).$$

Mètode de Lagrange

Algorisme:

1) Per a $i = 0, 1, 2, \dots, n$ calculem els polinomis de Lagrange

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0, \dots, n \\ j \neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

2) Aleshores, el polinomi interpolador en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=0, 1, \dots, n}$ és donat per l'expressió

$$p_n(x) = f_0 L_0(x) + f_1 L_1(x) + \dots + f_n L_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i L_i(x).$$

Exemple 7

Apliquem el mètode de Lagrange per a trobar el polinomi interpolador de grau més petit o igual que 4, $p_4(x)$, corresponent a la taula

x_k	1	2	4	5	8
f_k	10	5	2	4	14

Calculem els corresponents polinomis de Lagrange $L_0(x), \dots, L_4(x)$:

$$L_0(x) = \frac{(x-2)(x-4)(x-5)(x-8)}{(1-2)(1-4)(1-5)(1-8)} =$$

$$\frac{1}{84} (x^4 - 19x^3 + 126x^2 - 344x + 320),$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-4)(x-5)(x-8)}{(2-1)(2-4)(2-5)(2-8)} =$$

$$-\frac{1}{36} (x^4 - 18x^3 + 109x^2 - 252x + 160),$$

$$L_2(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-5)(x-8)}{(4-1)(4-2)(4-5)(4-8)} =$$

$$\frac{1}{24} (x^4 - 16x^3 + 81x^2 - 146x + 80),$$

$$L_3(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-4)(x-8)}{(5-1)(5-2)(5-4)(5-8)} =$$

$$-\frac{1}{36} (x^4 - 15x^3 + 70x^2 - 120x + 64)$$

$$L_4(x) = \frac{(x-1)(x-2)(x-4)(x-5)}{(8-1)(8-2)(8-4)(8-5)} =$$

$$\frac{1}{504} (x^4 - 12x^3 + 49x^2 - 78x + 40).$$

Aleshores,

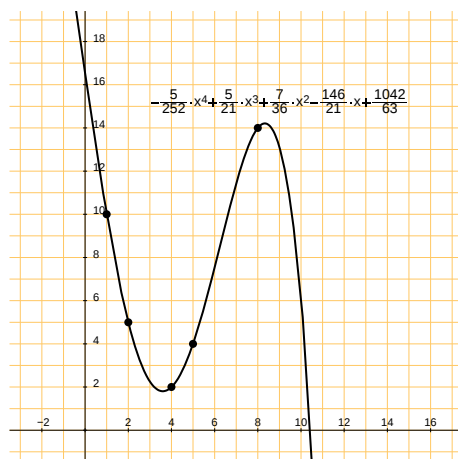
$$p_4(x) = \sum_{j=0}^4 f_j L_j(x) =$$

$$f_0 L_0(x) + f_1 L_1(x) + \dots + f_4 L_4(x) =$$

$$-\frac{5}{252}x^4 + \frac{5}{21}x^3 + \frac{7}{36}x^2 - \frac{146}{21}x + \frac{1042}{63}.$$

Vegeu la gràfica corresponent a la figura 15.

La calculadora Wiris permet construir un gràfic interactiu per a visualitzar el polinomi interpolador i estudiar com influeixen els possibles canvis en

Figura 15: El polinomi interpolador $p_4(x)$

les dades (vegeu la figura 16).

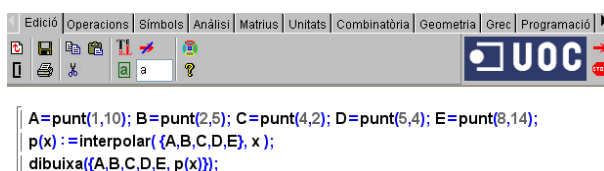


Figura 16: Interpolació interactiva amb la Wiris

Activitat 9

Trobeu el polinomi interpolador de la taula següent:

x_k	-1	0	4	5
f_k	5	-3	2	-4

- Què ens trobem si volem refer els càlculs del polinomi interpolador afegint-hi una abscissa x_5 (i el seu valor corresponent f_5) més?

En aquest cas cal tornar a calcular tots els polinomis de Lagrange sense poder aprofitar els càlculs anteriors. Aquest és un dels seus grans inconvenients.

- El polinomi interpolador $p_4(x)$ ens proporciona una aproximació de la funció $f(x)$ -que només coneixem per mitjà del seu valor en un conjunt de punts-. Així doncs, una manera d'aproximar el valor de $f(\alpha)$ per a un cert α proper a l'interval $[1, 8]$ és prendre $p_4(\alpha)$. Cal destacar que si aquest valor α es troba lluny de l'interval d'interpolació $[1, 8]$, l'error comès pot ser molt gran i, fins i tot, impossible d'estimar **a priori**.

Imaginem, per exemple, que prenem $\alpha = 3$. Com podem avaluar $p_4(3)$?

Amb la Wiris la resposta és clara: n'hi ha prou de donar nom al polinomi interpolador i calcular el valor corresponent (vegeu la figura 17).

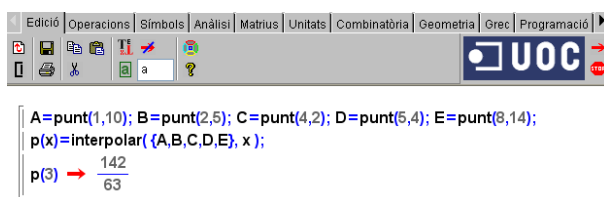


Figura 17: Avaluació de $p_4(\alpha)$ utilitzant la Wiris

Ara bé, si no disposem d'una calculadora simbòlica potent, com podem avaluar $p_4(3)$ (manualment o programant-lo) fent servir el mínim nombre d'operacions?

La resposta a aquesta pregunta la proporciona l'anomenada **regla de Horner**, que consisteix a identificar aquesta avaluació amb una divisió adequada de polinomis. Expliquem en primer lloc d'on prové i el seu funcionament bàsic, per donar posteriorment el seu algorisme.

En què consisteix la regla de Horner?

Suposeu que fem la divisió entre $p_4(x)$ i el monomi $x - 3$ (o, si voleu, en general, entre $p(x)$ i $x - \alpha$ si el que volem es calcular $p(\alpha)$); atès que $x - 3$ és de grau 1 i el residu r és una constant, podem escriure

$$p_4(x) = q(x) (x - 3) + r,$$

on $q(x)$ és el quocient. Observeu aleshores que $p_4(3) = q(3)(3 - 3) + r = r$. Per tant, en general, per a avaluar $p(\alpha)$ només cal conèixer el residu de la divisió entre els polinomis $p(x)$ i $x - \alpha$. A més, per a fer-ho, la **regla de Ruffini** ens proporciona un mètode senzill i ràpid. En el nostre cas

$$\begin{array}{r}
 \begin{array}{cccccc}
 -5/252 & 5/21 & 7/36 & -146/21 & 1042/63 \\
 3 & \downarrow & -15/252 & 15/28 & 138/63 & -300/21 \\
 \hline
 -5/252 & 5/28 & 46/63 & -100/21 & \boxed{142/63}
 \end{array}
 \end{array}$$

Llavors, $p_4(3) = 142/63$.

Quin és el seu algorisme general?

Suposem ara que $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$ i que volem avaluar $p(\alpha)$. Com abans, calculem la divisió $p(x) = q(x) (x - \alpha) + r$, amb $q(x) = b_{n-1} x^{n-1} + b_{n-2} x^{n-2} + \dots + b_1 x + b_0$, gràcies a la regla de Ruffini. Així tindrem una situació del tipus

$$\begin{array}{r}
 \begin{array}{cccccc}
 a_n & a_{n-1} & a_{n-2} & \cdots & a_1 & a_0 \\
 \alpha & \downarrow & \boxed{?} & \boxed{?} & \boxed{?} & \boxed{?} \\
 \hline
 b_{n-1} & b_{n-2} & b_{n-3} & \cdots & b_0 & \boxed{b_{-1}}
 \end{array}
 \end{array}
 ,$$

on els interrogants indiquen quantitats a calcular. Observeu que les b_j es determinen de manera recurrent, o bé a partir de l'esquema de Ruffini complet

$$\begin{array}{ccccccc}
 & a_n & a_{n-1} & a_{n-2} & \cdots & a_1 & a_0 \\
 \alpha & \downarrow & \boxed{\alpha b_{n-1}} & \boxed{\alpha b_{n-2}} & \boxed{\alpha b_{n-3}} & \boxed{\alpha b_1} & \\
 \hline
 & b_{n-1} & b_{n-2} & b_{n-3} & \cdots & b_0 & \boxed{b_{-1}}
 \end{array}$$

o bé amb les fórmules:

$$\begin{aligned}
 b_{n-1} &= a_n, \\
 b_{n-2} &= a_{n-1} + \alpha b_{n-1}, \\
 b_{n-3} &= a_{n-2} + \alpha b_{n-2}, \\
 &\vdots \\
 b_0 &= a_1 + \alpha b_1,
 \end{aligned}$$

fins a arribar a $p(\alpha) = r = b_{-1} = a_0 + \alpha b_0$.

Regla de Horner

Algorisme: donat $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ avaluem $p(\alpha)$ a partir de la recurrència:

$$\begin{aligned}
 b_{n-1} &= a_n, \\
 b_k &= a_{k+1} + \alpha b_{k+1}, \quad k = n-2, n-3, \dots, 0, -1.
 \end{aligned}$$

Aleshores, $p(\alpha) = b_{-1}$.

Activitat 10

Feu servir la Regla de Horner per a avaluar $p(2)$ on $p(x)$ és cadascun dels polinomis següents:

$$6x^5 - 3x^2 + 4x - 5, \quad x^7 + x^6 + x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x + 1.$$

També ...

... es pot usar la regla de Horner, modificada convenientment, per a determinar $p'(\alpha), p''(\alpha), \dots, p^{(n)}(\alpha)$.

2.4. Mètode de Newton

Per a explicar-ho d'una manera més senzilla, introduïrem la seva teoria a partir d'un exemple, extraurem propietats i finalment escriurem el seu algorisme en el cas general. Per a fer-ho, considerarem novament l'exemple introduït per a il·lustrar el mètode de Lagrange.

Exemple 8

Volem calcular el polinomi interpolador de grau més petit o igual que 4, $p_4(x)$, corresponent a la taula

x_k	1	2	4	5	8
f_k	10	5	2	4	14

fent servir l'anomenat **mètode de Newton**.

En primer lloc escrivim les dades en forma de dues columnes, definint prèviament $f[x_j] = f_j$:

$$\begin{array}{l|l} x_0 & f[x_0] = f_0 \\ x_1 & f[x_1] = f_1 \\ x_2 & f[x_2] = f_2 \\ x_3 & f[x_3] = f_3 \\ x_4 & f[x_4] = f_4 \end{array}$$

A partir d'aquestes dues columnes s'obté una tercera

$$\begin{array}{l|l} x_0 & f[x_0] \\ & f[x_0, x_1] \\ x_1 & f[x_1] \\ & f[x_1, x_2] \\ x_2 & f[x_2] \\ & f[x_2, x_3] \\ x_3 & f[x_3] \\ & f[x_3, x_4] \\ x_4 & f[x_4] \end{array}$$

segons les expressions

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1] &= \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}, & f[x_1, x_2] &= \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}, \\ f[x_2, x_3] &= \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}, & f[x_3, x_4] &= \frac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3}. \end{aligned}$$

Noteu que cada un d'aquests nous valors es troba justament entre les dues

fileres que necessita per a ser calculat, és a dir

$$\begin{array}{c|l}
 x_0 & f[x_0] \\
 & \searrow f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \\
 x_1 & f[x_1] \\
 & \searrow f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} \\
 x_2 & f[x_2] \\
 & \searrow f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2} \\
 x_3 & f[x_3] \\
 & \searrow f[x_3, x_4] = \frac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3} \\
 x_4 & f[x_4]
 \end{array}$$

Anàlogament, calculem una quarta columna a partir de les expressions

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0},$$

$$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1},$$

$$f[x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_3, x_4] - f[x_2, x_3]}{x_4 - x_2}$$

és a dir,

$$\begin{array}{c|l}
 x_0 & f[x_0] \\
 & f[x_0, x_1] \\
 & f[x_0, x_1, x_2] \\
 x_1 & f[x_1] \\
 & f[x_1, x_2] \\
 & f[x_1, x_2, x_3] \\
 x_2 & f[x_2] \\
 & f[x_2, x_3] \\
 & f[x_2, x_3, x_4] \\
 x_3 & f[x_3] \\
 & f[x_3, x_4] \\
 x_4 & f[x_4]
 \end{array}$$

Per a obtenir les darreres columnes d'aquest esquema triangular només cal calcular les expressions

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0}$$

$$f[x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_2, x_3, x_4] - f[x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_1}$$

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_1, x_2, x_3, x_4] - f[x_0, x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_0}$$

de manera que l'esquema final que s'obté presenta l'aspecte següent:

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1]$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$	
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$	
		$f[x_3, x_4]$		
x_4	$f[x_4]$			

Els quocients

$$f[x_0], \dots, f[x_4], f[x_0, x_1], \dots, f[x_0, x_1, x_2], \dots, f[x_0, x_1, \dots, x_4]$$

El mètode d'interpolació de Newton també es coneix com a **mètode de les diferències dividides**.

s'anomenen *diferències dividides* i es calculen a partir de les fórmules

$$f[x_j] = f_j,$$

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

Aleshores, el polinomi interpolador de grau més petit o igual que 4 que busquem és donat per l'expressió

$$p_4(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0) +$$

$$f[x_0, x_1, x_2] (x - x_0)(x - x_1) +$$

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) +$$

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3).$$

Observeu que els coeficients que conformen $p_4(x)$ són els termes del costat

superior de l'esquema triangular anterior:

x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$		
		$f[x_3, x_4]$			
x_4	$f[x_4]$				

Aplicat al nostre exemple, l'esquema triangular que s'obté és el següent

1	10				
		-5			
2	5		$7/6$		
		$-3/2$		0	
4	2		$7/6$		$-5/252$
		2		$-5/36$	
5	4		$1/3$		
		$10/3$			
8	14				

que dona lloc a

$$p_4(x) = 10 - 5(x-1) + \frac{7}{6}(x-1)(x-2) - \frac{5}{252}(x-1)(x-2)(x-4)(x-5).$$

- Comproveu que

$$\begin{aligned} p_4(x) &= 10 - 5(x-1) + \frac{7}{6}(x-1)(x-2) - \\ &\quad \frac{5}{252}(x-1)(x-2)(x-4)(x-5) = \\ &\quad -\frac{5}{252}x^4 + \frac{5}{21}x^3 + \frac{7}{36}x^2 - \frac{146}{21}x + \frac{1042}{63}, \end{aligned}$$

és a dir, que coincideix amb el polinomi interpolador obtingut (per la mateixa taula) aplicant el mètode de Lagrange. Això ja ho sabem pel fet que el polinomi interpolador és únic, un cop fixada la taula $\{(x_k, f_k)\}$ de valors.

- Habitualment no s'acostumen a desenvolupar tots els productes que formen $p_4(x)$. Ans el contrari, per a avaluar $p_4(x)$ en un cert punt α és útil reescriure'l de la forma

$$p_4(x) = 10 + (x-1) \left(-5 + (x-2) \left(\frac{7}{6} + (x-4) \left(-\frac{5}{252}(x-5) \right) \right) \right)$$

ja que el nombre d'operacions necessàries per a obtenir $p_4(\alpha)$ és mínim. Observeu que aquesta expressió s'ha obtingut treient factor comú de manera recurrent els monomis $(x-1)$, $(x-2)$ i $(x-4)$. En el nostre exemple, si prenem $\alpha = 3$ s'obté

$$p_4(3) = 10 + (3-1) \left(-5 + (3-2) \left(\frac{7}{6} + (3-4) \left(-\frac{5}{252}(3-5) \right) \right) \right),$$

és a dir, $p_4(3) = 142/63$.

• Com varia el mètode de Newton si afegim una abscissa nova?

Com ara veurem amb un exemple, el mètode de Newton té a més l'avantatge que en afegir noves dades tots els càlculs anteriors s'aprofiten, de manera que el nombre d'operacions necessàries per a obtenir el nou polinomi interpolador és petit. Aquesta propietat prové del resultat següent:

Les diferències dividides $f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{j-1}, x_j]$ són funcions simètriques en els valors $x_i, x_{i+1}, \dots, x_j$, és a dir, són invariants sota permutacions de les x_k . Així, per exemple, $f[x_1, x_2, x_3] = f[x_3, x_2, x_1] = f[x_2, x_1, x_3] = f[x_3, x_1, x_2]$.

Així doncs, suposeu que volem afegir la dada $(x_5, f_5) = (7, 12)$ i calcular $p_5(x)$, el polinomi interpolador de grau més petit o igual que 5 de la nova taula. En aquest cas només cal afegir $(7, 12)$ al final de les dues primeres columnes de l'esquema triangular anterior i calcular aquelles diferències dividides que ens falten. És a dir, considerem la taula

x_k	1	2	4	5	8	7
f_k	10	5	2	4	14	12

on observeu que **no hem ordenat** les abscisses sinó que hem situat les noves dades al final de la taula. Ara, en l'esquema anterior de Newton calculem només aquelles diferències dividides que hi ha subratllades:

1	10					
		-5				
2	5		7/6			
		-3/2		0		
4	2		7/6		-5/252	
		2		-5/36		-1/315
5	4		1/3		-7/180	
		10/3		-1/3		
8	14		-2/3			
		2				
7	12					

Així el polinomi interpolador que busquem és

$$p_5(x) = 10 - 5(x-1) + \frac{7}{6}(x-1)(x-2) - \frac{5}{252}(x-1)(x-2)(x-4)(x-5) - \frac{1}{315}(x-1)(x-2)(x-4)(x-5)(x-8).$$

Observeu que només ha calgut afegir un terme (polinomial, és clar) al polinomi $p_4(x)$.

- És important destacar que el nombre d'abscisses d'una taula no determina el grau del polinomi interpolador sinó únicament el seu grau màxim. Concretament, donada una taula $\{(x_k, f_k)\}_{k=0, \dots, n}$ amb $n+1$ abscisses (ja que la k va des de 0 fins a n), el polinomi interpolador $p_n(x)$ no ha de tenir, *a priori*, grau **exactament** n , sinó que només es pot assegurar que té grau **més petit o igual que** n . L'exemple següent il·lustra aquest fet.

Busquem $p_6(x)$ el polinomi interpolador associat a la taula següent de valors:

x_k	1	2	3	4	5	6	7
f_k	1	5	14	30	55	91	140

Aleshores, calculem l'esquema triangular de Newton

1	1						
		4					
2	5		5/2				
		9		1/3			
3	14		7/2		0		
		16		1/3	0		
4	30		9/2		0	0	
		25		1/3	0		
5	55		11/2		0		
		36		1/3			
6	91		13/2				
		49					
7	140						

de manera que el polinomi interpolador és

$$p_6(x) = 1 + 4(x-1) + \frac{5}{2}(x-1)(x-2) + \frac{1}{3}(x-1)(x-2)(x-3)$$

que té grau exactament 3 i no 6 com es podria esperar *a priori*.

Mètode de Newton

Algorisme:

- Calculem les **diferències dividides**:

$$f[x_j] = f_j,$$

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

dins l'esquema triangular

x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$\dots$	
x_2	$f[x_2]$		$\dots$		$f[x_0, x_1, \dots, x_n]$
		$\dots$		$\dots$	
$\vdots$	$\vdots$		$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$		
		$f[x_{n-1}, x_n]$			
x_n	$f[x_n]$				

- Aleshores, el polinomi interpolador en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$ és donat per l'expressió

$$\begin{aligned} p_n(x) = & f[x_0] + f[x_0, x_1] (x - x_0) + \\ & f[x_0, x_1, x_2] (x - x_0)(x - x_1) + \\ & \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n] (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}). \end{aligned}$$

Activitat 11

Utilitzeu el mètode de Newton per a interpolat la taula següent de valors:

x_k	-2	1	2	5
f_k	-7	0	3	1

Comproveu amb la calculadora Wiris el resultat.

La interpolació polinomial no es redueix exclusivament a aproximar una taula de valors amb un comportament **polinomial** sinó que, de vegades, pot aproximar comportaments fins i tot exponencials o potencials, com es pot veure en l'exemple següent.

Exemple 9

Se sospita que la taula següent de valors

x_k	1	2
f_k	2	3

correspon a una funció $f(x) = ae^{bx}$ amb $a > 0$, b dues constants desconegudes. Farem servir el mètode de Newton per a aproximar a , b i $f(x)$.

En primer lloc, observeu que si prenem logaritmes a tots dos costats de l'expressió $f(x) = ae^{bx}$ obtenim

$$\ln f(x) = \ln(ae^{bx}) = \ln a + \ln(e^{bx}) = \ln a + bx.$$

Per tant, si definim $g(x) = \ln f(x)$, $A = \ln a$, $B = b$, la igualtat anterior esdevé

$$g(x) = A + Bx, \quad (2.1)$$

és a dir, una funció que presenta un comportament clarament polinomial (en realitat, lineal). El que farem és calcular la taula corresponent a la funció $g(x)$ i interpolar-la per un polinomi de grau 1 (ja que tenim dues abscisses). Amb això haurem calculat A i B en l'expressió (2.1). Desfent el canvi de variables, obtindrem a i b . En efecte, la nova taula, calculada a partir de $g_k = \ln f_k$, és donada per

x_k	1	2
g_k	$\ln 2$	$\ln 3$

Construïm l'esquema triangular de Newton

$$\begin{array}{c|c} 1 & \ln 2 \\ & \frac{\ln 3 - \ln 2}{2 - 1} = \ln \frac{3}{2} \\ 2 & \ln 3 \end{array}$$

i així, el polinomi de grau més petit o igual a 1 que interpola la taula de valors $\{(x_k, g_k)\}_{k=0,1}$ és

$$\begin{aligned} p_1(x) &= \ln 2 + \left(\ln \frac{3}{2}\right)(x - 1) = \left(\ln 2 - \ln \frac{3}{2}\right) + \left(\ln \frac{3}{2}\right)x = \\ &= \ln \frac{2}{3} + \left(\ln \frac{3}{2}\right)x = \ln \frac{4}{3} + \left(\ln \frac{3}{2}\right)x. \end{aligned}$$

Si la comparem amb $g(x) = A + Bx$ s'obté $A = \ln(4/3)$ i $B = \ln(3/2)$. Fent servir ara que $a = e^A$ i que $b = B$ es té que $a = 4/3$ i $b = \ln(3/2)$ i finalment

$$f(x) = ae^{bx} = \frac{4}{3} e^{(\ln(3/2))x}.$$

Aquesta expressió per a $f(x)$ encara es pot simplificar una mica més: noteu que

$$e^{(\ln(3/2))x} = \left(e^{\ln(3/2)}\right)^x = \left(\frac{3}{2}\right)^x,$$

de manera que $f(x)$ es pot aproximar per

$$\frac{4}{3} \left(\frac{3}{2}\right)^x = 2 \cdot \left(\frac{2}{3}\right) \left(\frac{3}{2}\right)^x = 2 \left(\frac{3}{2}\right)^{x-1}.$$

2.5. Fórmula de l'error en la interpolació polinomial

Un aspecte molt important de la interpolació polinomial i, en general, de qualsevol aproximació d'una funció per una altra, és trobar fórmules que ens permetin estimar l'error comès en aquesta aproximació. Per a ser més precisos, suposem que $p_n(x)$ és el polinomi interpolador d'una funció $f(x)$ en els punts (tots diferents) $\{x_k\}_{k=0,1,\dots,n}$. Sabem que en aquests punts, l'error en l'aproximació compleix que

$$f(x_k) - p_n(x_k) = 0, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

ja que justament $p_n(x_k) = f(x_k)$ són les condicions que s'imposen per a determinar $p_n(x)$. Sigui ara α un punt diferent de les abscisses d'interpolació (és a dir, $\alpha \neq x_k$, per a tot $k = 0, 1, \dots, n$). Aleshores, com podem estimar l'error comès en aproximar $f(\alpha)$ per $p_n(\alpha)$? La resposta a aquesta pregunta es troba en el resultat següent:

Teorema: donada f una funció amb derivades contínues fins a ordre $n + 1$ *, sigui $p_n(x)$ el polinomi interpolador en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$. Aleshores, l'error (absolut) comès en aproximar $f(\alpha)$ per $p_n(\alpha)$ és donat per

$$f(\alpha) - p_n(\alpha) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_\alpha)}{(n+1)!} (\alpha - x_0)(\alpha - x_1) \cdots (\alpha - x_n),$$

on ξ_α pertany a l'interval més petit que conté els punts $x_0, x_1, \dots, x_n, \alpha$.

*És a dir, tal que $f, f', f'', \dots, f^{(n+1)}$ siguin funcions contínues.

Activitat 12

La taula següent correspon a la funció $f(x) = e^x$:

x_k	-1	0	1
f_k	0.3678794412	1	2.718281828

Calculeu $p_2(x)$ polinomi interpolador de grau menor o igual que 2 i trobeu el seu valor en el punt $x = 1/2$ fent servir la regla de Horner.

Exemple 10

Considereu novament l'activitat anterior. Sigui $\alpha = 1/2$. Aleshores, quin és l'error absolut (màxim) que cometem en aproximar $f(1/2) = e^{1/2} = \sqrt{e}$ per $p_2(1/2)$?

Per a fer-ho apliquem el teorema anterior. En primer lloc, noteu que si prenem valor absolut en la fórmula de l'error tenim que

$$\left| f\left(\frac{1}{2}\right) - p_2\left(\frac{1}{2}\right) \right| = \frac{|f^{(3)}(\xi_{1/2})|}{3!} \left| \frac{1}{2} - (-1) \right| \left| \frac{1}{2} - 0 \right| \left| \frac{1}{2} - 1 \right|, \quad (2.2)$$

on $\xi_{1/2} \in [-1, 1]$, l'interval més petit que conté els punts $-1, 0, 1, 1/2$. Per tant, cal trobar una fita superior per a

$$|f^{(3)}(\xi_{1/2})|, \quad \xi_{1/2} \in [-1, 1].$$

Atès que $f(x) = e^x \Rightarrow f'(x) = f''(x) = f^{(3)}(x) = e^x$ i que la funció e^x és estrictament creixent, podem deduir que

$$|f^{(3)}(\xi_{1/2})| \leq e^1 \simeq 2.718281828.$$

Substituint aquesta fita en l'expressió (2.2) i operant s'obté

$$\left| f\left(\frac{1}{2}\right) - p_2\left(\frac{1}{2}\right) \right| \lesssim \frac{2.718281828}{6} \left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0.1698926142,$$

és a dir, una fita superior de l'error comès és donada per

$$\left| \sqrt{e} - p_2\left(\frac{1}{2}\right) \right| \lesssim 0.1698926142,$$

Per a tenir una estimació més realista de l'error comès, és convenient comparar l'error absolut amb el valor aproximat, és a dir, treballar amb l'**error relatiu** (del qual ja hem parlat en la introducció d'aquest mòdul) que, en aquest cas, presenta l'expressió

$$e_r\left(\frac{1}{2}\right) \simeq \frac{|\sqrt{e} - p_2(\frac{1}{2})|}{p_2(\frac{1}{2})}.$$

Calculeu-lo.

Activitat 13

Considereu la taula de la funció e^x de l'activitat 12. Aleshores:

- (a) Calculeu el valor real de $\sqrt{e}$, compareu-lo amb el valor obtingut mitjançant interpolació, $p_2(1/2)$, en l'activitat 12. Quin error s'ha comès? Compareu aquest error amb l'estimació obtinguda en l'exemple anterior.
- (b) Considereu la funció $f(x) = \sin(2.2x + 1.1)$ i escriviu la taula corresponent de valors per a les abscisses $x = 0.1, 0.2, 0.4$ i 0.5 (en radiants). A continuació:
- Apliqueu el mètode de Newton per trobar el polinomi interpolador $p_3(x)$ de la taula obtinguda.
 - Avalueu, fent servir la regla de Horner, $p_3(x)$, en el punt $x = 0.3$.
 - Calculeu l'error comès en aquesta aproximació comparant $p_3(0.3)$ amb el valor exacte $f(0.3)$.
 - Deduïu una fita de l'error absolut màxim per a aquesta aproximació, $|f(0.3) - p_3(0.3)|$, fent servir el teorema anterior i compareu-la amb el valor obtingut en l'apartat precedent.

2.6. Interpolació inversa

Permeteu-nos introduir aquesta aplicació de la interpolació amb un exemple.

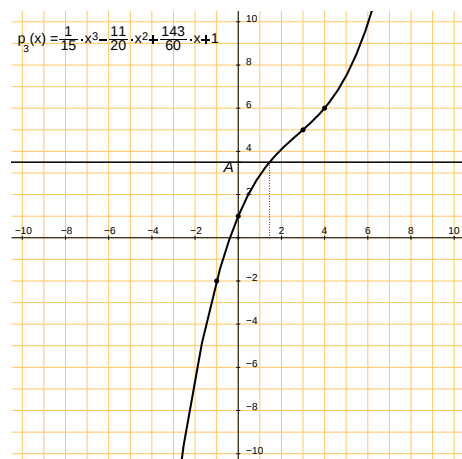
Exemple 11

Donada la taula següent de valors per a una determinada funció $f(x)$:

x_k	−1	0	3	4
f_k	−2	1	5	6

ens preguntem per a quin valor aproximat α aquesta funció pren el valor $A = 3.5$.

Una primera possibilitat de resoldre-ho és la següent: considerem $p_3(x)$ el seu polinomi interpolador i mirem de trobar α que compleixi $p_3(\alpha) = A$. Gràficament correspon a la figura 18 i noteu que resoldre l'equació $p_3(\alpha) = A$ pot ser, en general, no trivial.

Figura 18: Intersecció entre $y = p_3(x)$ i $y = A = 3.5$

Una altra possibilitat és l'anomenada **Interpolació inversa**, que consisteix en la idea següent: si la taula de valors de la funció $f(x)$ és creixent o decreixent podem suposar que com a mínim en l'interval considerat la funció $f(x)$ és invertible*. Sigui $g(x)$ la seva inversa, és a dir, $y = f(x) \Leftrightarrow x = g(y)$. Considereu ara la taula de valors corresponent a la funció $g(y)$. Aquesta taula no és res més que la taula de la funció $f(x)$ invertint els papers d'abscisses i les seves imatges:

y_k	-2	1	5	6
g_k	-1	0	3	4

Si calculem $q_3(y)$ el polinomi interpolador d'aquesta taula (aplicant el mètode de Newton) a partir de l'esquema triangular

-2	-1			
		1/3		
1	0		5/84	
		3/4		-1/840
5	3		1/20	
		1		
6	4			

tenim que

$$q_3(y) = -1 + \frac{1}{3}(y+2) + \frac{5}{84}(y+2)(y-1) - \frac{1}{840}(y+2)(y-1)(y-5).$$

Aleshores trobar un valor aproximat de α que compleixi $f(\alpha) = A$ és equivalent a obtenir $\alpha = g(A)$. Per tant, en el nostre cas, fent servir que $A = 3.5$, tenim que

$$\alpha \simeq q_3(A) = q_3(3.5).$$

* A la pràctica, el que demanem és no tenir dues abscisses amb el mateix valor de f , és a dir, x_k i x_j diferents de manera que $f_k = f_j$.

Si per a avaluar $q_3(y)$ utilitzem l'expressió

$$q_3(y) = -1 + (y + 2) \left(\frac{1}{3} + (y - 1) \left(\frac{5}{84} - \frac{1}{840}(y - 5) \right) \right),$$

que minimitza el nombre d'operacions, s'obté $\alpha \simeq q_3(3.5) = 1.67633929$.

2.7. Interpolació d'Hermite

El problema de la interpolació d'Hermite consisteix a trobar el polinomi interpolador d'una taula de valors corresponents a una certa funció $f(x)$ on, a més, s'imposen condicions sobre les derivades en algunes de les seves abscisses. Per exemple:

x_k	x_0	x_1	x_2
$f(x_k)$	f_0	f_1	f_2
$f'(x_k)$	f'_0		f'_2

Noteu que aquesta taula imposa cinc condicions sobre el polinomi interpolador, els quals determinen cinc coeficients i, per tant, el polinomi interpolador és de grau més petit o igual que 4, $H_4(x)$. Aquest polinomi rep el nom de **polinomi d'Hermite** de la taula anterior. Igual que el cas del polinomi interpolador, el polinomi d'Hermite $H_4(x)$ es pot trobar imposant les condicions

$$H_4(x_k) = f_k, \quad k = 0, 1, 2 \quad H'_4(x_0) = f'_0, \quad H'_4(x_2) = f'_2,$$

i resolent el sistema lineal obtingut (vegeu la figura 19).

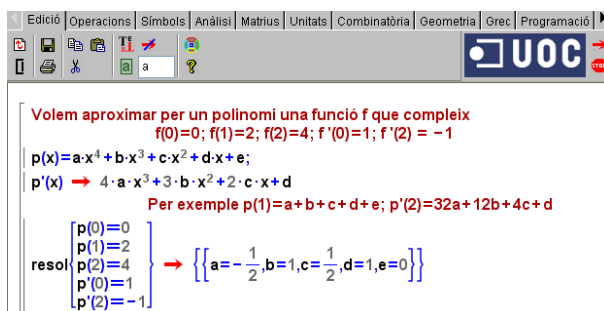


Figura 19: Resolució directa del polinomi d'Hermite

El polinomi d'Hermite corresponent a una taula de valors $\{(x_k, f_k, f'_k)\}_{k=0,\dots,n}$ es pot calcular a partir d'una generalització del mètode de Newton que a continuació detallarem i que presenta les variacions següents respecte d'aquest mètode:

- En la primera i segona columnes cal repetir els valors (x_k, f_k) si coneixem el valor f'_k de la derivada en l'abscissa x_k . Per exemple, en el nostre cas

voldria dir

$$\begin{array}{c|l} x_0 & f[x_0] = f_0 \\ x_0 & f[x_0] = f_0 \\ x_1 & f[x_1] = f_1 \\ x_2 & f[x_2] = f_2 \\ x_2 & f[x_2] = f_2 \end{array}$$

- Calculem ara la tercera columna:

$$\begin{array}{c|l} x_0 & f[x_0] \\ & f[x_0, x_0] \\ x_0 & f[x_0] \\ & f[x_0, x_1] \\ x_1 & f[x_1] \\ & f[x_1, x_2] \\ x_2 & f[x_2] \\ & f[x_2, x_2] \\ x_2 & f[x_2] \end{array}$$

Observeu que apareixen dues diferències dividides que, en principi, no tenen sentit perquè s'avaluen en el mateix punt: $f[x_0, x_0]$ i $f[x_2, x_2]$. Per a calcular-les cal tenir en compte que

$$\begin{aligned} f[x_0, x_0] &= \lim_{x \rightarrow x_0} f[x_0, x] = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f[x] - f[x_0]}{x - x_0} = \\ &= \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0) = f'_0. \end{aligned}$$

De manera anàloga es dedueix que $f[x_2, x_2] = f'(x_2) = f'_2$, i així l'esquema anterior s'escriu

$$\begin{array}{c|l} x_0 & f[x_0] \\ & f[x_0, x_0] = f'_0 \\ x_0 & f[x_0] \\ & f[x_0, x_1] \\ x_1 & f[x_1] \\ & f[x_1, x_2] \\ x_2 & f[x_2] \\ & f[x_2, x_2] = f'_2 \\ x_2 & f[x_2] \end{array}$$

Per aquest motiu el mètode que explicarem és conegut també com **de les diferències dividides generalitzades**.

- A partir d'aquest pas, l'esquema es completa de manera similar a com es

fa en el mètode de Newton

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_0] = f'_0$		
x_0	$f[x_0]$	$f[x_0, x_0, x_1]$		
		$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_0, x_1, x_2]$	
x_1	$f[x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$		$f[x_0, x_0, x_1, x_2, x_2]$
		$f[x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_2]$	
x_2	$f[x_2]$	$f[x_1, x_2, x_2]$		
		$f[x_2, x_2] = f'_2$		
x_2	$f[x_2]$			

Llavors, el polinomi d'Hermite és donat per l'expressió

$$\begin{aligned}
 H_4(x) = & f[x_0] + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + \\
 & f[x_0, x_0, x_1, x_2](x - x_0)^2(x - x_1) + \\
 & f[x_0, x_0, x_1, x_2, x_2](x - x_0)^2(x - x_1)(x - x_2).
 \end{aligned}$$

- Es pot generalitzar la mateixa idea per al cas en què siguin conegudes algunes derivades d'ordre superior de la funció $f(x)$ en algunes de les abscisses, és a dir, per exemple, una taula del tipus següent:

x_k	x_0	x_1	x_2	x_3
$f(x_k)$	f_0	f_1	f_2	f_3
$f'(x_k)$	f'_0		f'_2	f'_3
$f''(x_k)$	f''_0			f''_3

En aquest cas caldrà fer servir que $f[x_j, x_j, x_j] = f''_j$.

Exemple 12

Volem calcular el polinomi d'Hermite corresponent a la taula

x_k	0	1	2
f_k	0	2	4
f'_k	1		-1

Són cinc condicions que s'han de verificar i que determinen un polinomi de grau més petit o igual que 4, $H_4(x)$. Calculem l'esquema corresponent

de diferències dividides generalitzades

0	$f_0 = 0$			
		$f[x_0, x_0] = f'_0 = 1$		
0	$f_0 = 0$		1	
		$f[x_0, x_1] = 2$		$-1/2$
1	$f_1 = 2$		0	$-1/2$
		$f[x_1, x_2] = 1$		$-3/2$
2	$f_2 = 4$		-3	
		$f[x_2, x_2] = f'_2 = -1$		
2	$f_2 = 4$			

Finalment,

$$\begin{aligned}
 H_4(x) &= 0 + 1(x-0) + 1(x-0)^2 - \frac{1}{2}(x-0)^2(x-1) - \\
 &\quad \frac{1}{2}(x-0)^2(x-1)(x-2) = \\
 &\quad x + x^2 - \frac{1}{2}x^2(x-1) - \frac{1}{2}x^2(x-1)(x-2).
 \end{aligned}$$

2.7.1. Fórmula de l'error en la interpolació d'Hermite

Com en el cas polinomial, el resultat següent proporciona una expressió de l'error comès en la interpolació d'Hermite. Per a simplificar la seva notació, ens restringim només al cas en el qual la taula està formada per valors de la funció i la derivada, és a dir, $\{(x_k, f_k, f'_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$.

Teorema: donada f una funció amb derivades contínues fins a ordre $2n+2$, sigui $H_{2n+1}(x)$ el polinomi d'Hermite en els punts $\{(x_k, f_k, f'_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$. Aleshores, l'error (absolut) comès en aproximar $f(\alpha)$ per $H_{2n+1}(\alpha)$ és donat per

$$f(\alpha) - H_{2n+1}(\alpha) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi_\alpha)}{(2n+2)!} [(\alpha - x_0)(\alpha - x_1) \cdots (\alpha - x_n)]^2,$$

on ξ_α pertany a l'interval més petit que conté els punts $x_0, x_1, \dots, x_n, \alpha$.

Activitat 14

En l'activitat 12 heu buscat $p_2(x)$ polinomi interpolador de la funció e^x en els punts $x = -1, 0, 1$ i l'heu utilitzat per a donar una aproximació $p_2(1/2)$ de $\sqrt{e}$. Considereu ara la mateixa taula i afegiu la condició per a la

derivada: $f'(0) = 1$. Busqueu el polinomi d'Hermite $H_3(x)$ corresponent i feu-lo servir per a estimar $\sqrt{e}$. Compareu l'aproximació obtinguda amb el valor real de $\sqrt{e}$. Ha millorat l'aproximació respecte de la que heu trobat en aquella ocasió?

Activitat 15

Trobeu el polinomi d'Hermite $H_5(x)$ que interpola la taula

x_k	-1	3	4
f_k	1	-2	4
f'_k	0	1	2

i avalueu $H_5(0)$ fent servir la regla de Horner.

2.8. Fenomen de Runge

Sembla intuïtivament raonable pensar que, si volem aproximar una certa funció $f(x)$, en un interval $[a, b]$, com més gran sigui el nombre d'abscisses que interpolem més gran serà la semblança entre la funció i el seu polinomi interpolador. Malgrat això, aquest resultat és en general fals i un exemple que ho demostra és l'anomenat **fenomen de Runge**. Aquest fenomen s'observa quan prenem un conjunt relativament gran ($n \geq 9, 10$, aprox.) d'abscisses equiespaciades (és a dir, amb la mateixa distància entre dues d'elles consecutives) i calculem el polinomi interpolador corresponent $p(x)$. Es pot observar aleshores que, tot i que la semblança entre $p(x)$ i la funció $f(x)$ és gran al centre de l'interval d'interpolació, la discrepància entre ambdues gràfiques als extrems de l'interval és molt gran: d'altra banda aquesta diferència és més acusada com més alt és el grau del polinomi interpolador.

Exemple 13

Considerem la funció $f(x) = 1/(35x^2 + 2)$ i sigui $p_{10}(x)$ el polinomi interpolador de grau més petit o igual a 10 en els punts $-1, -0.8, -0.6, \dots, 0, \dots, 0.6, 0.8, 1$. El dibuix de les dues gràfiques s'observa en la figura 20.

Per a evitar aquest fenomen convé no treballar amb graus d'interpolació alts ni, en aquest cas, amb abscisses equiespaciades. Els mètodes que s'acostumen a fer servir divideixen l'interval d'interpolació en subinterval amb poques abscisses per interval. Després busquen els polinomis interpoladors corresponents (ara de grau baix, normalment 3 o 4) i demanen com a condicions afegides que aquests polinomis "encaixin" bé entre ells: a més de coincidir aquests polinomis en els punts d'intersecció entre subinterval, també es demana que coincideixin les primeres i segones derivades en aquests punts. Així

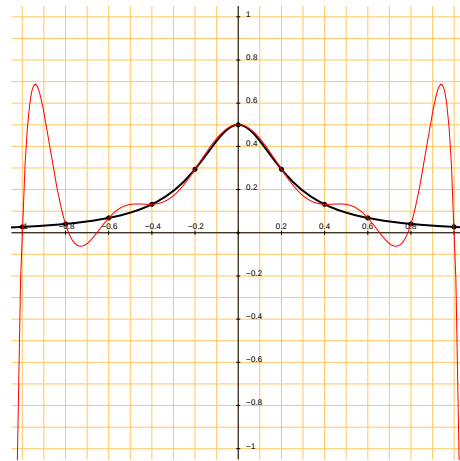


Figura 20: Gràfiques de la funció $f(x) = 1/(35x^2 + 2)$ i el polinomi interpolador $p_{10}(x)$

s'obtenen funcions polinomials definides a trossos i que, en el seu conjunt formen una funció de classe C^2 (o sigui contínua, derivable dues vegades i amb segona derivada contínua) Aquests polinomis interpoladors a trossos es denominen *splines* i són molt utilitzats, sobretot, en l'enginyeria.

3. Aplicacions de la interpolació de funcions

A banda de la seva utilitat *per se* com a eina d'aproximació de funcions, la interpolació polinòmica proporciona fórmules d'aproximació de derivades i d'integrals d'aquestes funcions. En els subapartats següents presentarem breument algunes de les més utilitzades.

3.1. Derivació numèrica

3.1.1. Introducció

Suposeu que coneixem la taula següent de valors relativa a una funció $f(x)$:

x_k	1.8	1.9	2	2.1	2.2
f_k	1.280725	1.345581	1.417223	1.483962	1.552837

(3.1)

i que volem aproximar $f'(x)$. Una possible manera de fer-ho és la següent: considerem $p_4(x)$ el seu polinomi interpolador de grau més petit o igual que 4 i aleshores podem pensar que

$$f'(x) \simeq p'_4(x).$$

Malauradament, aquesta fórmula no és del tot satisfactòria atès que no tenim una expressió per a l'error comès en un punt x qualsevol. Ho expliquem breument. Recordeu (vegeu 2.2) que, en el nostre cas

$$f(x) - p_4(x) = \frac{f^{(5)}(\xi_x)}{5!} (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)(x - x_4)$$

o, equivalentment,

$$f(x) - p_4(x) = g(x) \omega_4(x),$$

on hem definit

$$g(x) = \frac{f^{(5)}(\xi_x)}{5!}, \quad \omega_4(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)(x - x_4)$$

i ξ_x pertany a l'interval més petit que conté $x_0, x_1, \dots, x_4, x$. Observeu que, derivant l'expressió anterior obtenim

$$f'(x) - p'_4(x) = g'(x) \omega_4(x) + g(x) \omega'_4(x),$$

fórmula de l'error comès en aproximar $f'(x)$ per $p'_4(x)$. L'inconvenient d'aquesta fórmula és que $g(x)$ depèn d'una certa funció ξ_x que desconeixem, de manera que *a priori* no podem conèixer $g'(x)$ en un punt x qualsevol. El que sí que

podem fer, en canvi, és avaluar aquesta expressió en el supòsit que $x = x_k$, on x_k és qualsevol de les abscisses d'interpolació. En aquest cas sabem que $\omega_4(x_k) = 0$ i, per tant, tenim que

$$f'(x_k) - p'_4(x_k) = g'(x_k) \omega_4(x_k) + g(x_k) \omega'_4(x_k) = g(x_k) \omega'_4(x_k)$$

per a $k = 0, 1, \dots, 4$. A més, no és difícil comprovar que

$$\omega'_4(x_k) = (x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_4),$$

de manera que podem escriure

$$f'(x_k) - p'_4(x_k) = \frac{f^{(5)}(\xi_{x_k})}{5!} (x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_4),$$

on ξ_{x_k} pertany a l'interval $[x_0, x_4]$. Per exemple, tindrem que

$$f'(x_2) - p'_4(x_2) = \frac{f^{(5)}(\xi_{x_2})}{5!} (x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)(x_2 - x_4),$$

o també que

$$f'(x_4) - p'_4(x_4) = \frac{f^{(5)}(\xi_{x_4})}{5!} (x_4 - x_0)(x_4 - x_1)(x_4 - x_2)(x_4 - x_3).$$

En general es té el resultat següent:

Teorema: donada f una funció amb derivades contínues fins a ordre $n+1$, sigui $p_n(x)$ el polinomi interpolador en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$. Aleshores, l'error (absolut) comès en aproximar $f'(x_k)$ per $p'_n(x_k)$, per $k \in \{0, 1, \dots, n\}$ és donat per

$$f'(x_k) - p'_n(x_k) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_{x_k})}{(n+1)!} (x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n),$$

on $\xi_{x_k} \in [x_0, x_n]$.

Per aquesta raó només podrem fer aproximacions de $f'(x)$ en les abscisses d'interpolació. Mostrem ara les fórmules bàsiques més usals.

3.1.2. Diferències cap endavant i diferències centrades

Per simplicitat, suposarem que les nostres abscisses es troben *equiespaciades*, és a dir, entre dues abscisses consecutives qualssevol la distància és sempre h . A més, si suposem que volem aproximar $f'(x_0)$, habitualment centrem la taula d'abscisses entorn seu. És a dir, les escriurem

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Per exemple, si a partir de la taula 3.1 de la funció $f(x)$ volem aproximar $f'(2)$, numerem les abscisses de manera que $x_0 = 2$:

k	-2	-1	0	1	2
x_k	1.8	1.9	2	2.1	2.2
f_k	1.280725	1.345581	1.417223	1.483962	1.552837

En aquest exemple es té $h = 0.1$.

Les dues fórmules que introduïrem en primer lloc es basen a aproximar $f(x)$ per $p_1(x)$, polinomi interpolador de grau més petit o igual que 1. En el primer cas, aquesta interpolació es porta a terme en els punts (x_0, f_0) i (x_1, f_1) , mentre que en el segon la interpolació es porta a efecte en els punts (x_{-1}, f_{-1}) i (x_1, f_1) .

- En el primer cas hem comentat, aplicant el mètode de Newton, tenim que

$$\begin{aligned} f(x) &\simeq p_1(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) = \\ &f_0 + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} (x - x_0) = f_0 + \frac{f_1 - f_0}{h} (x - x_0), \end{aligned}$$

d'on es dedueix que

$$f'(x) \simeq p'_1(x) = \frac{f_1 - f_0}{h}$$

i, per tant, que

$$f'_0 = f'(x_0) \simeq p'_1(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h}.$$

És a dir, si h és prou petita (en cas contrari l'error pot ser molt gran), podem aproximar

$$f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_0}{h} \quad (3.2)$$

o, equivalentment,

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}.$$

Aquest quocient s'anomena **diferència cap endavant** en el punt x_0 . Si l'apliquem en el nostre exemple s'obté

$$f'(2) = f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_0}{h} = \frac{1.483962 - 1.417223}{0.1} = 0.667390.$$

- La segona fórmula prové d'aproximar $f(x)$ pel seu polinomi interpolador a les abscisses x_{-1} i x_1 :

$$\begin{aligned} f(x) &\simeq p_1(x) = f[x_{-1}] + f[x_{-1}, x_1](x - x_{-1}) = \\ &f_{-1} + \frac{f_1 - f_{-1}}{x_1 - x_{-1}} (x - x_{-1}) = f_{-1} + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} (x - x_{-1}). \end{aligned}$$

Anàlogament al cas anterior

$$f'(x) \simeq p'_1(x) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h},$$

d'on s'obté l'anomenada aproximació de la derivada per **diferència centrada**:

$$f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} \quad (3.3)$$

o, equivalentment,

$$f'(x_0) \simeq \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = \frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h}$$

Amb aquesta fórmula, l'aproximació que tenim per $f'(2)$ és

$$f'(2) = f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} = \frac{1.483962 - 1.345581}{2 \cdot 0.1} = 0.691905.$$

Observeu que hi ha certa discrepància entre ambdues aproximacions. Sense entrar en l'estudi de l'error en cada una de les dues fórmules presentades, us direm únicament que, en general

$$\begin{aligned} f'_0 &= \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h) \\ f'_0 &= \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2), \end{aligned}$$

on $O(h)$ indica que l'error en la primera fórmula, **diferència cap endavant**, és aproximadament de la forma $a_e h$, amb a_e una constant desconeguda. De la mateixa manera, $O(h^2)$ en la fórmula de la **diferència centrada** ens indica que l'error que cometem amb aquesta aproximació és del tipus $a_c h^2$, amb a_c una altra constant desconeguda *a priori*. En el nostre exemple això voldria dir que

$$f'(2) \simeq 0.667390, \quad \text{amb un error de la forma } a_e \cdot 10^{-1}$$

si fem servir diferència cap endavant i que

$$f'(2) \simeq 0.691905, \quad \text{amb un error de la forma } a_c \cdot 10^{-2}$$

si fem servir diferència centrada. Per tant, observeu que, com a regla general, l'aproximació per diferència centrada de la derivada és millor que l'obtinguda utilitzant diferència cap endavant.

Activitat 16

Doneu aproximacions per a $f'(1.9)$ i $f'(2.1)$, de la mateixa taula, fent servir la fórmula de la diferència centrada.

A partir de la mateixa idea, podem obtenir fórmules més acurades (amb menys error), interpolant $f(x)$ per polinomis de grau més alt*. En particular, si interpolem $f(x)$ en els punts $\{(x_k, f_k)\}_{k=-2, \dots, 2}$ per $p_4(x)$, i el reescrivim de manera convenient, obtenim la fórmula següent:

* Recordeu que si el grau del polinomi interpolador és alt, aleshores es dona el fenomen de Runge: per tant **més alt** cal entendre-ho com **fins a grau 6, 7**.

$$f'_0 \simeq p'_4(x_0) = \frac{1}{12h} (-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}) \quad (3.4)$$

és a dir,

$$f'(x_0) \simeq p'_4(x_0) = \frac{1}{12h} (-f(x_0 + 2h) + 8f(x_0 + h) - 8f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)),$$

l'error de la qual és del tipus $O(h^4)$. Observeu que l'error és significativament més petit (per tant l'aproximació és millor), però a canvi necessita conèixer el valor de la funció $f(x)$ en més punts. Aplicant aquesta fórmula tenim

$$f'(2) = f'_0 \simeq \frac{1}{12 \cdot 0.1} (-1.552837 + 8 \cdot 1.483962 - 8 \cdot 1.345581 + 1.280725) = 0.69578.$$

Exemple 14

Considereu la taula següent de valors per a la funció $f(x) = \frac{\sin x}{1 + e^x}$:

x_k	f_k	x_k	f_k
1.6	0.16790998	2.1	0.094173398
1.7	0.15317776	2.2	0.080647912
1.8	0.13814132	2.3	0.067950867
1.9	0.12312166	2.4	0.056180094
2.0	0.10839091		

Volem aproximar $f'(2)$ prenent $h = 0.2$ i $h = 0.1$ i comparar-ho després amb el valor real $f'(2) = -0.14507631$. Així doncs,

- Per a $h = 0.2$ cal considerar abscisses equidistants a distància $h = 0.2$.

En el nostre cas equival a prendre el tros de taula següent:

x_k	f_k
1.6	0.16790998
1.8	0.13814132
2.0	0.10839091
2.2	0.080647912
2.4	0.056180094

Aplicant la fórmula (3.4) s'obté

$$f'(2) \simeq \frac{1}{12 \cdot 0.2} (-0.056180094 + 8 \cdot 0.080647912 - 8 \cdot 0.13814132 + 0.16790998) = -0.14509057.$$

Observeu que l'error comès ha estat, aproximadament,

$$|-0.14507631 - (-0.14509057)| = 0.1426 \cdot 10^{-4}.$$

- Per a $h = 0.1$, necessitem la part següent de la taula inicial:

x_k	f_k
1.8	0.13814132
1.9	0.12312166
2.0	0.10839091
2.1	0.094173398
2.2	0.080647912

En aquest cas la fórmula (3.4) s'escriu

$$\begin{aligned} f'(2) &\simeq \frac{1}{12 \cdot 0.1} (-0.080647912 + \\ &\quad 8 \cdot 0.094173398 - 8 \cdot 0.12312166 + 0.13814132) \\ &= -0.14507724. \end{aligned}$$

Ara l'error comès ha estat, aproximadament,

$$|-0.14507631 - (-0.14507724)| = 9.3 \cdot 10^{-7}.$$

Aproximació numèrica de la derivada

Donada una taula de valors $\{(x_k, f_k)\}_{k=-n, \dots, n}$, amb abscisses equidistants $x_k = x_0 + kh$, $k = \pm 1, \pm 2, \dots$ les fórmules següents proporcionen una aproximació de $f'_0 = f'(x_0)$:

- Diferència cap endavant: $f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h)$.
- Diferència centrada: $f'_0 \simeq \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2)$.
- Diferència centrada de grau 4:

$$f'_0 \simeq p'_4(x_0) = \frac{1}{12h} (-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}) + O(h^4).$$

Activitat 17

Considereu la taula de valors següent, corresponent a una certa funció $f(x)$:

x_k	f_k
1.00	1.50954
1.25	1.69843
1.50	1.90432
1.75	2.12952
2.00	2.36459

Calculeu aproximadament $f'(1.50)$ fent servir les tres fórmules del requadre anterior.

3.2. Integració numèrica

3.2.1. Introducció

Una altra de les aplicacions de la interpolació polinomial és la integració numèrica, que proporciona fórmules aproximades per calcular integrals definides

$$\int_a^b f(x) dx. \quad (3.5)$$

Anàlogament al que s'ha fet en el tema de derivació numèrica, donarem les idees que condueixen a aquesta aproximació però no entrarem (no és el propòsit d'aquests apunts) en un estudi exhaustiu dels seus mètodes ni de l'error comès.

La calculadora Wiris té incorporat el càlcul de primitives i, sempre que li és possible, el fa servir per al càlcul d'integrals. També té incorporada la integració numèrica i, quan en fa ús treu un avís en la finestra inferior de la pantalla (vegeu la figura 21).

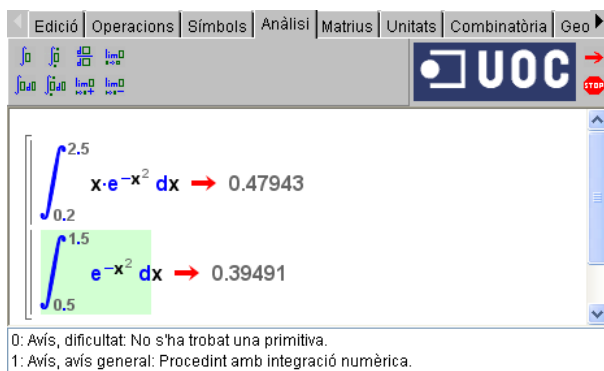


Figura 21: Integració numèrica amb la Wiris

Així doncs, per a aproximar l'expressió (3.5) considerem abscisses $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ equiespaciades ($x_k = x_0 + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$). Si $p_n(x)$ és el polinomi interpolador de grau més petit o igual que n de la taula $\{(x_k, f_k)\}_{k=0,1,\dots,n}$, aleshores podrem aproximar

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \simeq \int_{x_0}^{x_n} p_n(x) dx.$$

Tenint en compte que la part de la dreta d'aquesta expressió és la integral d'un polinomi, que podem resoldre explícitament, podem deduir fórmules numèriques aproximades per a (3.5).

3.2.2. Regla dels trapezis composta

Considerem primer el cas $n = 1$. Observeu que el polinomi interpolador és de grau 1 i s'obté, aplicant el mètode de Newton en els punts (x_0, f_0) , i (x_1, f_1) :

$$p_1(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) = f_0 + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} (x - x_0).$$

Aleshores

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f_0 + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} (x - x_0) dx = \\ &= \left[f_0 x + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \frac{(x - x_0)^2}{2} \right]_{x_0}^{x_1} = \\ &= f_0(x_1 - x_0) + \frac{f_1 - f_0}{2} (x_1 - x_0) = \\ &= \frac{x_1 - x_0}{2} (f_0 + f_1). \end{aligned}$$

Per tant, tenim que

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{x_1 - x_0}{2} (f_0 + f_1)$$

o, si fem servir que $h = x_1 - x_0$,

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{h}{2} (f_0 + f_1), \quad (3.6)$$

que és l'anomenada **regla del trapezi**, atès que

$$\frac{x_1 - x_0}{2} (f_0 + f_1)$$

no és altra cosa que l'àrea del trapezi de base $x_1 - x_0$ i altures f_0 i f_1 (vegeu la figura 22). Observeu que com més petita és la base $x_1 - x_0$, millor aproxima l'àrea del trapezi la integral de $f(x)$. La pregunta natural és ara la següent: suposeu que considerem $c = (a + b)/2$ el punt mitjà de l'interval $[a, b]$; sabem, per les propietats de la integral, que

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx;$$

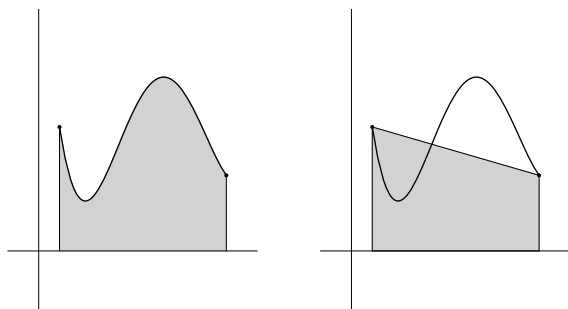


Figura 22: $\int_a^b f(x) dx$ i la seva aproximació per la regla del trapezi

per tant, què succeeix si apliquem la regla del trapezi a cada subinterval i després sumem els seus resultats? Millora l'aproximació de la integral inicial?

La resposta és sí. Dóna lloc a una fórmula compacta que eviti aplicar la regla diverses vegades? De seguida veurem que també és així. Observeu en primer lloc, gràficament, que a mesura que anem augmentant el nombre de subinterval l'aproximació va millorant (vegeu la figura 23). Estudiem-ho per al cas

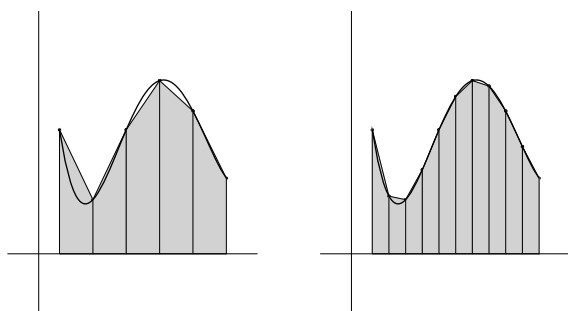


Figura 23: Aproximació de $\int_a^b f(x) dx$ per a 5 i 10 trapezis

en el qual dividim l'interval $[a, b]$ en $N = 3$ subinterval iguals.

Donat l'interval $[a, b]$ definim $h = (b - a)/N = (b - a)/3$ i considerem les abscisses $x_0 = a$ i $x_k = x_0 + kh$, per a $k = 0, 1, \dots, 3$. Observeu que $x_3 = x_0 + 3h = a + (b - a) = b$. Calculem f_k , $k = 0, 1, \dots, 3$. Sabem que

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_3} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \int_{x_2}^{x_3} f(x) dx.$$

Per tant, si apliquem la regla del trapezi a cada una d'aquestes integrals s'obté que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\simeq \frac{h}{2} (f_0 + f_1) + \frac{h}{2} (f_1 + f_2) + \frac{h}{2} (f_2 + f_3) = \\ &\frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + f_3). \end{aligned}$$

La fórmula que s'obté en aplicar la regla del trapezi a cada un dels subinterval

h s'acostuma a anomenar pas d'integració.

en els quals s'ha dividit l'interval $[a, b]$ inicial s'anomena **regla dels trapezis composta** i és donada per la fórmula següent:

Regla dels trapezis (composta):

Donat l'interval $[a, b]$ prenem $N \geq 1$ subintervalls i definim

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, \dots, N$$

de manera que $x_0 = a$, $x_N = b$ i $f_k = f(x_k)$. Aleshores

$$\int_a^b f(x) dx \simeq T_N(f) + \mathcal{O}(h^2),$$

on

$$T_N(f) = \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{N-2} + 2f_{N-1} + f_N).$$

Exemple 15

Volem calcular una aproximació de

$$\int_{0.5}^{1.5} e^{-x^2} dx$$

fent servir la regla dels trapezis composta amb $N = 5$ subintervalls (vegeu la figura 24).

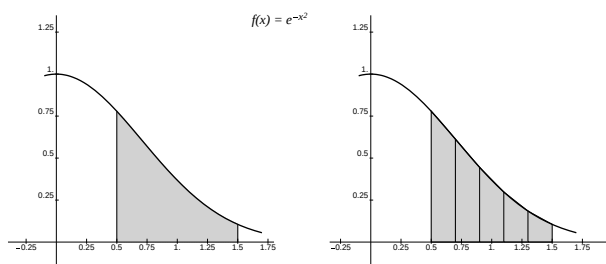


Figura 24: Regla dels trapezis composta per la funció $f(x) = e^{-x^2}$

En aquest cas tenim $a = 0.5$, $b = 1.5$ i

$$h = \frac{b-a}{N} = \frac{1.5-0.5}{5} = 0.2.$$

Per tant, considerem les abscisses

k	0	1	2	3	4	5
x_k	0.5	0.7	0.9	1.1	1.3	1.5

Si calculem $f_k = f(x_k)$ per a cada punt obtenim

x_k	0.5	0.7	0.9	1.1	1.3	1.5
f_k	0.77880	0.61263	0.44486	0.29820	0.18452	0.10540

Aleshores

$$T_5(f) = \frac{0.2}{2} (0.77880 + 2 \cdot 0.61263 + 2 \cdot 0.44486 + 2 \cdot 0.29820 + 2 \cdot 0.18452 + 0.10540) = 0.396462$$

i així,

$$\int_{0.5}^{1.5} e^{-x^2} dx \simeq T_5(f) = 0.396462.$$

Activitat 18

La funció $f(x) = \frac{\sin x}{x}$ no té primitiva expressable de manera analítica i per tant qualsevol integral definida del tipus

$$\int_a^b \frac{\sin x}{x} dx$$

ha de ser necessàriament calculada a partir de mètodes numèrics. Apliqueu la regla dels trapezis composta per calcular

$$\int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx$$

amb $N = 8$ subinterval·ls.

3.2.3. Regla de Simpson composta

La deducció de la regla de Simpson correspon al cas en què en l'interval $[a, b]$ interpo·lem $f(x)$ per un polinomi de grau més petit o igual que 2, $p_2(x)$. Aleshores

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b p_2(x) dx.$$

Noteu que $p_2(x)$ és senzillament una paràbola. Així la **regla de Simpson** per a un únic interval s'expressa de la manera següent:

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{h}{3} \left(f(a) + 4 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right). \quad (3.7)$$

Anàlogament al cas de la regla dels trapezis composta, podem subdividir l'interval donat $[a, b]$ en diferents subinterval·ls, tots ells de la mateixa longitud, i obtenir així una fórmula derivada d'aplicar a cada subinterval la regla de Simpson (vegeu la figura 25).

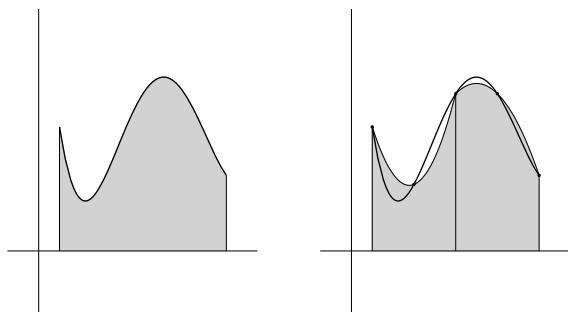


Figura 25: Aproximació de $\int_a^b f(x) dx$ per la regla de Simpson

Fem-ho també per a un valor petit N de subinterval·ls abans de donar l'expressió general. Així, doncs, considerem l'interval $[a, b]$ i el dividim en $N = 3$ subinterval·ls iguals. Com en el cas de la regla dels trapezis composta, escrivim

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{I_1} f(x) dx + \int_{I_2} f(x) dx + \int_{I_3} f(x) dx,$$

on I_1, I_2, I_3 són els tres subinterval·ls (de la mateixa longitud) obtinguts, i aproximem cada una d'aquestes integrals per la integral del corresponent polinomi interpolador de grau més petit o igual que 2. Això implica que haurem de considerar tres abscisses en cada interval I_j : els seus extrems i el punt mitjà corresponent. Per tant, en cada un dels subinterval·ls tindrem

$$\begin{aligned} I_1 : & \quad \text{abscisses: } x_0, x_1, x_2, \\ I_2 : & \quad \text{abscisses: } x_2, x_3, x_4, \\ I_3 : & \quad \text{abscisses: } x_4, x_5, x_6, \end{aligned}$$

on x_1 és el punt mitjà de l'interval $[x_0, x_2]$, x_3 de l'interval $[x_2, x_4]$ i x_5 de $[x_4, x_6]$. Aquesta partició de $[a, b]$ equival a considerar $x_0 = a$ i a definir les abscisses

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2N, \quad \text{on} \quad h = \frac{b-a}{2N}.$$

Calculant aleshores els valors f_k corresponents i aplicant la regla de Simpson a cada subinterval I_j s'obté

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x) dx + \int_{x_4}^{x_6} f(x) dx \simeq \\ &\frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + f_2) + \frac{h}{3} (f_2 + 4f_3 + f_4) + \\ &\frac{h}{3} (f_4 + 4f_5 + f_6) = \\ &\frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + f_6). \end{aligned}$$

A diferència del cas dels trapezis, en la regla composta de Simpson necessita conèixer $f(x)$ en un nombre senar d'abscisses. Aleshores la regla general s'escriu així:

Regla de Simpson (composta):

Donat l'interval $[a, b]$ prenem un nombre $N \geq 1$ de subinterval·s i definim $x_0 = a$,

$$h = \frac{b-a}{2N}, \quad x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, \dots, 2N$$

i $f_k = f(x_k)$. Aleshores

$$\int_a^b f(x) dx \simeq S_N(f) + \mathcal{O}(h^4),$$

on

$$S_N(f) = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{2N-2} + 4f_{2N-1} + f_{2N})$$

Exemple 16

Considerem novament l'exemple 3.2 i calculem la mateixa aproximació fent servir la regla de Simpson (composta) per a $N = 3$ subinterval·s (un exemple de com es veu gràficament per a $N = 2$ subinterval·s el teniu en la figura 26). En el nostre cas tenim

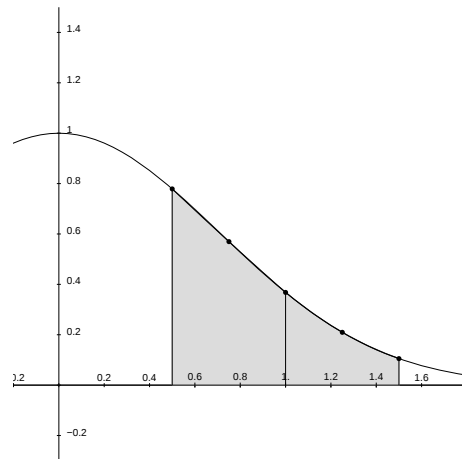


Figura 26: Aproximació per Simpson: dos subinterval·s

$$h = \frac{b-a}{2N} = \frac{1.5-0.5}{6} \simeq 0.1666667.$$

Per tant, podem considerar la taula

k	x_k	f_k
0	0.5	0.7788008
1	0.6666667	0.6411804
2	0.8333333	0.4993518
3	1.	0.3678794
4	1.1666667	0.2563758
5	1.3333333	0.1690133
6	1.5	0.1053992

Aleshores,

$$\int_{0.5}^{1.5} e^{-x^2} dx \simeq S_3(f),$$

on

$$\begin{aligned} S_3(f) &= \frac{0.1666667}{3} (0.7788008 + 4 \cdot 0.6411804 + \\ &2 \cdot 0.4993518 + 4 \cdot 0.3678794 + 2 \cdot 0.2563758 + \\ &4 \cdot 0.1690133 + 0.1053992) \simeq 0.3948861 \end{aligned}$$

Activitat 19

Apliqueu la regla de Simpson composta per calcular

$$\int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx$$

amb $N = 4$.

Resum

En aquest mòdul s'ha volgut introduir l'estudiant en l'ús d'algorismes numèrics per a la resolució de problemes de difícil si no impossible resolució analítica. S'han presentat algorismes bàsics en dues línies diferents: càlcul de zeros de funcions i interpolació de funcions; deriven en aquest últim apartat un altre apartat d'aplicacions a la derivació i la integració numèrica de funcions.

Exercicis d'autoavaluació

1. – Sabem que la funció $f(x) = -3 + x^3 \sin(x) + x$ té un zero en l'interval $[0, 2]$. Calculeu-lo amb una precisió de 10^{-4} aplicant el mètode de la bisecció. Quantes iteracions calen?
2. – Repetiu el càlcul anterior aplicant el mètode de Newton, prenent $x_0 = 2$ com a valor inicial i amb una precisió de 10^{-12} .
3. – Resoleu el mateix problema aplicant ara el mètode de la secant, a partir dels punts $x_0 = 0$ i $x_1 = 2$, i amb una precisió de 10^{-11} .
4. – Apliqueu el mètode de la regla falsi al mateix problema amb valors inicials $x_0 = 0$ i $x_1 = 2$ i una precisió de 10^{-7} .
5. – Calculeu el polinomi interpolador $p_3(x)$ de la taula següent:

x_k	0.2	0.8	1.3	1.9
f_k	3	2.2	1.7	2.1

fent servir el mètode de Lagrange. Un cop obtingut $p_3(x)$, desenvolueu-lo en potències de x i calculeu $p_3(1)$ fent servir la regla de Horner.

6. – D'una funció f és coneixen els valors següents:

x_k	-0.5	2	3	3.5
f_k	2	3	-1	0.5

Utilitzant el mètode de Newton, calculeu el polinomi $p_3(x)$ que la interpola. Feu-lo servir per donar una aproximació, $p_3(1)$, de $f(1)$. Avalueu $p_3(1)$ usant la regla de Horner. Quin polinomi interpolador s'obté si afegim la dada $(x_4, f_4) = (0, 1.2)$?

7. – Considereu la taula de valors següent, corresponent a una funció $f(x)$:

x_k	-0.5	0.1	1	2.5
f_k	2.527	3.879	6.452	10.346

Useu interpolació inversa per a donar una aproximació del valor α que compleix $f(\alpha) = 9$.

8. – Calculeu el polinomi d'Hermite corresponent a la taula de valors següent:

x_k	2	3	4
f_k	7.325	8.975	6.018
f'_k	2.234	-0.453	1.018

9. – Feu servir la regla dels trapezis composta per a trobar una aproximació de la integral

$$\int_3^4 \left(\sqrt{x^3 + 1} \right) \ln x \, dx$$

amb $N = 4, 8$ i 16 subinterval·ls.

10. – Apliqueu la fórmula de Simpson composta per a aproximar la integral

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

amb $N = 5$ subinterval·ls.

Solucionari

Activitats

1. – Si definim $f(x) = e^{-x} - x^4$, trobar una solució de l'equació $e^{-x} = x^4$ és equivalent a trobar un zero de la funció (contínua) $f(x)$. Busquem ara un interval $[a, b]$ on f presenti un canvi de signe. Això podem fer-ho a partir de la seva gràfica o bé calculant $f(x)$ en una sèrie de punts. En el nostre cas podem comprovar que en $a = 0$ i $b = 3$ es té $f(a) = 1 > 0$ i $f(b) = -80.9502 < 0$. Per tant, existeix $\alpha \in [0, 3]$ que compleix $f(\alpha) = 0$. Aleshores, es té

n	I_n	longitud de I_n
1	[0.00000000, 1.50000000]	1.500000
2	[0.75000000, 1.50000000]	$7.500000 \cdot 10^{-1}$
3	[0.75000000, 1.12500000]	$3.750000 \cdot 10^{-1}$
4	[0.75000000, 0.93750000]	$1.875000 \cdot 10^{-1}$
5	[0.75000000, 0.84375000]	$9.375000 \cdot 10^{-2}$
6	[0.79687500, 0.84375000]	$4.687500 \cdot 10^{-2}$
7	[0.79687500, 0.82031250]	$2.343750 \cdot 10^{-2}$
8	[0.80859375, 0.82031250]	$1.171875 \cdot 10^{-2}$
9	[0.81445313, 0.82031250]	$5.859375 \cdot 10^{-3}$

Per tant, podem donar com a resposta qualsevol valor de l'interval $[0.81445313, 0.82031250]$. Habitualment, s'acostuma a donar el seu punt mitjà, que en aquest cas és 0.81738281, és a dir, $\alpha \simeq 0.81738281$. Comproveu que $f(0.81738281) = -0.00479135$ i observeu que el nombre (mínim) d'iteracions necessàries per a obtenir la precisió volguda és 9, i es pot deduir de la fórmula

$$N = \left\lceil \frac{\ln \frac{3-0}{10^{-2}}}{\ln 2} \right\rceil + 1 = 9.$$

2. – Considerem la funció (contínua) $f(x) = 2 \sin x - x$ i busquem $\alpha \in [\pi/2, \pi]$ que compleixi $f(\alpha) = 0$ amb una precisió de 10^{-2} . Si apliquem

el mètode de la bisecció s'obté la taula d'aproximacions següent:

n	I_n	longitud de I_n
0	[1.57079633, 3.14159265]	1.57079633
1	[1.57079633, 2.35619449]	$7.853982 \cdot 10^{-1}$
2	[1.57079633, 1.96349541]	$3.926991 \cdot 10^{-1}$
3	[1.76714587, 1.96349541]	$1.963495 \cdot 10^{-1}$
4	[1.86532064, 1.96349541]	$9.817477 \cdot 10^{-2}$
5	[1.86532064, 1.91440802]	$4.908739 \cdot 10^{-2}$
6	[1.88986433, 1.91440802]	$2.454369 \cdot 10^{-2}$
7	[1.88986433, 1.90213618]	$1.227185 \cdot 10^{-2}$
8	[1.88986433, 1.89600025]	$6.135923 \cdot 10^{-3}$

Si donem el punt mitjà de l'últim interval com a aproximació tenim $\alpha \simeq 1.89293229$ i $f(1.89293229) = 0.00419041$.

3. – Considerem la funció $f(x) = (2.2)^x - (1.1)x - 5.5$. Aleshores trobar α solució de l'equació $(2.2)^x = (1.1)x + 5.5$ equival a trobar α , punt de tall de les corbes $y = (2.2)^x$ i $y = (1.1)x + 5.5$. De la mateixa manera, equival a trobar α , zero de la funció contínua $f(x)$. Segons s'observa en la figura 4, aquestes gràfiques es tallen en un punt situat en l'interval $[a, b] = [2, 4]$. En efecte, $f(a) = f(2) = -2.86 < 0$ i $f(b) = f(4) = 13.5256 > 0$. Aplicant el mètode de la Bisecció obtenim els intervals següents:

n	I_n	longitud de I_n
1	[2.00000000, 3.00000000]	1.000000
2	[2.50000000, 3.00000000]	$5.000000 \cdot 10^{-1}$
3	[2.50000000, 2.75000000]	$2.500000 \cdot 10^{-1}$
4	[2.62500000, 2.75000000]	$1.250000 \cdot 10^{-1}$
5	[2.68750000, 2.75000000]	$6.250000 \cdot 10^{-2}$
6	[2.68750000, 2.71875000]	$3.125000 \cdot 10^{-2}$
7	[2.70312500, 2.71875000]	$1.562500 \cdot 10^{-2}$
8	[2.71093750, 2.71875000]	$7.812500 \cdot 10^{-3}$

Observeu que si volem una aproximació de α molt més precisa cal un nombre considerable d'iteracions. Igual que abans donem com a aproximació de α el punt mitjà de l'últim interval: 2.71484375. Comproveu que $f(2.71484375) = 0.01768800$ i que el nombre d'iteracions necessàries és 8. Efectivament,

$$N = \left\lceil \frac{\ln \frac{4-2}{10^{-2}}}{\ln 2} \right\rceil + 1 = 8.$$

Per trobar l'altra arrel procedim de manera anàloga: noteu que $f(-6) =$

$1.10882 > 0$ i que $f(-4) = -1.05731 < 0$. Aleshores,

n	I_n	longitud de I_n
1	$[-5.00000000, -4.00000000]$	1.000000
2	$[-5.00000000, -4.50000000]$	$5.000000 \cdot 10^{-1}$
3	$[-5.00000000, -4.75000000]$	$2.500000 \cdot 10^{-1}$
4	$[-5.00000000, -4.87500000]$	$1.250000 \cdot 10^{-1}$
5	$[-5.00000000, -4.93750000]$	$6.250000 \cdot 10^{-2}$
6	$[-5.00000000, -4.96875000]$	$3.125000 \cdot 10^{-2}$
7	$[-4.98437500, -4.96875000]$	$1.562500 \cdot 10^{-2}$
8	$[-4.98437500, -4.97656250]$	$7.812500 \cdot 10^{-3}$

Per tant podem prendre $\alpha \simeq -4.98046875$. Comproveu que en aquest punt el valor de f és prou petit: $f(-4.98046875) = -0.00177946$.

4. – Si dibuixeu les gràfiques de les funcions $y = e^x - 2$ i $y = x$ podeu observar que es tallen únicament a dos punts α_1, α_2 situats, aproximadament, a prop de $x = -2$ i $x = 1$, respectivament. Així doncs, apliquem el mètode de Newton, que en el nostre cas equival a la fórmula recurrent

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{e^{x_k} - 2 - x_k}{e^{x_k} - 1}$$

En el cas α_1 , prenem valor inicial $x_0 = -2$ i obtenim la taula següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	-2.00000000000000	
1	-1.8434823572503345	$1.56518 \cdot 10^{-1}$
2	-1.8414060661579266	$2.07629 \cdot 10^{-3}$
3	-1.8414056604369762	$4.05721 \cdot 10^{-7}$
4	-1.8414056604369606	$1.55431 \cdot 10^{-14}$

D'aquesta manera es té $\alpha_1 \simeq -1.8414056604370$. Podeu comprovar que $f(-1.8414056604370) = 0.000000 \dots$

Anàlogament, per a calcular α_2 prenem $x_0 = 1$ i obtenim

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	1.00000000000000	
1	1.1639534137386529	$1.63953 \cdot 10^{-1}$
2	1.1464211850430086	$1.75322 \cdot 10^{-2}$
3	1.1461932587044987	$2.27926 \cdot 10^{-4}$
4	1.1461932206205836	$3.80839 \cdot 10^{-8}$
5	1.1461932206205825	$1.11022 \cdot 10^{-15}$

Per tant, $\alpha_2 \simeq 1.1461932206206$, amb un error inferior a 10^{-12} (de fet, inferior a 10^{-14}). Comproveu que $f(1.1461932206206) = -2.22045 \cdot 10^{-16}$.

5. – Si dibuixem les gràfiques de les funcions $(2.2)^x$ i $(1.1)x + 5.5$ podem observar que es tallen en dos punts: un en l'interval $[-6, -4]$ i l'altre en l'interval $[2, 4]$. En altres paraules, si definim $f(x) = (2.2)^x - (1.1)x - 5.5$, aquesta funció té dues arrels en els intervals anteriors. Aleshores, l'esquema del mètode de Newton és

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{(2.2)^{x_k} - (1.1)x_k - 5.5}{(2.2)^{x_k} \ln 2.2 - 1.1}.$$

Pel primer zero prenem condició inicial $x_0 = -6$ i obtenim

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	-6.	
1	-4.9855687445768648	1.01443
2	-4.9821096699293967	$3.45907 \cdot 10^{-3}$
3	-4.9821096025625220	$6.73669 \cdot 10^{-8}$
4	-4.9821096025625220	$< 10^{-14}$

Podeu comprovar que $f(-4.9821096025625220) = 3.33501 \cdot 10^{-16}$. Per tant $\alpha_1 \simeq -4.9821096025625220$ amb una precisió de 10^{-12} . Respecte del segon zero, prenem $x_0 = 2$ i obtenim

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	2.	
1	3.0529673409868638	1.05297
2	2.7597905075050395	$2.93177 \cdot 10^{-1}$
3	2.7127537535002006	$4.70368 \cdot 10^{-2}$
4	2.7116838609380296	$1.06989 \cdot 10^{-3}$
5	2.7116833205472379	$5.40391 \cdot 10^{-7}$
6	2.7116833205471003	$1.37668 \cdot 10^{-13}$

Per tant, $\alpha_2 \simeq 2.7116833205471003$ amb un error inferior a 10^{-12} . Podeu comprovar que $f(\alpha_2) \simeq 0$. En efecte, $f(2.7116833205471003) = 4.25007 \cdot 10^{-16}$. Compareu el nombre d'iteracions efectuades i la precisió obtinguda amb la resolució pel mètode de la bisecció.

6. – $\sqrt{7}$ és l'arrel positiva de l'equació $f(x) = 0$ amb $f(x) = x^2 - 7$. Si escrivim en aquest cas l'algorisme de Newton tenim

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^2 - 7}{2x_k} = x_k - \frac{x_k}{2} + \frac{7}{2x_k}.$$

Observeu que aquesta fórmula només necessita operacions elementals: sumes,

restes, productes i divisions. Si apliquem aquest algorisme s'obté

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	1.	
1	4.	3.
2	2.875	1.125
3	2.6548913043478262	$2.20109e - 01$
4	2.6457670441902899	$9.12426e - 03$
5	2.6457513111113693	$1.57331e - 05$
6	2.6457513110645907	$4.67786e - 11$
7	2.6457513110645907	$0.00000e + 00$

Per tant, $\sqrt{7} \simeq 2.6457513110645907$ amb un error inferior a $\frac{1}{2} \cdot 10^{-10}$. Podem dir -tot i que recordeu que no és estrictament correcte- que aquesta aproximació té al menys 10 xifres decimals correctes fent servir l'arrodoniment.

7. – Si apliquem el mètode de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^4 - 8x_k^3 + 24x_k^2 - 32x_k + 16}{4x_k^3 - 24x_k^2 + 48x_k - 32}$$

la convergència és molt lenta:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	3.0000000000000000	
1	2.7500000000000000	$2.50000 \cdot 10^{-1}$
2	2.5625000000000000	$1.87500 \cdot 10^{-1}$
3	2.4218750000000000	$1.40625 \cdot 10^{-1}$
4	2.3164062500000000	$1.05469 \cdot 10^{-1}$
5	2.2373046875000000	$7.91016 \cdot 10^{-2}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
21	2.0023784033623917	$7.92806 \cdot 10^{-4}$
22	2.0017838057105326	$5.94598 \cdot 10^{-4}$
23	2.0013379016681130	$4.45904 \cdot 10^{-4}$
24	2.0010034571134154	$3.34445 \cdot 10^{-4}$
25	2.0007529403896229	$2.50517 \cdot 10^{-4}$
26	2.0005652508728522	$1.87690 \cdot 10^{-4}$

En canvi, atès que l'arrel buscada té multiplicitat més gran que 1, podem utilitzar el mètode de Newton modificat incorporant la multiplicitat sospitada. Així, per exemple, podem considerar

$$x_{k+1} = x_k - 2 \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - 2 \frac{x_k^4 - 8x_k^3 + 24x_k^2 - 32x_k + 16}{4x_k^3 - 24x_k^2 + 48x_k - 32}$$

que proporciona la taula de valors següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	3.0000000000000000	
1	2.5000000000000000	$5.00000 \cdot 10^{-1}$
2	2.2500000000000000	$2.50000 \cdot 10^{-1}$
3	2.1250000000000000	$1.25000 \cdot 10^{-1}$
4	2.0625000000000000	$6.25000 \cdot 10^{-2}$
5	2.0312500000000000	$3.12500 \cdot 10^{-2}$
6	2.0156250000000000	$1.56250 \cdot 10^{-2}$
7	2.0078125000000000	$7.81250 \cdot 10^{-3}$
8	2.0039062500000000	$3.90625 \cdot 10^{-3}$
9	2.0019531250000000	$1.95312 \cdot 10^{-3}$
10	2.0009765625000000	$9.76562 \cdot 10^{-4}$
11	2.0004882812500000	$4.88281 \cdot 10^{-4}$
12	2.0002441406250000	$2.44141 \cdot 10^{-4}$
13	2.0001220703125000	$1.22070 \cdot 10^{-4}$
14	2.0001220703125000	$< 10^{-8}$

En canvi, si usem

$$x_{k+1} = x_k - 3 \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - 3 \frac{x_k^4 - 8x_k^3 + 24x_k^2 - 32x_k + 16}{4x_k^3 - 24x_k^2 + 48x_k - 32}$$

obtenim

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	3.0000000000000000	
1	2.2500000000000000	$7.50000 \cdot 10^{-1}$
2	2.0625000000000000	$1.87500 \cdot 10^{-1}$
3	2.0156250000000000	$4.68750 \cdot 10^{-2}$
4	2.0039062500000000	$1.17188 \cdot 10^{-2}$
5	2.0009765625000000	$2.92969 \cdot 10^{-3}$
6	2.0002441406250000	$7.32422 \cdot 10^{-4}$
7	2.0000610351562500	$1.83105 \cdot 10^{-4}$
8	2.0000610351562500	$< 10^{-8}$

que proporciona l'aproximació $\alpha \simeq 2.0000610351562500$ amb un error inferior a 10^{-8} . Si ara provem amb $m = 4$, és a dir,

$$x_{k+1} = x_k - 4 \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - 4 \frac{x_k^4 - 8x_k^3 + 24x_k^2 - 32x_k + 16}{4x_k^3 - 24x_k^2 + 48x_k - 32}$$

tenim problemes de càlcul efectiu de les aproximacions x_k ja que el denominador es fa molt petit (i en conseqüència, $f(x_k)/f'(x_k)$ es fa molt gran). Per tant, prenem com a millor aproximació la corresponent al cas $m = 3$.

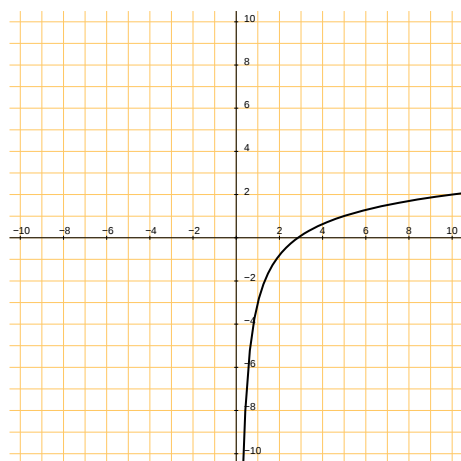


Figura 27: Gràfica de la funció $f(x) = \ln x - \frac{3}{x}$

8. – Dibuixem (vegeu la figura 27) la funció $f(x) = \ln x - \frac{3}{x}$. Observeu que presenta un zero α en l'interval $[2, 4]$. Si fem servir el mètode de la secant amb valors inicials $x_0 = 2$ i $x_1 = 4$ s'obté la seqüència d'iterats següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	2.0000000000000000	
1	4.0000000000000000	
2	3.1181850753808678	$8.81815 \cdot 10^{-1}$
3	2.7832497403478276	$3.34935 \cdot 10^{-1}$
4	2.8624647071846421	$7.92150 \cdot 10^{-2}$
5	2.8574906575988535	$4.97405 \cdot 10^{-3}$
6	2.8573906494567360	$1.00008 \cdot 10^{-4}$
7	2.8573907835179084	$1.34061 \cdot 10^{-7}$

que proporciona l'aproximació $\alpha \simeq 2.8573907835179084$ amb una precisió superior a 10^{-5} . Si, en canvi, apliquem el mètode de la regla falsi -on recordeu que en cada iteració ens quedem amb aquells dos punts que presenten canvi de signe de la funció f - s'obté

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	2.0000000000000000	
1	4.0000000000000000	
1	3.1181850753808678	$8.81815 \cdot 10^{-1}$
2	2.9187427994188853	$1.99442 \cdot 10^{-1}$
3	2.8719358548652667	$4.68069 \cdot 10^{-2}$
4	2.8608455225844382	$1.10903 \cdot 10^{-2}$
5	2.8582117181306783	$2.63380 \cdot 10^{-3}$
6	2.8575858793602076	$6.25839 \cdot 10^{-4}$
7	2.8574371493875010	$1.48730 \cdot 10^{-4}$
8	2.8574018027499903	$3.53466 \cdot 10^{-5}$
9	2.8573934023311534	$8.40042 \cdot 10^{-6}$

que proporciona $\alpha \simeq 2.8573934023311534$ amb la precisió volguda.

9. – Calculem els polinomis de Lagrange associats a les abscisses $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 4$ i $x_3 = 5$:

$$L_0(x) = \frac{(x-0)(x-4)(x-5)}{(-1-0)(-1-4)(-1-5)} = -\frac{1}{30}x^3 + \frac{3}{10}x^2 - \frac{2}{3}x$$

$$L_1(x) = \frac{(x+1)(x-4)(x-5)}{(0+1)(0-4)(0-5)} = \frac{1}{20}x^3 - \frac{2}{5}x^2 + \frac{11}{20}x + 1$$

$$L_2(x) = \frac{(x+1)(x-0)(x-5)}{(4+1)(4-0)(4-5)} = -\frac{1}{20}x^3 + \frac{1}{5}x^2 + \frac{1}{4}x$$

$$L_3(x) = \frac{(x+1)(x-0)(x-4)}{(5+1)(5-0)(5-4)} = \frac{1}{30}x^3 - \frac{1}{10}x^2 - \frac{2}{15}x.$$

Aleshores, el polinomi interpolador de grau més petit o igual que 3 es donat per

$$\begin{aligned} p_3(x) &= f_0L_0(x) + f_1L_1(x) + f_2L_2(x) + f_3L_3(x) = \\ &= 5L_0(x) - 3L_1(x) + 2L_2(x) - 4L_3(x) = \\ &= -\frac{11}{20}x^3 + \frac{7}{2}x^2 - \frac{79}{20}x - 3. \end{aligned}$$

10. – Si prenem $p(x) = 6x^5 - 3x^2 + 4x - 5$ tenim

$$\begin{array}{rcccccc} 6 & 0 & 0 & -3 & 4 & -5 \\ 2 & \downarrow & 12 & 24 & 48 & 90 & 188 \\ \hline 6 & 12 & 24 & 45 & 94 & \boxed{183} \end{array}.$$

Per tant, $p(2) = 183$. En el segon cas, $p(x) = x^7 + x^6 + x^5 + x^4 + x^3 + x^2 + x + 1$. Anàlogament:

$$\begin{array}{rcccccccc} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & \downarrow & 2 & 6 & 14 & 30 & 62 & 126 & 254 \\ \hline 1 & 3 & 7 & 15 & 31 & 63 & 127 & \boxed{255} \end{array}$$

de manera que $p(2) = 255$.

11. – L'esquema triangular de diferències dividides és

$$\begin{array}{c|cccccc} -2 & -7 & & & & & \\ & & \frac{7}{3} & & & & \\ & 1 & 0 & & \frac{1}{6} & & \\ & & & 3 & & -\frac{13}{84} & \\ & 2 & 3 & & -\frac{11}{12} & & \\ & & & -\frac{2}{3} & & & \\ & 5 & 1 & & & & \end{array}$$

i, per tant, el polinomi interpolador és

$$p_3(x) = -7 + \frac{7}{3}(x+2) + \frac{1}{6}(x+2)(x-1) - \frac{13}{84}(x+2)(x-1)(x-2).$$

12. – L'esquema de diferències dividides és

-1	0.3678794412		
		0.6321205588	
0	1		0.5430806346
		1.718281828	
1	2.718281828		

que proporciona el polinomi interpolador

$$p_2(x) = 0.3678794412 + 0.6321205588(x+1) + 0.5430806346(x+1)x.$$

Recordeu que per a avaluar $p_2(x)$ en un punt x donat, minimitzant el nombre d'operacions necessàries, convé reescriure'l de la manera següent:

$$p_2(x) = 0.3678794412 + (x+1)(0.6321205588 + 0.5430806346x).$$

Aleshores,

$$\begin{aligned} p_2(0.5) &= 0.3678794412 + (0.5+1)(0.6321205588 + \\ &\quad 0.5430806346 \cdot 0.5) = 1.72337075535. \end{aligned}$$

13. – (a) Si calculem el valor de $\sqrt{e} = e^{1/2}$ amb la Wiris s'obté 1.6487212707*

Per tant, l'error aproximat que cometem en aproximar $e^{1/2}$ per $p_2(0.5)$ és

$$\begin{aligned} e_1 &= |e^{1/2} - p_2(0.5)| = \\ &|1.6487212707 - 1.72337075535| = 0.07464948465. \end{aligned}$$

Per altra banda, en l'exemple 2.4 hem calculat una estimació de l'error comés en aproximar $e^{1/2}$ per $p_2(0.5)$ a partir de la fórmula de l'error en la interpolació. La fita obtinguda ha estat

$$e_2 = |e^{1/2} - p_2(0.5)| \leq 0.1698926142.$$

Fixeu-vos que la fita aproximada de l'error és gairebé el doble de la diferència real:

$$e_1 = 0.07464948465 < 0.1698926142 = e_2.$$

Això és molt habitual ja que les fites proporcionades per la fórmula de l'error no són mai tan precises com es vol.

(b) Considerem ara la funció $f(x) = \sin(2.2x + 1.1)$. La seva taula de valors corresponent a les abscisses 0.1, 0.2, 0.4 i 0.5 és la següent:

x_k	0.1	0.2	0.4	0.5
f_k	0.9687151001	0.9995258306	0.9174379553	0.808496404

Aleshores:

* Si escrivim a la Wiris $e^{0.5}$ s'obté en realitat 1.6487. Si volem que ens proporcioni aquest resultat amb més xifres decimals podem variar la precisió escrivint abans l'ordre **precisió(N)**; on N és el nombre de xifres volgudes.

- L'esquema de diferències dividides corresponent és

0.1	0.9687151001		
		0.3081073049	
0.2	0.9995258306	–2.3951556050	
		–0.4104393766	0.3297545291
0.4	0.9174379553	–2.2632537933	
		–1.0894155146	
0.5	0.8084964038		

i el polinomi interpolador associat:

$$p_3(x) = 0.9687151001 + 0.3081073049 (x - 0.1) - 2.3951556050 (x - 0.1)(x - 0.2) + 0.3297545291 (x - 0.1)(x - 0.2)(x - 0.4).$$

- Avaluem $p_3(0.3)$ usant la regla de Horner que, en aquest cas, s'escriu

$$p_3(x) = 0.9687151001 + (x - 0.1) (0.3081073049 - (x - 0.2) (2.3951556050 + 0.3297545291 (x - 0.4))) .$$

i que proporciona

$$p_3(0.3) = 0.9687151001 + (0.3 - 0.1) (0.3081073049 - (0.3 - 0.2) (2.3951556050 + 0.3297545291 (0.3 - 0.4))) = 0.9817739399.$$

- Fent servir la Wiris obtenim $f(0.3) = 0.982154317138$, de manera que l'error real en l'aproximació és

$$|f(0.3) - p_3(0.3)| = |0.9821543171 - 0.9817739399| = 0.0003803772 \simeq 0.38 \cdot 10^{-3}.$$

- Si apliquem la fórmula de l'error en la interpolació tenim

$$f(0.3) - p_3(0.3) = \frac{f^{(4)}(\xi_{0.3})}{4!} (0.3 - 0.1)(0.3 - 0.2)(0.3 - 0.4)(0.3 - 0.5),$$

on $\xi_{0.3} \in [0.1, 0.4]$. Si prenem valor absolut tenim

$$|f(0.3) - p_3(0.3)| \leq \frac{|f^{(4)}(\xi_{0.3})|}{4!} |(0.3 - 0.1)(0.3 - 0.2)(0.3 - 0.4)(0.3 - 0.5)| \leq \frac{23.4256}{24} (0.2)^2 (0.1)^2 = 0.0003904267 \simeq 0.39 \cdot 10^{-3},$$

on hem utilitzat la fita

$$f^{(4)}(x) = 23.4256 \sin(2.2x + 1.1) \Rightarrow |f^{(4)}(x)| \leq 23.4256.$$

Noteu que la fita teòrica de l'error obtinguda és propera a l'error real calculat en l'apartat anterior. L'aproximació és, per tant, satisfactòria.

14.— Tenim la taula de valors següent: de la funció $f(x) = e^x$:

x_k	-1	0	1
f_k	0.3678794412	1	2.718281828
f'_k		1	

L'esquema de diferències generalitzades associat és

-1	0.3678794412			
		0.632120056		
0	1		0.367879441	
		1		0.175201193
0	1		0.718281828	
		1.718281828		
1	2.718281828			

D'aquest esquema es dedueix el polinomi d'Hermite corresponent:

$$H_3(x) = 0.3678794412 + 0.632120056 (x + 1) + 0.367879441 (x + 1)x + 0.175201193 (x + 1)x^2.$$

També en aquest cas, per a avaluar $H_3(x)$ en $x = 0.5$, escrivim

$$H_3(x) = 0.3678794412 + (x + 1) (0.632120056 + x (0.367879441 + 0.175201193 x))$$

i obtenim $H_3(0.5) = 1.6576695533$. Si comparem les aproximacions obtingudes amb el valor real s'observa una millora respecte de l'aconseguida en l'activitat 12. En efecte,

$$\begin{aligned} \sqrt{e} &= 1.6487212707 \\ p_2(0.5) &= 1.7233707554 \quad (\text{activitat 12}) \\ H_3(0.5) &= 1.6576695533. \end{aligned}$$

15.— A partir de la taula següent:

x_k	-1	3	4
f_k	1	-2	4
f'_k	0	1	2

es construeix l'esquema de diferències dividides generalitzades

-1	1				
		0			
-1	1		-3/16		
		-3/4		5/32	
3	-2		7/16		121/800
		1		73/80	-1707/4000
3	-2		5		-793/400
		6		-9	
4	4		-4		
		2			
4	4				

que proporciona

$$H_5(x) = 1 - \frac{3}{16} (x+1)^2 + \frac{5}{32} (x+1)^2(x-3) + \frac{121}{800} (x+1)^2(x-3)^2 - \frac{1707}{4000} (x+1)^2(x-3)^2(x-4).$$

Per a avaluar-lo en el punt $x = 0$ escrivim $H_5(x)$ de la forma següent:

$$H_5(x) = 1 + (x+1)^2 \left(-\frac{3}{16} + (x-3) \left(\frac{5}{32} + (x-3) \left(\frac{121}{800} - \frac{1707}{4000} (x-4) \right) \right) \right),$$

Substituint en $x = 0$ s'obté $H_5(0) = \frac{4267}{250}$.

16.— A partir de la taula següent:

k	-2	-1	0	1	2
x_k	1.8	1.9	2	2.1	2.2
f_k	1.280725	1.345581	1.417223	1.483962	1.552837

calculem

$$f'(1.9) \simeq \frac{1.417223 - 1.280725}{0.2} = 0.68249$$

$$f'(2.1) \simeq \frac{1.552837 - 1.417223}{0.2} = 0.67807.$$

17.— Donada la taula següent:

x_k	f_k
1.00	1.50954
1.25	1.69843
1.50	1.90432
1.75	2.12952
2.00	2.36459

tenim

$$f'(1.50) \simeq \frac{2.12952 - 1.90432}{0.25} = 0.9008 \quad (\text{cap endavant})$$

$$f'(1.50) \simeq \frac{2.12952 - 1.69843}{0.5} = 0.86218 \quad (\text{centrada})$$

$$f'(1.50) \simeq \frac{1}{3} (-2.36459 + 8 \cdot 2.12952 - 8 \cdot 1.69843 + 1.50954) = 0.8645567 \quad (\text{centrada d'ordre 4}).$$

18.— En aquest cas

$$\int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx$$

tenim $a = \pi/2$ i $b = \pi$. Si el nombre de subintervalos és $N = 8$ aleshores el **pas d'integració** h és donat per

$$h = \frac{b - a}{N} = \frac{\pi - \pi/2}{8} = 0.19634954.$$

Aleshores, considerem, per a $k = 0, 1, \dots, 8$:

$$x_k = a + k \cdot h = \frac{\pi}{2} + k \cdot 0.19634954, \quad f_k = f(x_k) = \frac{\sin x_k}{x_k},$$

que donen lloc a la taula de valors següent:

k	x_k	f_k
0	1.57079633	0.63661977
1	1.76714587	0.55501094
2	1.96349541	0.47052798
3	2.15984495	0.38496727
4	2.35619449	0.30010544
5	2.55254403	0.21765354
6	2.74889357	0.13921362
7	2.94524311	0.06623912
8	3.14159265	0.00000000

Apliquem la fórmula de trapezis composta:

$$T_N(f) = \frac{h}{2} (f_0 + 2 f_1 + 2 f_2 + \dots + 2 f_{N-1} + f_N)$$

que, en el nostre cas, proporciona

$$T_8(f) = \frac{0.19634954}{2} (f_0 + 2 f_1 + 2 f_2 + \dots + 2 f_7 + f_8) = 0.48145453.$$

19.— Novament considerem

$$\int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx$$

amb $a = \pi/2$ i $b = \pi$. Si apliquem la fórmula de Simpson composta tenim, per $N = 4$ subinterval,ls,

$$h = \frac{b-a}{2N} = \frac{\pi - \pi/2}{8} = 0.19634954.$$

Aleshores, considerem, per a $k = 0, 1, \dots, 8$:

$$x_k = a + k \cdot h = \frac{\pi}{2} + k \cdot 0.19634954, \quad f_k = f(x_k) = \frac{\sin x_k}{x_k},$$

que defineixen la taula de valors següent:

k	x_k	f_k
0	1.57079633	0.63661977
1	1.76714587	0.55501094
2	1.96349541	0.47052798
3	2.15984495	0.38496727
4	2.35619449	0.30010544
5	2.55254403	0.21765354
6	2.74889357	0.13921362
7	2.94524311	0.06623912
8	3.14159265	0.00000000

En aquest cas, la fórmula de Simpson s'escriu

$$S_4(f) = \frac{h}{3} (f_0 + 4 f_1 + 2 f_2 + 4 f_3 + 2 f_4 + 4 f_5 + 2 f_6 + 4 f_7 + f_8),$$

i proporciona l'aproximació $S_4(f) = 0.48117401$. Podeu comprovar aquest resultat amb la Wiris i obtindreu

$$\int_{\pi/2}^{\pi} \frac{\sin x}{x} \rightarrow 0.4811748836,$$

si seleccioneu prèviament l'opció **precisió(10)** (vegeu la figura 28). Observeu

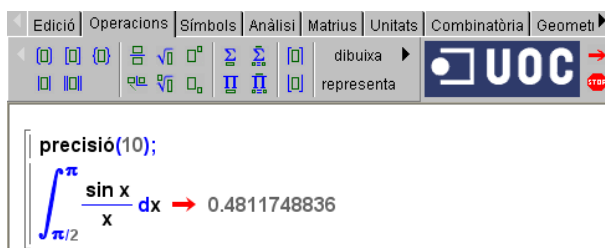


Figura 28: Integració numèrica amb Wiris

la millora en l'aproximació respecte a la que hem obtingut en l'activitat anterior, on es va aplicar la fórmula de trapezis composta.

Exercicis d'autoavaluació

1. – Tenim (al menys) un zero de la funció $f(x) = -3 + x^3 \sin(x) + x$ en l'interval $[0, 2]$. En efecte, si apliquem el teorema de Bolzano: f és una funció contínua en tota la recta real i presenta un canvi de signe en els extrems de l'interval, ja que $f(0) = -3 < 0$ i $f(2) = 6.2744 \dots > 0$. El nombre d'iteracions és donat per la fórmula (1.2), amb $\varepsilon = 10^{-4}$, $a = 0$ i $b = 2$:

$$N = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right)}{\ln 2} \right\rceil + 1 = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{2-0}{10^{-4}}\right)}{\ln 2} \right\rceil + 1 = 15.$$

Aleshores, tenim

1	[1.00000000, 2.00000000]	1.000000
2	[1.00000000, 1.50000000]	$5.000000 \cdot 10^{-1}$
3	[1.00000000, 1.25000000]	$2.500000 \cdot 10^{-1}$
4	[1.12500000, 1.25000000]	$1.250000 \cdot 10^{-1}$
5	[1.18750000, 1.25000000]	$6.250000 \cdot 10^{-2}$
6	[1.21875000, 1.25000000]	$3.125000 \cdot 10^{-2}$
7	[1.21875000, 1.23437500]	$1.562500 \cdot 10^{-2}$
8	[1.22656250, 1.23437500]	$7.812500 \cdot 10^{-3}$
9	[1.23046875, 1.23437500]	$3.906250 \cdot 10^{-3}$
10	[1.23242188, 1.23437500]	$1.953125 \cdot 10^{-3}$
11	[1.23242188, 1.23339844]	$9.765625 \cdot 10^{-4}$
12	[1.23242188, 1.23291016]	$4.882813 \cdot 10^{-4}$
13	[1.23266602, 1.23291016]	$2.441406 \cdot 10^{-4}$
14	[1.23266602, 1.23278809]	$1.220703 \cdot 10^{-4}$
15	[1.23272705, 1.23278809]	$6.103516 \cdot 10^{-5}$

que proporciona el punt mitjà de l'últim interval, 1.23275757, com a aproximació del zero buscat.

2. – En aquest cas, si prenem com a valor inicial $x_0 = 2$ i apliquem la recurrència

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k + \frac{-3 + x_k^3 \sin(x_k) + x_k}{3x_k^2 \sin x_k + x_k^3 \cos x_k + 1},$$

obtenim la taula d'iterats següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	2.0000000000000000	
1	1.2689243699851374	$7.31076 \cdot 10^{-1}$
2	1.2335973346606131	$3.53270 \cdot 10^{-2}$
3	1.2327333842164889	$8.63950 \cdot 10^{-4}$
4	1.2327328653099767	$5.18907 \cdot 10^{-7}$
5	1.2327328653097895	$1.87184 \cdot 10^{-13}$

Per tant, s'obté com a valor aproximat 1.2327328653097895 amb unes 12 xifres decimals correctes.

3.— En aquest cas prenem com a valors inicials $x_0 = 0$ i $x_1 = 2$. L'algorisme és

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k \geq 1$$

amb $f(x) = -3 + x^3 \sin(x) + x$. D'aquesta manera s'obté la taula d'aproximacions següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	0.0000000000000000	
1	2.0000000000000000	
2	0.6469435561964498	1.35306
3	0.9970038797971186	$3.50060 \cdot 10^{-1}$
4	1.3990997050246325	$4.02096 \cdot 10^{-1}$
5	1.2045341553104323	$1.94566 \cdot 10^{-1}$
6	1.2297903638027441	$2.52562 \cdot 10^{-2}$
7	1.2327918460709746	$3.00148 \cdot 10^{-3}$
8	1.2327327444031269	$5.91017 \cdot 10^{-5}$
9	1.2327328653048319	$1.20902 \cdot 10^{-7}$
10	1.2327328653097895	$4.95759 \cdot 10^{-12}$

que proporciona 1.2327328653097895 com a aproximació del zero buscat amb una precisió de $\frac{1}{2} \cdot 10^{-11}$.

4.— Iniciant el procés a partir de $x_0 = 0$ i $x_1 = 2$ obtenim la seqüència

d'aproximacions següent:

k	x_k	$ x_k - x_{k-1} $
0	0.0000000000000000	
1	2.0000000000000000	
1	0.6469435561964498	1.35306
2	0.9970038797971186	$3.50060 \cdot 10^{-1}$
3	1.1547168474308966	$1.57713 \cdot 10^{-1}$
4	1.2097537364185080	$5.50369 \cdot 10^{-2}$
5	1.2262671646840739	$1.65134 \cdot 10^{-2}$
6	1.2309394356484356	$4.67227 \cdot 10^{-3}$
7	1.2322374459806820	$1.29801 \cdot 10^{-3}$
8	1.2325961663425768	$3.58720 \cdot 10^{-4}$
9	1.2326951584624724	$9.89921 \cdot 10^{-5}$
10	1.2327224652146420	$2.73068 \cdot 10^{-5}$
11	1.2327299968818266	$7.53167 \cdot 10^{-6}$
12	1.2327320741800711	$2.07730 \cdot 10^{-6}$
13	1.2327326471118452	$5.72932 \cdot 10^{-7}$
14	1.2327328051296220	$1.58018 \cdot 10^{-7}$
15	1.2327328487117777	$4.35822 \cdot 10^{-8}$

que proporciona 1.2327328487117777 com a aproximació, amb un error inferior a 10^{-7} .

5. – Calculem els polinomis de Lagrange associats:

$$L_0(x) = \frac{(x - 0.8)(x - 1.3)(x - 1.9)}{(0.2 - 0.8)(0.2 - 1.3)(0.2 - 1.9)} = -0.8913x^3 + 3.656x^2 - 4.483x + 1.761$$

$$L_1(x) = \frac{(x - 0.2)(x - 1.3)(x - 1.9)}{(0.8 - 0.2)(0.8 - 1.3)(0.8 - 1.9)} = 3.03x^3 - 10.3x^2 + 9.424x - 1.497$$

$$L_2(x) = \frac{(x - 0.2)(x - 0.8)(x - 1.9)}{(1.3 - 0.2)(1.3 - 0.8)(1.3 - 1.9)} = -3.03x^3 + 8.788x^2 - 6.242x + 0.9212$$

$$L_3(x) = \frac{(x - 0.2)(x - 0.8)(x - 1.3)}{(1.9 - 0.2)(1.9 - 0.8)(1.9 - 1.3)} = 0.8913x^3 - 2.05x^2 + 1.301x - 0.1854.$$

Aleshores, el polinomi interpolador $p_3(x)$ s'obté amb la fórmula

$$p_3(x) = f_0L_0 + f_1L_1 + f_2L_2 + f_3L_3 = 3L_0 + 2.2L_1 + 1.7L_2 + 2.1L_3 = 0.713x^3 - 1.337x^2 - 0.5954x + 3.167.$$

Si volem ara avaluar $p_3(1)$ apliquem la regla de Horner -segons la seva versió Ruffini-:

$$\begin{array}{r}
 0.713 \quad -1.337 \quad -0.5954 \quad 3.167 \\
 1 \quad \downarrow \quad 0.713 \quad -0.624 \quad -1.2194 \\
 \hline
 0.713 \quad -0.624 \quad -1.2194 \quad \boxed{1.9476}
 \end{array}$$

Per tant, $p_3(1) = 1.9476$.

6. – L'esquema triangular de Newton és, en aquest cas, el següent:

$$\begin{array}{c|ccc}
 -0.5 & 2 & & \\
 & & 0.4 & \\
 2 & 3 & -1.25714 & \\
 & & -4 & 1.48095 \\
 3 & -1 & 4.66667 & \\
 & & 3 & \\
 3.5 & 0.5 & &
 \end{array}$$

i proporciona el polinomi interpolador

$$p_3(x) = 2 + 0.4(x+0.5) - 1.25714(x+0.5)(x-2) + 1.48095(x+0.5)(x-2)(x-3).$$

Recordeu que per a avaluar-lo és millor escriure'l de la forma

$$p_3(x) = 2 + (x + 0.5) (0.4 + (x - 2) (-1.25714 + 1.48095(x - 3))),$$

i així obtenim

$$p_3(1) = 2 + (1+0.5) (0.4 + (1 - 2) (-1.25714 + 1.48095(1 - 3))) = 8.92857.$$

Si ara afegim $(x_4, f_4) = (0, 1.2)$ l'esquema anterior es modifica de la següent manera (aprofitant, però, els càlculs anteriors):

$$\begin{array}{c|cccc}
 -0.5 & 2 & & & \\
 & & 0.4 & & \\
 2 & 3 & -1.25714 & & \\
 & & -4 & 1.48095 & \\
 3 & -1 & 4.66667 & & \mathbf{0.6381} \\
 & & 3 & \mathbf{1.8} & \\
 3.5 & 0.5 & \mathbf{1.0667} & & \\
 & & \mathbf{-0.2} & & \\
 0 & 1.2 & & &
 \end{array}$$

El polinomi interpolador és ara

$$\begin{aligned}
 p_4(x) = & 2 + 0.4(x+0.5) - 1.25714(x+0.5)(x-2) + \\
 & 1.48095(x+0.5)(x-2)(x-3) + 0.6381(x+0.5)(x-2)(x-3)x,
 \end{aligned}$$

és a dir,

$$p_4(x) = p_3(x) + 0.6381(x+0.5)(x-2)(x-3)x.$$

7. – Fixeu-vos que la funció $f(x)$ és creixent en les abscisses donades, de manera que podem suposar que en aquest interval $f(x)$ és invertible. Sigui g la funció inversa de f en aquest interval: $y = f(x) \Leftrightarrow x = g(y)$. Per tant, buscar α que compleixi $f(\alpha) = 9$ és equivalent a trobar $\alpha = g(9)$. Atès que no coneixem $g(y)$ el que fem és aproximar-la pel polinomi $q_3(y)$, que interpola la taula:

y_k	2.527	3.879	6.452	10.346
g_k	-0.5	0.1	1	2.5

obtinguda a l'invertir la taula inicial. L'esquema triangular de Newton és

2.527	-0.5			
		0.4438		
3.879	0.1		-0.0240	
		0.3498		0.0038
6.452	1		0.0055	
		0.3852		
10.346	2.5			

i el polinomi interpolador associat:

$$\begin{aligned} q_3(y) = & -0.5 + 0.4438(y - 2.527) - \\ & 0.0240(y - 2.527)(y - 3.879) + \\ & 0.0038(y - 2.527)(y - 3.879)(y - 6.452). \end{aligned}$$

Per a avaluar $q_3(y)$ en el punt $y = 9$ l'escrivim de la forma

$$\begin{aligned} q_3(y) = & -0.5 + (y - 2.527) (0.4438 + \\ & (y - 3.879) (-0.0240 + 0.0038(y - 6.452))) . \end{aligned}$$

Aleshores, $\alpha = g(9) \simeq q_3(9)$ on

$$\begin{aligned} q_3(9) = & -0.5 + (9 - 2.527) (0.4438 + \\ & (9 - 3.879) (-0.0240 + 0.0038(9 - 6.452))) = 1.8981. \end{aligned}$$

És a dir, $f(1.8981) \simeq 9$.

8. – Considereu la taula de valors següent:

x_k	2	3	4
f_k	7.325	8.975	6.018
f'_k	2.234	-0.453	1.018

Aleshores, l'esquema de diferències generalitzades és:

2	7.325				
		2.234			
2	7.325		-0.584		
		1.65		-1.519	
3	8.975		-2.103		0.659
		-0.453		-0.2005	1.340
3	8.975		-2.504		3.340
		-2.957		6.479	
4	6.018		3.975		
		1.018			
4	6.018				

i proporciona el polinomi d'Hermite

$$H_5(x) = 7.325 + 2.234(x-2) - 0.584(x-2)^2 - 1.519(x-2)^2(x-3) + 0.6593(x-2)^2(x-3)^2 + 1.340(x-2)^2(x-3)^2(x-4).$$

9. – Fem servir la regla dels trapezis composta per a aproximar el valor de la integral

$$\int_3^4 \left(\sqrt{x^3 + 1} \right) \ln x \, dx$$

amb $N = 4, 8$ i 16 subintervalls. Sabem que $a = 3$ i $b = 4$. En el primer cas tenim

$$h = \frac{4-3}{4} = 0.25$$

que dóna lloc a $x_k = a + k \cdot h = 3 + k \cdot 0.25$, per a $k = 0, 1, \dots, 4$ i $f_k = f(x_k) = \left(\sqrt{x_k^3 + 1} \right) \ln x_k$, i a la taula

k	x_k	f_k
0	3.00000000	5.81330981
1	3.25000000	7.00562676
2	3.50000000	8.29807722
3	3.75000000	9.68896392
4	4.00000000	11.17666245

La fórmula de trapezis proporciona, per a $N = 4$ subintervalls, l'aproximació $T_4(f) = 8.37191351$.

Anàlogament per a $N = 8$ tenim: $h = 1/8 = 0.125$ i de la taula

k	x_k	f_k
0	3.00000000	5.81330981
1	3.12500000	6.39684314
2	3.25000000	7.00562676
3	3.37500000	7.63944292
4	3.50000000	8.29807722
5	3.62500000	8.98131942
6	3.75000000	9.68896392
7	3.87500000	10.42081012
8	4.00000000	11.17666245

obtenim $T_8(f) = 8.36575870$.

De manera similar, per a $N = 16$ subintervals: $h = 1/16 = 0.0625$ i de la taula

k	x_k	f_k
0	3.00000000	5.81330981
1	3.06250000	6.10190648
2	3.12500000	6.39684314
3	3.18750000	6.69809234
4	3.25000000	7.00562676
5	3.31250000	7.31941926
6	3.37500000	7.63944292
7	3.43750000	7.96567105
8	3.50000000	8.29807722
9	3.56250000	8.63663529
10	3.62500000	8.98131942
11	3.68750000	9.33210404
12	3.75000000	9.68896392
13	3.81250000	10.05187415
14	3.87500000	10.42081012
15	3.93750000	10.79574754
16	4.00000000	11.17666245

s'obté $T_{16}(f) = 8.36421999$. Si demanem la wiris que faci aquest càlcul obtenim 8.363707079 (vegeu la figura 29).

10.— En aquest cas tenim

$$a = 0, \quad b = 1, \quad N = 5$$

i, per tant, $h = \frac{1-0}{2 \cdot 5} = 0.1$. Aleshores, les abscisses i les imatges que

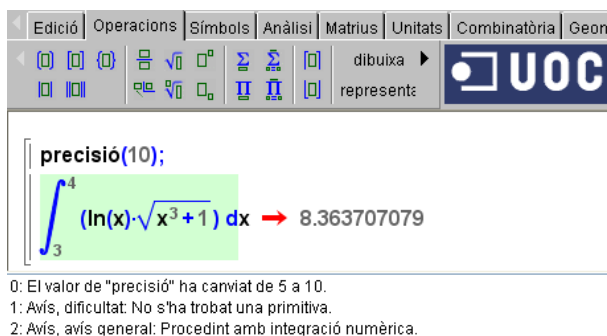


Figura 29: Integració numèrica amb la Wiris

hem de considerar són les següents:

$$x_k = a + k \cdot h = k \cdot 0.1, \quad f_k = f(x_k) = x_k^2 e^{x_k^2},$$

que corresponen a la taula següent:

k	x_k	f_k
0	0.00000000	0.00000000
1	0.10000000	0.01010050
2	0.20000000	0.04163243
3	0.30000000	0.09847569
4	0.40000000	0.18776174
5	0.50000000	0.32100635
6	0.60000000	0.51599859
7	0.70000000	0.79983495
8	0.80000000	1.21374776
9	0.90000000	1.82080547
10	1.00000000	2.71828183

Obtenim:

$$S_5(f) = \frac{0.1}{3} (f_0 + 4 f_1 + 2 f_2 + \dots + 2 f_8 + 4 f_9 + f_{10}) = 0.62791516.$$

Recordeu que l'error comés en aplicar la fórmula composta de Simpson és del tipus $O(h^4)$. Atès que $h = 0.1$, en el nostre cas aquest error és del tipus 10^{-4} , de manera que podem dir que $S_5(f)$ té entre 3 i 4 xifres decimals correctes, aproximadament.

Glossari

abscissa (d'interpolació) *f* Primera component o abscissa de cada un dels punts dels quals busquem el polinomi interpolador.

algorisme numèric *m* Procediment de càlcul que consisteix a acomplir un seguit ordenat i finit d'instruccions que condueix, un cop especificades les dades, a una solució aproximada del problema.

fenomen de Runge *m* Gran divergència en els extrems de l'interval d'interpolació entre una funció i el polinomi interpolador quan aquest té grau alt (més gran o igual a 9, aproximadament).

interpolació d'Hermite *f* Problema en què es busca un polinomi que interpoli la funció i algunes de les seves derivades en un conjunt donat de punts.

mètode de la bisecció *m* Mètode per trobar un zero d'una funció consistent a situar-lo en un interval de longitud cada cop la meitat de la longitud de l'interval precedent.

mètode de Lagrange *m* Mètode, d'interès teòric però poc eficient numèricament, per a obtenir el polinomi interpolador d'un conjunt de punts.

mètode de la secant *m* Mètode similar al de Newton en el qual l'aproximació de la funció es realitza per mitjà de la recta secant.

mètode de Newton (interpolació de funcions) *m* Mètode més habitual i eficient de càlcul del polinomi interpolador, basat en un desenvolupament de la fórmula de Taylor, aplicat hàbilment al problema que ens interessa.

mètode de Newton (zeros de funcions) *m* Mètode que proporciona una successió d'iterats obtinguts en aproximar la funció en un punt per la seva recta tangent. També conegut com a mètode de Newton-Raphson.

mètode de regula falsi *m* Variant del mètode de la secant en el qual en cada iteració, obtinguda aproximant la funció per la recta secant, se selecciona l'interval que mostra un canvi de signe de la funció.

polinomi interpolador d'un conjunt de punts *m* Polinomi, la gràfica del qual passa pels punts donats.

regla de Horner *f* Algorisme, basat en la regla de Ruffini, que permet avaluar un polinomi en un punt amb el mínim nombre d'operacions.

regla de Simpson *f* Mètode de càlcul aproximat d'una integral a partir de la interpolació de grau 2.

regla dels trapezis *f* Mètode anàleg a l'anterior, però que interpola la funció amb un polinomi de grau 1.

zero d'una funció *m* Valor de la variable que dóna com a resultat zero si hi avaluem la funció donada.

Bibliografia

Aubanell, A.; Benseny, A.; Delshams, A. (1993). *Útiles básicos de Cálculo Numérico*. Barcelona: Labor.

Bonet, C. i altres (1994). *Càlcul Numèric*. Barcelona: Edicions UPC (“Aula Teòrica”).

Conte, S.D.; Boor, de C. (1972). *Análisis Numérico*. Mèxic: McGraw-Hill.

Dalquist, G.; Björck, A. (1974). *Numerical Methods*. Nova Jersey: Prentice Hall.

Henrici, P. (1968). *Elementos de Análisis Numérico*. Mèxic: Trillas.

Stoer, J.; Bulirsch, R. (2002). *Introduction to Numerical Analysis (3a. ed.)*. Nova York / Berlín / Heidelberg: Springer.