Informàtica Aplicada a la Química

Josep Planelles

Sèrie de Taylor: aproximació d'una funció per un polinomi

Volem determinar els valors $a, b, c, \ldots$ que permeta escriure:

$$f(x) = a + b\,(x - x_0) + c\,\frac{(x - x_0)^2}{2!} + d\,\frac{(x - x_0)^3}{3!} + \ldots \tag{1}$$

Amb aquesta finalitat calculem $f(x_0)$:

$$f(x_0) = a + b\,(x_0 - x_0) + c\,\frac{(x_0 - x_0)^2}{2!} + d\,\frac{(x_0 - x_0)^3}{3!} + \ldots = a \tag{2}$$

Amb la qual cosa concloem que $a = f(x_0)$.

Derivem ara $f(x)$:

$$f'(x) = b + c\,(x - x_0) + d\,\frac{(x - x_0)^2}{2!} + \ldots \tag{3}$$

Calculem $f'(x_0)$:

$$f'(x_0) = b + c\,(x_0 - x_0) + d\,\frac{(x_0 - x_0)^2}{2!} + \ldots = b \tag{4}$$

Amb la qual cosa concloem que $b = f'(x_0)$.

Derivem ara $f'(x)$:

$$f"(x) = c + d(x - x_0) + e\,\frac{(x - x_0)^2}{2!} \ldots \tag{5}$$

Calculem $f"(x_0)$:

$$f"(x_0) = c + d(x_0 - x_0) + e\,\frac{(x_0 - x_0)^2}{2!} \ldots = c \tag{6}$$

Amb la qual cosa concloem que $c = f"(x_0)$.

Derivem ...

Calculem ...

... amb la qual cosa arribem a la sèrie (infinita) de Taylor:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\,(x - x_0) + f"(x_0)\,\frac{(x - x_0)^2}{2!} + f'''(x_0)\,\frac{(x - x_0)^3}{3!} + \ldots \tag{7}$$

Sèrie de Taylor truncada: error de truncació

Escrivim la sèrie de Taylor truncada en la segona derivada:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\ (x - x_0) + f"(x_0)\ \frac{(x - x_0)^2}{2!} + R(x) \tag{8}$$

on $R(x)$ representa l'error de truncació en segones derivades. Quan val $R(x)$? De la expressió anterior resulta obvi que:

$$\begin{aligned} R(x) &= f(x) - f(x_0) - f'(x_0)\ (x - x_0) - f"(x_0)\ \frac{(x - x_0)^2}{2!} && (9)\\ &= \int_{x_0}^{x} \left[\int_{x_0}^{x} \left(\int_{x_0}^{x} f'''(x) dx \right) dx \right] dx && (10) \end{aligned}$$

En efecte,

$$\begin{aligned} &\textstyle\int_{x_0}^{x} \left[\int_{x_0}^{x} \left(\int_{x_0}^{x} f'''(x) dx \right) dx \right] dx \\ &= \textstyle\int_{x_0}^{x} \left[\int_{x_0}^{x} \left(f"(x) - f"(x_0) \right) dx \right] dx \\ &= \textstyle\int_{x_0}^{x} \left[f'(x) - f'(x_0) - f"(x_0)(x - x_0) \right] dx \\ &= f(x) - f(x_0) - f'(x_0)(x - x_0) - f"(x_0)\frac{(x-x_0)^2}{2} \end{aligned} \tag{11}$$

Ara be, és obvi també que exiteix un valor ξ, $x_0 < \xi < x$, tal que l'àrea sota una funció en l'interval (x_0, x), $\int_{x_0}^{x} f(x) dx$, siga la mateixa que la del rectangle de base $(x - x_0)$ i alçada $f(\xi)$, i.e.,

$$\int_{x_0}^{x} f(x) dx = f(\xi)(x - x_0)\ ;\ x_0 < \xi < x \tag{12}$$

Aleshores,

$$\int_{x_0}^{x} \left[\int_{x_0}^{x} \left(\int_{x_0}^{x} f'''(x) dx \right) dx \right] dx = \int_{x_0}^{x} \left[\int_{x_0}^{x} f'''(\xi)(x - x_0) dx \right] dx = f'''(\xi) \frac{(x - x_0)^3}{3!} \tag{13}$$

Amb la qual cosa,

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)\ (x - x_0) + f"(x_0)\ \frac{(x - x_0)^2}{2!} + f'''(\xi)\ \frac{(x - x_0)^3}{3!}\ ,\ \ (x_0 < \xi < x) \tag{14}$$

En general,

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f^{(i)}(x_0)\ \frac{(x - x_0)^i}{i!} + f^{(n+1)}(\xi)\ \frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n + 1)!}\ ,\ \ (x_0 < \xi < x). \tag{15}$$