Interpolació

Introducció

El problema d'interpolació correspon a un cas d'aproximació de funcions. Interpolar una funció f en un conjunt de punts (x_k, y_k), $k = 0, ..., n$ (amb $x_k \neq x_i$, $k \neq i$) és trobar una altra funció f^* de manera que sobre aquests punts la nova funció prengui el mateix valor que la funció original:

$$f^*(x_k) = y_k, \quad k = 0, ..., n.$$

Def. Donats $n+1$ punts (x_k, f_k), $k = 0, ..., n$, amb $x_k \neq x_i$ si $k \neq i$, anomenem interpolació polinómica a la determinació d'un polinomi $p(x)$ tq $p(x_k) = f_k$, $k = 0, ..., n$.

Th. (Existència i unicitat). $\exists!$ polinomi $p_n(x)$ de grau $\leq n$ tq interpola; i.e., $p_n(x_i) = f_i$, $i = 0, ..., n$.

Def. L'anomenem el polinomi interpolador de f en $x_0, ..., x_n$.

Obs. Denotarem $f \in \mathscr{C}^k(a,b)$ o bé $f \in \mathscr{C}^k([a,b])$ si $f \in \mathscr{C}^k(I)$, $[a,b] \subset I$, I interval obert.

Th. (Fórmula de l'error). Siguin $f \in \mathscr{C}^{n+1}(a,b)$, $x_k \in (a,b)$ $\forall k = 0, ..., n$ i $p_n(x)$ el polinomi interpolador. Llavors:

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_0) \cdot ... \cdot (x - x_n),$$

$\xi(x) \in \langle x_0, ..., x_n, x \rangle := (\min\{x_0, ..., x_n, x\}, \max\{x_0, ..., x_n, x\})$.

Mètodes de càlcul del polinomi interpolador

1. Mètode de Lagrange:

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k \ell_k(x), \quad \text{on } \ell_k(x) = \frac{\prod_{i\neq k}(x - x_i)}{\prod_{i \neq k}(x_k - x_i)}$$

s'anomenen polinomis de Lagrange i tenen grau n. Es compleix $\ell_k(x_j) = \delta_{kj}$, de manera que $p_n(x_j) = f_j$.

2. Mètode de Newton (diferències dividides):

Def. Definim les diferències dividides per

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

per $j = 0, ..., n-1$, $i = 0, ..., n-j$.

Prop. El polinomi

$$p_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, ..., x_k](x - x_0) \cdot ... \cdot (x - x_{k-1})$$

interpola (x_k, f_k).

Obs. (Veure esquema de càlcul).

Obs. Si afegim un punt més, podem aprofitar els càlculs previs (cosa que no es pot fer al mètode de Lagrange).

Obs. El coeficient de x^n és $f[x_0, ..., x_n]$.

Prop. Es satisfà $\forall \sigma \in S_k$ que $f[x_0, ..., x_k] = f[x_{\sigma(0)}, ..., x_{\sigma(k)}]$.

Cas particular: abscisses equiespaiades

Donat h, tenim $x_k = x_0 + kh$, $k = 0, ..., n$.

Def. Definim l'operador diferència ordinària Δ per

$$\Delta^0 f(x) = f(x), \quad \Delta f(x) = f(x+h) - f(x),$$
$$\Delta^k f(x) = \Delta(\Delta^{k-1} f(x)), \quad k = 2, ..., n$$

Obs. $\Delta^2 f(x) = \Delta(\Delta f(x)) = ... = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)$.

Prop. Es satisfà la relació

$$f[x_0, ..., x_k] = \frac{1}{k! h^k} \Delta^k f(x_0)$$

Obs. Així, en el cas d'abscisses equiespaiades, el polinomi donat pel mètode de Newton es pot escriure

$$p_n(x) = \Delta^0 f(x_0) + \sum_{k=1}^{n} \frac{\Delta^k f(x_0)}{k! h^k}(x - x_0) \cdot ... \cdot (x - x_{k-1})$$

Obs. (Veure esquema de càlcul).

Interpolació inversa

Donats $(x_k, f(x_k)) = (x_k, f_k)$, $k = 0, ..., n$, volem resoldre l'equació $f(x) = c$. Per tal de tenir (una aproximació de) el punt solució x, podem fer-ho de dues maneres:

1. Trobar el polinomi interpolador $p_n(x)$ i resoldre l'equació polinòmica $p_n(x) = c$.

2. Suposar que f és invertible i calcular $x = g(c)$ amb $g = f^{-1}$ mitjançant interpolació inversa:
   Prenem $(y_i, g_i) = (f_i, x_i)$, $i = 0, ..., n$, i calculem el polinomi interpolador $q_n(x)$ que aproxima g. Aleshores, $x_{\text{aprox}} = q_n(c)$.

Abscisses de Txebishev

Idea: escollir abscisses adequades per interpolar millor (amb menys error). Reduïm l'estudi a l'interval $[-1,1]$.

Obs. $x := \frac{b-a}{2} y + \frac{a+b}{2} \in [a,b] \iff y \in [-1,1]$.

Th. (I). La millor elecció dels punts $y_0, ..., y_n$ a $[-1,1]$ de manera que el

$$\max_{y \in [-1,1]} |y - y_0| \cdot ... \cdot |y - y_n|$$

sigui mínim, vé donada per les arrels dels polinomis de Txebishev de grau $n+1$ i aquest màxim val $1/2^n$.

Def. Definim el polinomi de Txebishev de grau n com

$$T_n(x) = \cos[n \arccos(x)]$$

Prop. Es compleix:

i. $T_0(x) = 1$, $\quad T_1(x) = x$. $\quad T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$.

ii. El coeficient de x^n a $T_n(x)$ és 2^{n-1}.

iii. $T_n(x)$, $n \geq 1$, té n zeros en $[-1,1]$ de la forma

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{n} \cdot \frac{\pi}{2}\right), \quad k = 0, ..., n-1.$$

iv. $T_n(x)$ té $n+1$ extrems en $[-1,1]$ de la forma

$$x_k = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right), \quad k = 0, ..., n.$$

on $T_n(x_k) = (-1)^k$.

Th. (II). Considerem tots els polinomis mònics

$$p_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} a_i x^i, \quad (a_{n+1} = 1)$$

i sigui $m := \max_{x \in [-1,1]} |p_{n+1}(x)|$. Llavors, $T_{n+1}(x)/2^n$ és un polinomi mònic de grau $n+1$ que fa mínim el valor de m. A més, es té:

$$\min_{p_{n+1}(x)} m = \frac{1}{2^n} \quad \left(= \max_{x \in [-1,1]} \frac{T_{n+1}(x)}{2^n} \right).$$

Obs. El teorema I equival al teorema II. Només cal prendre

$$\frac{T_{n+1}(y)}{2^n} = (y - y_0) \cdot ... \cdot (y - y_n)$$

amb $y_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\right)$, $\quad k = 0, ..., n$.

Obs. En resum, els $y_0, ..., y_n$ adequats en $[-1,1]$ són

$$y_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\right), \quad k = 0, ..., n, \quad y_k \in [-1,1].$$

Els corresponents $x_0, ..., x_n$ en $[a,b]$ són

$$x_k = \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{2k+1}{2(n+1)}\pi\right) + \frac{a+b}{2}, \quad k = 0, ..., n, \quad x_k \in [a,b].$$

Prop. (Fórmula de l'error). L'error quan interpolem $f(x)$ per $p_n(x)$ prenent les abscisses de Txebishev en $[a,b]$ és (està acotat per)

$$\max_{x\in[a,b]}|f(x)-p_n(x)|\leq\frac{(b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}}\cdot\frac{\max_{x\in[a,b]}|f^{(n+1)}(x)|}{(n+1)!}$$

Interpolació d'Hermite

Th. Donats (x_k,f_k) i (x_k,f_k'), $k=0,...,m$, $\exists!$ polinomi $H_{2m+1}(x)$ tq coincideix amb f i $H_{2m+1}'(x)$ coincideix amb f' en aquests punts. S'anomena polinomi d'Hermite i s'expressa

$$H_{2m+1}(x)=\sum_{i=0}^{m}f_i\phi_i(x)+\sum_{i=0}^{m}f_i'\psi_i(x)$$

amb

$$\begin{cases}\phi_i(x)=[1-2\ell_i'(x_i)(x-x_i)]\ell_i^2(x)\\ \psi_i(x)=(x-x_i)\ell_i^2(x)\end{cases}$$

on $\ell_i(x)$ és el polinomi de Lagrange.

Prop. (Fórmula de l'error). Suposem que $f\in\mathscr{C}^{2m+2}(I)$ tq $x_k\in I$, $k=0,...,m$. Llavors, $\forall x\in I$ es té

$$f(x)-H_{2m+1}(x)=\frac{f^{(2m+2)}(\xi(x))}{(2m+2)!}(x-x_0)^2\cdot...\cdot(x-x_m)^2$$

on $\xi(x)\in\langle x_0,...,x_m,x\rangle$.

Obs. A la pràctica, calcularem el polinomi d'Hermite amb el mètode de les diferències dividides generalitzades. És a dir, considerant

$$f[x_i,x_i]=\lim_{x\to x_i}f[x_i,x]=\lim_{x\to x_i}\frac{f(x)-f(x_i)}{x-x_i}=f'(x_i).$$

Obs. (Veure esquema de càlcul de $f[x_0,x_0,x_1,x_1,...,x_i]$).

Prop. Es pot veure que

$$\begin{aligned}H_{2m+1}(x)=f_0+f[x_0,x_0](x-x_0)+f[x_0,x_0,x_1](x-x_0)^2+\\+f[x_0,x_0,x_1,x_1](x-x_0)^2(x-x_1)+...\\+f[x_0,x_0,...,x_m,x_m](x-x_0)^2\cdot...\cdot(x-x_{m-1})^2(x-x_m).\end{aligned}$$

Fenomen de Runge

Si prenem una xarxa equiespaiada de punts, no és cert que com més gran sigui el nombre de punts (i per tant major el grau del polinomi), millor sigui l'aproximació que tindrem de la funció amb el polinomi interpolador. La discrepància que s'observa als extrems de l'interval es coneix com *fenomen de Runge*.

Interpolació de Splines

Def. Siguin $x_0<x_1<...<x_n$ un conjunt de punts ordenats i $f_0,...,f_n$ els corresponents valors d'una funció f.

Una funció spline de grau p que interpola f en els nodes $x_i=0,...,n$ és una funció $s(x)$ amb les següents propietats:

a) $s(x_i)=f_i,\quad i=0,...,n.$

b) A cada subinterval $[x_i,x_{i+1}]$, $i=0,...,n-1$, $s(x)$ és un polinomi de grau p.

c) $s(x)\in\mathscr{C}^{p-1}([x_0,x_n])$.

Obs. A la pràctica, els més utilitzats són els splines cúbics naturals. És a dir, aquells tq $s''(x_0)=s''(x_n)=0$.

Prop. Donats $x_0<...<x_n$ amb els corresponents valors $f_0,...,f_n$ d'una funció f, podem construir un spline cúbic $s(x)\in\mathscr{C}^2$ donat per $s_i(x)$ a cada interval $[x_i,x_{i+1}]$, $i=0,...,n-1$, de la manera següent:

$$s_i(x)=M_i\frac{(x-x_i)^2}{2}+\frac{M_{i+1}-M_i}{h_i}\frac{(x-x_i)^3}{6}+B_i(x-x_i)+f_i$$

on $h_i:=x_{i+1}-x_i$ i $M_i:=s_i''(x_i)$. Els B_i vénen donats per

$$B_i=\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}-(M_{i+1}-M_i)\frac{h_i}{6}-\frac{M_ih_i}{2},\quad i=0,...,n-1$$

on els M_i s'obtenen de la recurrència

$$\begin{cases}h_iM_i+2(h_i+h_{i+1})M_{i+1}+h_{i+1}M_{i+2}=d_{i+1}\\ \quad\text{amb } d_{i+1}=6\left(\frac{f_{i+2}-f_{i+1}}{h_{i+1}}-\frac{f_{i+1}-f_i}{h_i}\right),\quad i=0,...,n-2\\ M_0=M_n=0\end{cases}$$

Obs. (Veure esquema de càlcul). La recurrència pels M_i pot escriure's matricialment com

$$T\begin{pmatrix}M_1\\ \vdots\\ M_{n-1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}d_1\\ \vdots\\ d_{n-1}\end{pmatrix}$$

on

$$T=\begin{pmatrix}2(h_0+h_1)&h_1&&&\\ h_1&2(h_1+h_2)&h_2&&\\ &h_2&\ddots&\ddots&\\ &&\ddots&&h_{n-2}\\ &&&h_{n-2}&2(h_{n-2}-h_{n-1})\end{pmatrix}$$

Interpolació trigonomètrica

Volem aproximar una funció $2\pi-$periòdica $f:[0,2\pi]\to\mathbb{R}$, $f(0)=f(2\pi)$, per un polinomi trigonomètric $\hat{f}$ que interpoli f en $n+1$ nodes *equiespaiats*: $x_j=\frac{2\pi}{n+1}j,\quad j=0,...,n.$

$$\hat{f}(x_j)=f(x_j),\quad j=0,...,n$$

on prenem $\hat{f}$ com una combinació lineal de sinus i cosinus.

Lema. Es satisfà que

$$\sum_{j=0}^{n}e^{ijh(k-m)}=(n+1)\delta_{km}.$$

Prop. Distingim casos:

a) Si n és parell: prenem

$$\hat{f}(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{M}\Big[a_k\cos(kx)+b_k\sin(kx)\Big]=\sum_{k=-M}^{M}c_ke^{ikx}$$

amb $M=n/2$ i incògnites a_0,a_k,b_k,c_k, $k=1,...,M$, on $\frac{a_0}{2}=c_0$, $a_k=c_k+c_{-k}$, $b_k=i(c_k-c_{-k})$.

b) Si n és senar: prenem

$$\hat{f}(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{k=1}^{M+1}\Big[a_k\cos(kx)+b_k\sin(kx)\Big]=\sum_{k=-(M+1)}^{M+1}c_ke^{ikx}$$

amb $M=(n-1)/2$ i incògnites a_0,a_k,b_k,c_k, $k=1,...,M$, on $\frac{a_0}{2}=c_0$, $a_k=c_k+c_{-k}$, $b_k=i(c_k-c_{-k})$, $k=1,...,M$, i $a_{M+1}=2c_{M+1}$, $b_{M+1}=0$ (hem imposat $c_{-(M+1)}=c_{M+1}$).

En general: es té

$$c_\ell=\frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n}f(x_j)e^{-ijh\ell},\quad\ell=-(M+\mu),...,M+\mu$$

on μ és 0 o 1 segons n sigui parell o senar, respectivament. Així,

$$\frac{a_0}{2}=c_0=\frac{1}{n+1}\sum_{j=0}^{n}f(x_j)$$

$$a_k=\frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{n}f(x_j)\cos(jhk)$$

$$b_k=\frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{n}f(x_j)\sin(jhk)$$

amb $k=1,...,M$. En el cas de n senar, s'ha d'afegir

$$a_{M+1}=2c_{M+1}=\frac{2}{n+1}\sum_{j=0}^{n}f(x_j)e^{-ijh(M+1)},\quad b_{M+1}=0.$$

Aproximació

Introducció

Donat un conjunt I d'abscisses i unes funcions bàsiques $\varphi_0(x), ..., \varphi_n(x)$ l.i. sobre I i donada una funció $f(x)$ definida a I, volem trobar

$$f_n(x) = a_0\varphi_0(x) + ... + a_n\varphi_n(x)$$

tq l'error $e(x) = f(x) - f_n(x)$ sigui mínim.

Per mesurar l'error podem prendre diferents normes. La que prendrem serà la $\|\cdot\|_2$ i parlarem d'*aproximació per mínims quadrats*.

Obs. Recordem que, donada una xarxa $\{x_i\}_{i=0,...,m}$, diem que

$$\varphi_0(x), ..., \varphi_n(x) \text{ l.i.} \iff \text{Rang}\begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \dots & \varphi_n(x_0) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{pmatrix} = n+1$$

És a dir, que el rang és màxim.

Def. Si $I = \{x_0, ..., x_m\}$ és un conjunt discret, parlarem d'aproximació discreta. Prendrem

$$\|e\|_{2,w} := \left(\sum_{k=0}^{m} w_k|e_k|^2\right)^{1/2}$$

amb $e_k = e(x_k)$ i w_k uns certs pesos (que prendrem igual a 1 si no es diu el contrari).

Lema. Si $\{\varphi_j(x)\}_{j=0,...,n}$ són l.i., llavors:

$$\left\|\sum_{j=0}^{n} a_j\varphi_j\right\|_2 = 0 \iff a_j = 0 \quad \forall j$$

Def. Si $I = [a, b]$, parlarem d'aproximació contínua. Prendrem

$$\|e\|_{2,w} := \left(\int_a^b w(x)|e(x)|^2 dx\right)^{1/2}$$

amb $w \in \mathscr{C}([a, b])$ i $w(x) > 0$ a I.

Obs. Recordem la definició i propietats del producte escalar:

$$\langle u, v\rangle = \int_a^b w(x)a(x)b(x)dx$$

Llavors, $\|u\|_{2,w}^2 = \langle u, u\rangle$. A més, es satisfà que $\forall u, v, u_1, u_2$ funcions a I:

i. $\langle u, u\rangle \geq 0$ i $\langle u, u\rangle = 0 \iff u = 0$.

ii. $\langle u, v\rangle = \langle v, u\rangle$.

iii. $\langle a_1u_1 + a_2u_2, v\rangle = a_1\langle u_1, v\rangle + a_2\langle u_2, v\rangle \quad \forall a_1, a_2 \in \mathbb{R}$.

Definició del problema d'aproximació discreta i contínua

Suposem donades $\varphi_0(x), ..., \varphi_n(x)$ l.i. a I.

Sigui $\mathcal{F}_n = \{f_n = a_0\varphi_0(x) + ... + a_n\varphi_n(x) | a_0, ..., a_n \in \mathbb{R}\}$. Donada f sobre I, volem $f_n^* \in \mathcal{F}_n$ tq:

$$\|f - f_n^*\|_2 = \min_{f_n \in \mathcal{F}_n} \|f - f_n\|_2$$

on denotem $\|\cdot\|_2 = \|\cdot\|_{2,w}$. És a dir, volem $a_0^*, ..., a_n^*$ amb $f_n^*(x) = a_0^*\varphi_0(x) + ... + a_n^*\varphi_n(x)$.

Th. Donat I i $\{\varphi_i(x)\}_{i=0,...,n}$ l.i., $\exists! f_n^* = \sum_{k=0}^{n} a_k^*\varphi_k(x)$ que minimitza $\|f - f_n\|_2$ a $\mathcal{F}_n$:

$$\|f - f_n^*\|_2 = \min_{f_n \in \mathcal{F}_n} \|f - f_n\|_2$$

Obs. Recordem d'ALN que f_n^* ve caracteritzada per

$$\langle f - f_n^*, \varphi_i\rangle = 0 \iff \sum_{j=0}^{n} a_j^*\langle\varphi_j, \varphi_i\rangle = \langle f, \varphi_i\rangle, \forall i \iff Aa^* = b$$

Prop. A partir de les $\{\varphi_j\}_{j=0,...,n}$ es poden obtenir $\{\psi_j\}_{j=0,...,n}$ ortogonals (mètode de Gram-Schmidt). Plantejant el sistema

$$(\varphi_0(x), ..., \varphi_n(x)) = (\psi_0(x), ..., \psi_n(x))\begin{pmatrix} r_{00} & \dots & \dots & r_{0n} \\ & r_{11} & \dots & r_{1n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{pmatrix}$$

amb $r_{ij} = \frac{\langle\varphi_j, \psi_i\rangle}{d_i}$, on $d_i = \langle\psi_j, \psi_j\rangle$. S'obté

$$\begin{cases} \psi_0(x) = \varphi_0(x) \\ \psi_j(x) = \varphi_j(x) - \sum_{i=0}^{j-1} \frac{\langle\varphi_j, \psi_i\rangle}{\langle\psi_i, \psi_i\rangle}\psi_i(x), \quad j = 1, ..., n \end{cases}$$

Obs. Si volguéssim una base ortonormal, prendríem

$$\tilde{\psi}_j = \frac{\psi_j}{\sqrt{\langle\psi_j, \psi_j\rangle}} = \frac{\psi_j}{\sqrt{d_j}}, \quad j = 0, ..., n$$

Obs. Així doncs, procedirem així:

i. De les $\{\varphi_j\}$ calcularem les $\{\psi_j\}$ ortogonals.

ii. Calculem $\langle\psi_i, \psi_i\rangle$.

iii. Resolem el sistema d'equacions normals $Aa^* = b$, ara diagonal:

$$c_i^* = \frac{\langle\psi_i, f\rangle}{\langle\psi_i, \psi_i\rangle}.$$

iv. Aleshores, $f_n^* = c_0^*\psi_0(x) + ... + c_n^*\psi_n(x)$.

Prop. Si $\psi_0(x), ..., \psi_n(x)$ són ortogonals,

$$f_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j^*\psi_j(x)$$

és la funció mínim-quadràtica. Llavors, l'error és

$$\|f - f_n^*\|^2 = \|f\|^2 - \|f_n^*\|^2$$

Cas d'aproximació polinomial: polinomis ortogonals

Obs. Donats $\varphi_0(x), ..., \varphi_n(x)$ l.i., on $\varphi_j(x)$ és un polinomi de grau j, i $\mathcal{F}_n \equiv \mathcal{P}_n$ el conjunt de polinomis de grau $\leq n$, l'aproximació mínim-quadràtica d'una funció $f(x)$ ve donada per

$$p_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j^*\varphi_j(x) \quad \text{tq} \quad \|f - p_n^*\|_2 = \min_{p_n \in \mathcal{P}_n} \|f - p_n\|_2$$

on $a_0^*, ..., a_n^*$ és la única solució del sistema d'equacions normals

$$\sum_{j=0}^{n}\langle\varphi_i, \varphi_j\rangle a_j^* = \langle\varphi_i, f\rangle, \quad i = 0, ..., n$$

Tanmateix, aquest sistema d'equacions pot estar mal condicionat. Per aquest motiu, voldrem trobar una familia de polinomis ortogonals.

Obs. Considerarem l'ortogonalitat tant en el cas discret com continu.

Lema. Es satisfà:

1. $\langle xu, v\rangle = \langle u, xv\rangle \quad \forall u, v \in \mathcal{P}_n$.

2. Donats $\psi_0, ..., \psi_i$ de grau$\{\psi_j(x)\} = j$, $\{\psi_j\}_j$ ortogonals ($\Rightarrow$ l.i.), tot polinomi p_i de grau i s'escriu de manera única com:

$$p_i(x) = c_0\psi_0(x) + ... + c_i\psi_i(x).$$

3. $\langle\psi_j, p_i\rangle = 0 \quad \forall p_i(x) \text{ tq } i < j$.

Prop. La solució del pb d'aproximació per mínims-quadrats ve donada per

$$p_n^*(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j^*\psi_j(x)$$

on c_j^* és la solució del sistema d'equacions normals, ara diagonal:

$$c_j^* = \frac{\langle\psi_j, f\rangle}{\langle\psi_j, \psi_j\rangle}, \quad j = 0, ..., n$$

i on els polinomis *ortogonals* $\psi_j(x)$ vénen donats per la recurrència

$$(RAPO)\begin{cases}\psi_0(x) = A_0 \qquad (\psi_{-1}(x) = 0)\\ \psi_{j+1}(x) = \alpha_j(x-\beta_j)\psi_j(x) - \gamma_j\psi_{j-1}(x), \quad j \geq 0.\end{cases}$$

amb

$$\begin{cases}\alpha_j = \frac{A_{j+1}}{A_j}, \quad j \geq 0\\ \beta_j = \frac{\langle\psi_j, x\psi_j\rangle}{\langle\psi_j,\psi_j\rangle} = \frac{\langle\psi_j, x\psi_j\rangle}{d_j}, \quad j \geq 0\\ \gamma_j = \frac{\alpha_j}{\alpha_{j-1}}\frac{\langle\psi_j,\psi_j\rangle}{\langle\psi_{j-1},\psi_{j-1}\rangle} = \frac{\alpha_j d_j}{\alpha_{j-1}d_{j-1}}, \quad j \geq 1\end{cases}$$

Obs. Tenim llibertat per triar el coeficient principal $A_{j+1} = \alpha_j A_j \neq 0$.

Obs. Si volem polinomis mònics ortogonals (i.e., $A_j = 1$, $j \geq 0$), prendrem $\alpha_j = 1$, $\forall j \geq 0$.

Obs. Amb aquest procediment s'obté un sistema d'equacions normals ben condicionat.

Prop. Tota família de polinomis ortogonals satisfà la (RAPO); i.e., en aplicar-li la recurrència s'obté de nou la mateixa família.

Polinomis de Legendre

Def. Els polinomis de Legendre vénen definits per

$$\begin{cases}P_0(x) = 1\\ P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\Big[(x^2-1)^n\Big], \quad n \geq 1\end{cases}$$

Obs.

1) $P_n(x)$ té grau n.

2) El coeficient de grau màxim de $P_n(x)$ és $\frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$.

3) $P_n(-x) = (-1)^n P_n(x)$.

Obs. Els polinomis de Legendre satisfan les següents relacions de recurrència (per $x \in \mathbb{R}$ i $n \geq 1$):

i) $P_n'(x) - xP_{n-1}'(x) = nP_{n-1}(x)$.

ii) $xP_n'(x) - P_{n-1}'(x) = nP_n(x)$.

iii) $P_{n+1}'(x) - P_{n-1}'(x) = (2n+1)P_n(x)$.

iv) $(x^2-1)P_n'(x) = nxP_n(x) - nP_{n-1}(x)$.

Prop. La família $\{P_n(x)\}_{n>0}$ és ortogonal a $[-1,1]$ respecte de la funció pes $w(x) \equiv 1$:

$$\langle P_n, P_j\rangle = \int_{-1}^{1} P_n(x)P_j(x)dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{nj}$$

Prop. Utilitzant (RAPO), obtenim la recurrència ($x \in [-1,1]$)

$$\begin{cases}P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x,\\ P_{j+1}(x) = \frac{2j+1}{j+1}xP_j(x) - \frac{j}{j+1}P_{j-1}(x), \quad j \geq 1\end{cases}$$

Obs. Si $I = [a,b]$, $w(x) \equiv 1$, els polinomis de Legendre $\psi_j(x)$ s'obtenen dels polinomis de Legendre a $[-1,1]$ a través del canvi de variable:

$$x = a + \frac{b-a}{2}(t+1) \iff t = \frac{2}{b-a}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)$$

on $x \in [a,b]$, $t \in [-1,1]$.

Prop. Els polinomis de Legendre per $x \in [a,b]$ vénen donats per la recurrència

$$\begin{cases}\psi_0(x) = 1, \quad \psi_1(x) = \frac{2}{b-a}\left(x - \frac{a+b}{2}\right),\\ \psi_{j+1}(x) = \frac{2j+1}{j+1}\frac{2}{b-a}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\psi_j(x) - \frac{j}{j+1}\psi_{j-1}(x), \quad j \geq 1\end{cases}$$

Obs. Alguns exemples de polinomis ortogonals són:

i. Polinomis de Txebishev: amb funció pes $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ a $[-1,1]$. I.e., el producte escalar és

$$\langle g, h\rangle = \int_{-1}^{1}\frac{g(x)h(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$$

ii. Polinomis d'Hermite: amb funció pes $w(x) = e^{-x^2}$ a $(-\infty,+\infty)$. I.e., el producte escalar és

$$\langle g, h\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)h(x)e^{-x^2}dx$$

Satisfan la recurrència

$$H_{j+1}(x) = 2xH_j(x) - 2jH_{j-1}(x), \quad j \geq 0$$

iii. Polinomis generalitzats de Laguerre: $L_j^{\alpha}(x)$ amb funció pes $w(x) = x^{\alpha}e^{-x}$ a $(0,\infty)$. I.e., el producte escalar és

$$\langle g, h\rangle = \int_{0}^{\infty} g(x)h(x)x^{\alpha}e^{-x}dx$$

Els coeficients per a la relació de recurrència són

$$\alpha_j = -\frac{1}{j+1}, \quad \beta_j = 2j+\alpha+1, \quad \gamma_j = \frac{j+\alpha}{j+1}$$

Aproximació trigonomètrica

Suposem que la funció que volem aproximar expressa un fenomen 2π-periòdic. En aquest cas, prendrem com a funcions bàsiques independents:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{2}, \quad \psi_{2n-1}(x) = \cos(nx), \quad \psi_{2n}(x) = \sin(nx), \quad n \geq 1$$

Prop. Les funcions $\{\psi_j\}_{j\geq 0}$ són ortogonals tant en el cas continu com el discret. Es té:

i. Cas continu:

$$\langle\psi_j,\psi_\ell\rangle = \int_0^{2\pi}\psi_j(x)\psi_\ell(x)dx = \begin{cases}0 & \text{si } j \neq \ell,\ j,\ell \geq 0\\ \frac{\pi}{2} & \text{si } j = \ell = 0\\ \pi & \text{si } j = \ell > 0\end{cases}$$

ii. Cas discret: prenem $x_k = \frac{2\pi}{m+1}k$, $\quad k = 0,...,m$, $\quad 2n \leq m$.

$$\langle\psi_j,\psi_\ell\rangle = \sum_{k=0}^{m}\psi_j(x_k)\psi_\ell(x_k) = \begin{cases}0 & \text{si } j \neq \ell,\ j,\ell = 0,...,2n\\ \frac{m+1}{4} & \text{si } j = \ell = 0\\ \frac{m+1}{2} & \text{si } j = \ell = 1,...,2n\end{cases}$$

Def. Sigui

$$\mathcal{F}_n = \{t_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{j=1}^{n}\left(a_j\cos(jx) + b_j\sin(jx)\right) \quad \forall a_0, a_j, b_j \in \mathbb{R}\}$$

El problema d'aproximació trigonomètrica per mínims quadrats consisteix en:

i. Al cas continu: donada $f : [0,2\pi] \to \mathbb{R}$ continua, $f(0) = f(2\pi)$, volem $t_n^* \in \mathcal{F}_n$ tq:

$$\|f - t_n^*\|_2 = \min_{t_n\in\mathcal{F}_n}\|f - t_n\|_2$$

ii. Al cas discret: donats $m \geq 2n$ i $f : I_m \to \mathbb{R}$, on $I_m = \{x_k = kh, \quad \text{amb } h = \frac{2\pi}{m+1}, \quad k = 0,...,m\}$, volem $t_n^* \in \mathcal{F}_n$ tq:

$$\|f - t_n^*\|_2 = \min_{t_n\in\mathcal{F}_n}\|f - t_n\|_2$$

Com que les funcions bàsiques són ortogonals, el sistema d'equacions normals serà diagonal i per tant la solució t_n^* ve donada per

$$t_n^* = \frac{a_0^*}{2} + \sum_{j=1}^{n}\left(a_j^*\cos(jx) + b_j^*\sin(jx)\right)$$

on a_0^*, a_j^*, b_j^* vénen donades per:

	Cas continu	Cas discret
$a_0^* = \frac{\langle\psi_0,f\rangle}{\langle\psi_0,\psi_0\rangle}$	$\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)dx$	$\frac{2}{m+1}\sum_{k=0}^{m} f(x_k)$
$a_j^* = \frac{\langle\cos(jx),f\rangle}{\langle\cos(jx),\cos(jx)\rangle}$	$\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\cos(jx)dx$	$\frac{2}{m+1}\sum_{k=0}^{m} f(x_k)\cos(jx_k)$
$b_j^* = \frac{\langle\sin(jx),f\rangle}{\langle\sin(jx),\sin(jx)\rangle}$	$\frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(x)\sin(jx)dx$	$\frac{2}{m+1}\sum_{k=0}^{m} f(x_k)\sin(jx)$

Obs.

1) Si prenem $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 2π-periòdica continua, podem substituir qualsevol interval de la forma $[a,a+2\pi]$ per $[0,2\pi]$ sense alterar l'aproximació.

2) Calculem l'error:

$$\|f-t_n^*\|_2^2=\|f\|_2^2-\|t_n^*\|_2^2=\sum_{k=0}^m f_k^2-\frac{m+1}{2}\left[\frac{a_0^{*2}}{2}+\sum_{j=1}^m (a_j^{*2}+b_j^{*2})\right]$$

3) Podem expressar $t_n(x)$ per la representació de Fourier complexa:

$$t_n(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{j=1}^n\big(a_j\cos(jx)+b_j\sin(jx)\big)=\sum_{j=-n}^n c_je^{ijx}$$

on $c_0=a_0/2, c_j=(a_j-ib_j)/2, c_{-j}=\bar{c}_j=(a_j+ib_j)/2, j=1,...,n$. O a l'inrevés: $a_0=2c_0, a_j=2\Re(c_j), b_j=-2\Im(c_j)$. Anomenats coeficients de Fourier reals, o complexos.

4) Canvi d'escala: en el cas d'una funció T-periòdica $f(t)$, podem reduir-ho al cas 2π-periòdic definint la transformació

$$t\in[0,T]\longleftrightarrow x\in[0,2\pi],\quad x=\frac{2\pi}{T}t$$

Llavors, amb $f(t)=f\left(\frac{T}{2\pi}x\right)=\tilde{f}(x)$:

$$f(t)\approx\frac{a_0}{2}+\sum_{j=1}^n\left(a_j\cos\left(j\frac{2\pi}{T}t\right)+b_j\sin\left(j\frac{2\pi}{T}t\right)\right)$$

Derivació numèrica

Donada $f(x)$ (que suposarem prou diferenciable) i $a\in\mathbb{R}$, volem $f'(a)$. Numèricament farem dos passos:

1. Construim el polinomi interpolador $p_m(x)$ en els punts $(x_0,f_0),...,(x_m,f_m)$ amb $x_0,...,x_m$ prop d'a.
2. Fem l'aproximació $f'(a)\simeq p_m'(a)$.

Lema. Sigui $F:I=[a,b]\to\mathbb{R}$ continua, $\xi_k\in I$, $\alpha_k>0$, $k=1,...,n$. Llavors, $\exists\xi\in\tilde{I}=\langle\xi_1,...,\xi_n\rangle$ tq:

$$\sum_{k=1}^n\alpha_kF(\xi_k)=F(\xi)\sum_{k=1}^n\alpha_k$$

Diferència finita endavant

Si $m=1$, $x_0=a, x_1=a+h\Rightarrow p_1(x)=f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0), p_1'(x)=f[x_0,x_1]$. Aleshores:

$$\boxed{f'(a)\approx p_1'(x)=\frac{f(a+h)-f(a)}{h}}$$

on l'error comès es troba desenvolupant $f(a+h)$ per Taylor i es troba un error de $-\frac{f''(\xi)}{2!}h=\mathcal{O}(h)$.

Diferència finita enrera

Si $m=1$, $x_0=a-h$, $x_1=a$, tenim

$$\boxed{f'(a)\approx\frac{f(a)-f(a-h)}{h}}$$

amb un error de $\frac{f''(\xi)}{2!}h=\mathcal{O}(h)$.

Diferència centrada finita

Si $m=2$, $x_0=a-h$, $x_2=a$, $x_1=a+h\Rightarrow p_2(x)=f[x_0]+$ $+f[x_0,x_1](x-x_0)+f[x_0,x_1,x_2](x-x_0)(x-x_1)$, $p_2'(a)=f[x_0,x_1]$. Prenem:

$$\boxed{f'(a)\approx p_2'(a)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}}$$

amb un error de $\frac{h^2}{6}f'''(\xi)=\mathcal{O}(h^2)$.

Obs. Si suposem que coneixem la f en $n+1$ nodes equiespaiats $x_i=x_0+ih$, $i=0,...,n$, amb $h>0$, podem calcular $f'(x_i)$ prenent una de les fórmules prèvies amb $a=x_i$. La més usual és la diferència centrada.

Obs. Aquesta diferència centrada no es pot prendre al extrems x_0,x_n. En aquests nodes:

$$f'(x_0)\approx\frac{1}{2h}\left[-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)\right]$$
$$f'(x_n)\approx\frac{1}{2h}\left[3f(x_n)-4f(x_{n-1})+f(x_{n-2})\right]$$

que tènen error d'ordre $\mathcal{O}(h^2)$.

Obs. Atenció amb prendre h molt petits en la diferència finita endavant, que hi ha pèrdua de dígits al fer la diferència en el numerador.

Aproximació de la derivada segona

Prenem $m=2$, polinomi interpolador per $x_0=a-h, x_1=a, x_2=a+h$. Obtenim: $p_2''(x)=2f[x_0,x_1,x_2]$. Llavors:

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

amb un error de $-\frac{1}{12}f^{(iv)}(\xi)h^2=\mathcal{O}(h^2)$.

Integració numèrica

Def. Volem calcular integrals $\int_a^b f(x)dx$ amb f continua. Prenem $a\le x_0<x_1<...<x_m\le b$, $m+1$ abscisses a $[a,b]$ (típicament equiespaiades). Considerem el polinomi interpolador $p_m(x)$ tq:

$$p_m(x_k)=f_k,\quad k=0,...,m$$

i prenem

$$\int_a^b f(x)dx\approx\int_a^b p_m(x)dx=\int_a^b\sum_{k=0}^m f_k\ell_k(x)dx=\sum_{k=0}^m f_kW_k$$

Anomenem els $W_k:=\int_a^b\ell_k(x)dx$ els pesos de la fórmula d'integració (són únics i no depenen de f), on

$$\ell_k(x)=\prod_{\substack{i=0\\i\ne k}}^m\frac{x-x_i}{x_k-x_i}$$

Obs. (Càlcul dels W_k)

i. O bé integrant.

ii. O bé fem el canvi $x=a+ht$ (llavors $x_i=a+ih, h=\frac{b-a}{m}$):

$$\int_a^b\ell_k(x)dx=\int_0^m\prod_{i\ne k}\frac{h(t-i)}{h(k-i)}hdt=\int_0^m h\prod_{i\ne k}\frac{t-i}{k-i}dt$$

iii. O bé, com que

$$f(x)-p_m(x)=\frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}(x-x_0)...(x-x_m)$$

observem que si $f(x)=1,x,x^2,...,x^m$, l'error és 0. Per tant:

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

Imposem que la fórmula pels pesos sigui exacta. Si $f(x)=1,x,x^2,...,x^m$:

$$\int_a^b x^jdx=\sum_{k=0}^m x_k^jW_k,\quad j=0,...,m$$

així obtenim un sistema lineal en les variables $W_0,...,W_m$. Com que el determinant del sistema és de Van der Monde, el sistema lineal tindrà una única solució $W_0,...,W_m$. Aquest és l'anomenat mètode dels coeficients indeterminats.

Fórmules d'integració simples

Lema. Siguin $F(x), G(x)$ continues i $G(x)$ amb signe constant a $[a,b]$. Llavors:

$$\int_a^b F(x)G(x)dx = F(c)\int_a^b G(x)dx, \quad c \in (a,b)$$

Prop.

1. Per $m=0$, prenem $x_0 = \frac{a+b}{2}$, $p_0(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)$, $h = b-a$. Tenim la fórmula del rectangle:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)}$$

amb fórmula de l'error:

$$E = \frac{h^3}{24}f''(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

2. Per $m=1$, $h=b-a$, $x_0=a$, $x_1=b$. Tenim la fórmula dels trapezis:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[f(a)+f(b)\right]}$$

amb fórmula de l'error:

$$E = -\frac{h^3}{12}f''(c), \quad c \in (a,b).$$

3. Per $m=2$, apliquem el mètode dels coeficients indeterminats a $[-1,1]$ prenent les abscisses $-1,0,1$ i busquem els pesos W_{-1}, W_0, W_1 tq la fórmula

$$\int_{-1}^1 g(t)dt \approx W_{-1}g_{-1} + W_0 g_0 + W_1 g_1$$

sigui exacta per a polinomis de grau ≤ 2 (i.e.: en $1, t, t^2$). Obtenim la fórmula:

$$\int_{-1}^1 g(t)dt \approx \frac{1}{3}(g_{-1} + 4g_0 + g_1)$$

Per tal de tenir la corresponent fórmula en $[a,b]$ i $f(x)$, fem el canvi $\frac{x-a}{b-a} = \frac{t-(-1)}{2} \iff x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$. Obtenim la fórmula de Simpson:

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]}$$

que també escriurem com

$$\boxed{\int_{c-h}^{c+h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(c-h) + 4f(c) + f(c+h)\right]}$$

amb fórmula de l'error:

$$E = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b).$$

Prop. (Fórmula general de l'error en les fórmules d'integració interpolatòria)

$$E_m = \int_a^b f(x)dx - \sum_{k=0}^m f_k W_k = \int_a^b (f(x) - p_m(x))dx$$
$$= \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(\xi_x)}{(m+1)!}(x-x_0)...(x-x_m)dx$$

Si $\left|f^{(m+1)}(x)\right| \leq M_{m+1} \quad \forall x \in [a,b]$, llavors podem fitar:

$$\boxed{|E_m| \leq \frac{M_{m+1}}{(m+1)!}\int_a^b \left|(x-x_0)...(x-x_m)\right| dx}$$

Def. Anomenem fórmules de Newton-Cotes a les fórmules d'integració interpolatòria quan les abscisses són equiespaiades.

Obs. (Exemples)

	Fórmula	$-E$	h
Trapezi	$\frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)]$	$\frac{h^3}{12}f''(c)$	$b-a$
Simpson	$\frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]$	$\frac{h^5}{90}f^{(4)}(c)$	$\frac{b-a}{2}$
Regla 3/8	$\frac{3}{8}h[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)]$	$\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(c)$	$\frac{b-a}{3}$

Fórmules de Newton-Cotes compostes

A la vista de les fórmules que tenim i on observem que, si $[a,b]$ és gran, l'error també ho és, volem obtenir ara fórmules millorades. Ho farem simplement subdividint $[a,b]$ en intervals més petits i aplicant una regla d'integració a cada subinterval i sumant-les. Així, obtenim les anomenades fórmules de Newton-Cotes compostes.

Prop.

1. (Fórmula dels trapezis composta) Subdividint $[a,b]$ en N trossos, de manera que ara $x_i = a + ih$, $i = 0, ..., N$, $h = \frac{b-a}{N}$, a $[x_i, x_{i+1}]$ tenim:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})] =: I_i$$

Llavors:

$$\boxed{\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \sum_{i=0}^{N-1} I_i = T_N(f) := \\ &= \frac{h}{2}\left[f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + ... + 2f(b-h) + f(b)\right]\end{aligned}}$$

amb fórmula de l'error:

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

2. (Fórmula de Simpson composta) Suposem ara N *parell* i apliquem la fórmula de Simpson a cada "subinterval" $[x_{2i}, x_{2i+1}, x_{2i+2}]$, $i = 0, ..., \frac{N}{2}-1$, obtenint:

$$\int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})\right] =: I_i$$

Llavors:

$$\boxed{\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} I_i = S_N(f) := \\ &= \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + ... \\ &\quad ... + 2f(b-2h) + 4f(b-h) + f(b)]\end{aligned}}$$

amb fórmula de l'error:

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

Fórmula d'Euler-McLaurin

Def. Definim els nombres de Bernouilli com els nombres B_n que compleixen:

$$\frac{x}{e^x - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!}x^n$$

o també com

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_j = -\sum_{\ell=0}^{j-1}\binom{j}{\ell}\frac{B_\ell}{j+1-\ell}, \quad j \geq 2$$

Obs. Els primers valors són: $B_0 = 1$, $B_1 = -1/2$, $B_2 = 1/6$, $B_3 = 0$, $B_4 = -1/30$, $B_5 = 0$, $B_6 = 1/42$, $B_7 = 0$, $B_8 = -1/30$, $B_9 = 0$, $B_10 = 5/66$...

Obs. Es pot provar que:

- $B_{2r+1} = 0, \quad r \geq 1$
- $B_{2k} \cdot B_{2k+2} < 0, \quad \forall k \geq 1$

Th. Si $f \in \mathscr{C}^{2k+2}([a,b])$, $N \in \mathbb{N}$, $h = \frac{b-a}{N}$, llavors

$$T_N(f) - \int_a^b f(x)dx = A_{2k} + R_{2k}(c), \quad c \in (a,b)$$

on

$$T_N(f) = \frac{h}{2}[f(a) + 2f(a+h) + ... + 2f(b-h) + f(b)]$$
$$A_{2k} = \sum_{i=1}^{k+1} \frac{B_{2i}}{(2i)!} h^{2i}[f^{(2i-1)}(b) - f^{(2i-1)}(a)]$$
$$R_{2k}(c) = \frac{B_{2k+2}}{(2k+2)!} h^{2k+2}(b-a) f^{(2k+2)}(c)$$

Obs. Aquesta fórmula ens permet afegir termes a la regla dels trapezis composta per tal d'obtenir mètodes més precisos, prenent $I_{apr} = T_N(f) - A_{2k}$ (obtenint com a error $R_{2k} = \mathcal{O}(h^{(2k+2)})$).

Integrals impròpies

Caldrà aplicar diferents tècniques segons com sigui la funció i/o interval d'integració, per tal de transformar la integral i poder-la calcular numèricament.

Obs. (Exemples)

(i) Eliminació de les singularitats.

1. Canvi de variable:
$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} e^x dx = \left\{ x = t^2 \right\} = 2\int_0^1 e^{t^2} dt$$
2. Integració per parts:
$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} e^x dx = \left\{ u = e^x, dv = \frac{1}{\sqrt{x}} dx \right\} = 2e - 2\int_0^1 \sqrt{x} e^x dx$$
3. Desenvolupament per sèries:
$$I = \int_{0.0001}^1 x^{-3} e^x dx = \int_{0.0001}^1 x^{-3}\left(1 + x + \frac{x^2}{2!}\right) dx + $$
$$+ \int_{0.0001}^1 x^{-3}\left(e^x - 1 - x - \frac{x^2}{2!}\right) dx$$
on la primera integral es pot calcular analíticament i la segona numèricament, però ara havent reduït els valors que pren la funció a integrar.

(ii) Integral en un interval infinit.

1. Per calcular $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx$ calcularem $\int_{R_1}^{R_2} f(x)dx$ i controlarem $\int_{-\infty}^{R_1} f(x)dx$ i $\int_{R_2}^{+\infty} f(x)dx$ fent algunes acotacions.
2. Desenvolupament en sèrie de potències negatives:
$$I = \int_0^\infty (1+x^2)^{-4/3} dx = \int_0^\infty x^{-8/3}(1+x^{-2})^{-4/3} dx$$
$$= \int_0^\infty x^{-8/3}\left(1 - \frac{4}{3}x^{-2} + \frac{14}{9}x^{-4} + ...\right) dx$$
$$= \int_0^R S dx + \int_R^\infty S dx$$
on la primera és una integral finita d'una sèrie S i per a la segona caldrà una fita amb un R adequat. Així, amb R adequada, tindrem una sèrie alternada convergent
$$\int_R^\infty S dx = R^{-5/3}\left(\frac{3}{5} - \frac{4}{11}R^{-2} + \frac{14}{61}R^{-4} + ...\right)$$
Tallem a un cert terme i prenem la suma finita com a aproximació de la sèrie. L'error serà menor que el primer terme menyspreat.

Integració gaussiana

Def. Considerem integrals del tipus $\int_a^b f(x)w(x)dx$, on $w(x)$ és una funció *positiva* a $[a,b]$.

Prenem nodes $x_0, ..., x_m$ diferents en $[a,b]$ i sigui $p_m(x) = \sum_{k=0}^m f_k \ell_k(x)$ el polinomi interpolador de Lagrange, on

$$\ell_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^m \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Llavors prenem l'aproximació:

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \int_a^b p_m(x)w(x)dx = \sum_{k=0}^m \tilde{W}_k f_k$$

on $\tilde{W}_k := \int_a^b \ell_k(x)w(x)dx$ són els pesos de la fórmula d'integració gaussiana.

Obs.

1. Observem que si $w(x) \equiv 1$ i els nodes x_i són equiespaiats, recuperem les fórmules de Newton-Cotes.
2. És clar que la fórmula és exacta si prenem $f(x)$ un polinomi de grau $\leq m$ ($f \equiv p_m$).

Obs. (Objectiu)

Volem millorar el grau d'exactitud d'aquestes fórmules escollint de manera òptima els nodes $x_0, ..., x_m$. Concretament, amb $m+1$ nodes adequats, tindrem fórmules d'integració que seran exactes per a funcions $f(x)$ com polinomis de grau $\leq 2m+1$.

Th. Sigui $w(x)$ una funció continua positiva a $[a,b]$. Per a cada m, anomenarem $\varphi_m(x)$ al polinomi ortogonal de grau m respecte del producte escalar

$$\langle g_1, g_2 \rangle = \int_a^b g_1(x) g_2(x) w(x) dx$$

Llavors, $\varphi_m(x)$ té m zeros simples a $[a,b]$.

Th. Sigui $w(x)$ una funció continua i positiva a $[a,b]$. Siguin $x_0, ..., x_m$ els $m+1$ zeros simples de $\varphi_{m+1}(x)$ polinomi ortogonal respecte del producte escalar (P). Llavors la fórmula d'aproximació

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{k=0}^m \tilde{W}_k f_k$$

amb $\tilde{W}_k = \int_a^b \ell_k(x)w(x)dx$, és exacta per a tots els polinomis de grau $\leq 2m+1$.

Def. Anomenem fórmules gaussianes a les fórmules d'integració numèrica descrites en aquest últim teorema.

Th. L'error a les fórmules gaussianes és

$$\boxed{\int_a^b f(x)w(x)dx - \sum_{k=0}^m \tilde{W}_k f_k = c_m f^{(2m+2)}(c) \qquad (FE)}$$

on $c_m := \frac{1}{(2m+2)!}\int_a^b (\Pi(x))^2 w(x)dx$, i on $\Pi(x) = \prod_{k=0}^m (x - x_k)$.

Prop. (Càlcul dels pesos de les fórmules gaussianes)

Alguns mètodes de càlcul són els següents:

1) Els pesos es poden calcular a partir de

$$\boxed{\tilde{W}_k = \int_a^b \ell_k(x)w(x)dx, \quad \text{on } \ell_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \quad k = 0, ..., m}$$

2) O bé, considerant $\psi_{m+1}(x)$ el polinomi ortogonal de grau $m+1$ amb $x_0, ..., x_m$ els corresponents zeros:

$$\psi_{m+1}(x) = A_{m+1}(x - x_0)...(x - x_m)$$

i imposant l'exactitud per a les funcions

$$f_k(x) := \frac{\psi_{m+1}(x)}{x - x_k} = A_{m+1}\prod_{i \neq k}(x - x_i)$$

polinomis de grau m (observant que: 1. $f_k(x_i)=0$ si $i\neq k$; 2. $f_k(x_k)=\psi'_{m+1}(x_k)$). Obtenint així:

$$\boxed{\tilde{W}_k=\frac{1}{\psi'_{m+1}(x_k)}\int_a^b\frac{w(x)\psi_{m+1}(x)}{x-x_k}dx,\quad k=0,...,m}$$

3) O bé imposant exactitud per les funcions

$$g_k(x):=\frac{\psi_{m+1}^2(x)}{(x-x_k)^2}=A_{m+1}^2\prod_{i\neq k}(x-x_i)^2$$

polinomis de grau $2m$ (observant que: 1. $g_k(x_i)=0$ si $i\neq k$; 2. $g_k(x_k)=\left(\psi'_{m+1}(x_k)\right)^2$). Obtenint així:

$$\boxed{\tilde{W}_k=\frac{1}{\left(\psi'_{m+1}(x_k)\right)^2}\int_a^b\frac{\psi_{m+1}^2(x)}{(x-x_k)^2}w(x)dx,\quad k=0,...,m}$$

4) O bé a partir de la fórmula de l'error (FE), escrivint $\Pi(x)=\frac{\psi_{m+1}(x)}{A_{m+1}}$ i observant que per a les funcions $h_k(x):=\frac{\psi_{m+1}(x)}{x-x_k}\psi_{m+2}(x)$ el primer terme de l'esquerra és nul per ortogonalitat (i a més: 1. $h_k(x_i)=0$ si $i\neq k$; 2. $h_k(x_k)=\psi'_{m+1}(x_k)\psi_{m+2}(x_k)$). Obtenint així:

$$\boxed{\tilde{W}_k=-\frac{A_{m+2}}{A_{m+1}}\frac{\langle\psi_{m+1},\psi_{m+1}\rangle}{\psi'_{m+1}(x_k)\psi_{m+2}(x_k)},\quad k=0,...,m}$$

5) O bé, reescrivint aquesta darrera expressió fent servir la $(RAPO)$, obtenint així:

$$\boxed{\tilde{W}_k=\frac{A_{m+1}}{A_m}\frac{\langle\psi_m,\psi_m\rangle}{\psi'_{m+1}(x_k)\psi_m(x_k)},\quad k=0,...,m}$$

Obs. Per als dos darrers casos, la fórmula de l'error és

$$\int_a^b f(x)w(x)dx-\sum_{k=0}^m\tilde{W}_kf_k=\frac{f^{(2m+2)}(c)}{(2m+2)!}\frac{1}{A_{m+1}^2}\langle\psi_{m+1},\psi_{m+1}\rangle$$

amb $c\in(a,b)$.

Obs. (Exemples de fórmules de quadratura gaussianes)

(i) Si la funció és $w(x)\equiv 1$ i l'interval $[a,b]\equiv[-1,1]$, prenem el polinomi ortogonal de Legendre de grau $m+1$:

$$\psi_{m+1}(t)=P_{m+1}(t)=\frac{1}{2^{m+1}(m+1)!}\frac{d^{m+1}}{dt^{m+1}}\left[\left(t^2-1\right)^{m+1}\right]$$

amb coeficient $A_{m+1}=\frac{(2m+2)!}{2^{m+1}[(m+1)!]^2}$. Llavors, obtenim

$$\tilde{W}_k=\frac{2}{(1-t_k^2)\left[P'_{m+1}(t_k)\right]^2}=\frac{2(1-t_k^2)}{(m+2)^2\left[P_{m+2}(t_k)\right]^2},k=0,...,m$$

on $t_0,...,t_m$ són els zeros de $p_{m+1}(t)$. Aquesta fórmula es pot estendre a qualsevol interval $[a,b]$ amb el canvi $x=\frac{b-a}{2}t+\frac{b+a}{2}$, obtenint:

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}\sum_{k=0}^m\tilde{W}_kf(x_k)+E_{m+1}(f)$$

amb

$$x_k=\frac{b-a}{2}t_k+\frac{b+a}{2},\quad \tilde{W}_k=\frac{2}{(1-t_k)^2\left[P'_{m+1}(t_k)\right]^2}$$

on $t_0,...,t_m\in(-1,1)$ són els zeros del polinomi de Legendre $P_{m+1}(t)$. Si la funció és $f\in\mathscr{C}^{2m+2}([a,b])$, llavors la fórmula de l'error és

$$E_{m+1}(f)=\frac{(b-a)^{2m+3}}{2m+3}\frac{\left[(m+1)!\right]^4}{\left[(2m+2)!\right]^3}f^{(2m+2)}(\xi),\quad \xi\in(a,b)$$

(ii) Si la funció és $w(x)\equiv\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ i l'interval $[a,b]\equiv[-1,1]$, prenem el polinomi ortogonal de Txebishev de grau $m+1$:

$$\psi_{m+1}(x)=T_{m+1}(x)=\cos\left((m+1)\arccos(x)\right)$$

Propietats útils:

1. $A_{m+1}=2^m$.
2. Els zeros són $x_k=\cos\theta_k=\cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(m+1)}\right)$, $k=0,...,m$.
3. $\langle\psi_{m+1},\psi_{m+1}\rangle=\pi/2\quad$ si $m\geq 0$.
4. $\psi_{m+2}(x_k)=(-1)^{k+1}\sin\theta_k$.
5. $\psi'_{m+1}(x)=\frac{m+1}{\sqrt{1-x^2}}\sin\left((m+1)\arccos(x)\right)$ i $\psi'_{m+1}(x_k)=\frac{(m+1)(-1)^k}{\sin\theta_k}$.
6. Recurrència: $\psi_{m+1}(x)=2x\psi_m(x)-\psi_{m-1}(x)$.
7. Recurrència per les derivades: $(1-x^2)\psi'_m(x)=-mx\psi_m(x)+m\psi_{m-1}(x)=mx\psi_m(x)-m\psi_{m+1}(x)$.

Ara, prenent els zeros $x_0,...,x_m$ com a nodes, obtenim els pesos:

$$\tilde{W}_k=\frac{\pi}{m+1},\quad\forall k=0,...,m$$

i la fórmula d'error ve donada per:

$$\int_{-1}^1\frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx=\frac{\pi}{m+1}\sum_{k=0}^m f\left(\cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2(m+1)}\right)\right)+E_{m+1}(f)$$

on $E_{m+1}(f)=\frac{\pi}{2^{2m+1}(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi),\quad\xi\in(-1,1)$.

(iii) Si la funció és $w(x)\equiv e^{-x^2}$ i l'interval $(-\infty,\infty)$, prenem el polinomi ortogonal d'Hermite de grau $m+1$:

$$\psi_{m+1}(x)=H_{m+1}(x)=(-1)^{m+1}e^{x^2}\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\left[e^{-x^2}\right]$$

Propietats útils:

1. $\langle\psi_m,\psi_n\rangle=2^m m!\sqrt{\pi}\delta_{mn}$.
2. Recurrència: $\psi_{m+1}(x)=2x\psi_m(x)-2m\psi_{m-1}(x)$.
3. Recurrència per les derivades: $\psi'_m(x)=2m\psi_{m-1}(x)=2x\psi_m(x)-\psi_{m+1}(x)$.

Prenent els zeros $x_0,...,x_m$ com a nodes, obtenim els pesos:

$$\tilde{W}_k=\frac{2^{m+2}(m+1)!\sqrt{\pi}}{\left[\psi'_{m+1}(x_k)\right]^2}=\frac{2^{m+2}(m+1)!\sqrt{\pi}}{\left[\psi_{m+2}(x_k)\right]^2},\quad k=0,...,m$$

i la fórmula de quadratura de $m+1$ punts esdevé:

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x^2}f(x)dx=\sum_{k=0}^m\tilde{W}_kf(x_k)+\frac{(m+1)!\sqrt{\pi}}{2^{m+1}(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi)$$

(iv) Si la funció és $w(x)\equiv e^{-x}$ i l'interval $[0,\infty)$, prenem el polinomi ortogonal de Laguerre de grau $m+1$:

$$\psi_{m+1}(x)=L_{m+1}(x)=e^x\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\left[x^{m+1}e^{-x}\right]$$

Propietats útils:

1. $\langle\psi_m,\psi_n\rangle=(m!)^2\delta_{mn}$.
2. Recurrència: $\psi_{m+1}(x)=(1+2m-x)\psi_m(x)-m^2\psi_{m-1}(x)$.
3. Recurrència per les derivades: $x\psi'_m(x)=m\psi_m(x)-m^2\psi_{m-1}(x)=(x-m-1)\psi_m(x)+\psi_{m+1}(x)$.

Prenent els zeros $x_0,...,x_m$ com a nodes, obtenim els pesos:

$$\tilde{W}_k=\frac{((m+1)!)^2}{x_k\left[\psi'_{m+1}(x_k)\right]^2}=\frac{((m+1)!)^2x_k}{\left[\psi_{m+2}(x_k)\right]^2},\quad k=0,...,m$$

i la fórmula de quadratura de $m+1$ punts esdevé:

$$\int_0^{\infty}e^{-x}f(x)dx=\sum_{k=0}^m\tilde{W}_kf(x_k)+\frac{((m+1)!)^2}{(2m+2)!}f^{(2m+2)}(\xi)$$

Extrapolació

Obs. En molts problemes, el càlcul numèric d'un nombre v consta de dues etapes:

1. Discretització: es calculen aproximacions numèriques de v depenents d'un pas h: $F(h) = v + \alpha_1 h + \alpha_2 h^2 + ...$ (e.g.: derivació, integració...).
2. Pas al límit: $v = \lim_{h\to 0} F(h)$.

on el pas al límit presenta problemes numèrics quan $h \to 0$.
Obs. L'objectiu de l'extrapolació és obtenir millors aproximacions de v sense prendre h molt *petit*.

Mètode d'extrapolació de Richardson

Def. Donada una aproximació $F(h)$ de v, definirem una nova aproximació. Suposem que

$$F_1(h) := F(h) = v + a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + a_3 h^{p_3} + ...$$

amb $a_1 \neq 0$ i $p_1 < p_2 < p_3 < ...$; és a dir, $F(h) \approx v$ amb un error $a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + ... = \mathcal{O}(h^{p_1})$. Considerem ara un $q > 0$ ($q \neq 1$) i avaluem

$$F(qh) = v + a_1 q^{p_1} h^{p_1} + a_2 q^{p_2} h^{p_2} + ...$$

de manera que

$$q^{p_1} F(h) - F(qh) = (q^{p_1} - 1)\, v + \gamma_2 h^{p_2} + ...$$

amb $\gamma_2 = a_2 (q^{p_1} - q^{p_2})$. És a dir,

$$F_2(x) := \frac{q^{p_1} F(h) - F(qh)}{q^{p_1} - 1} = v + a_2^{(2)} h^{p_2} + ...$$

amb $a_2^{(2)} = \frac{\gamma_2}{q^{p_1}-1}$. Així, tenim una nova aproximació de v: $F_2(h) \approx v$ amb un error $\mathcal{O}(h^{p_2})$ (millor que l'anterior).
Obs. Observem que la nova aproximació la podem escriure com

$$F_2(h) = \frac{q^{p_1} F(h) - F(qh)}{q^{p_1} - 1} = F(h) + \frac{F(h) - F(qh)}{q^{p_1} - 1}$$

que interpretem com $F_2(h) = F(h) +$ correció.
Obs. Aquest procés es pot "repetir":

$$F_{k+1}(h) := F_k(h) + \frac{F_k(h) - F_k(qh)}{q^{p_k} - 1} = v + a_{k+1}^{(k+1)} h^{p_{k+1}} + ...$$

obtenint cada cop millors aproximacions (amb error $\mathcal{O}(h^{p_{k+1}})$).
Obs. (Veure esquema de càlcul).

Obs. (Comentaris)
1. El valor de la q no és molt rellevant. Normalment $q = 2$.
2. No cal conèixer explícitament les $a_1, a_2, ..., a_2^{(2)}, ...$ Només cal conèixer les $\{p_i\}_{i\geq 1}$
3. En el cas de la fórmula dels trapezis composta tenim

$$T_N(f) = \int_a^b f(x)dx + a_2 h^2 + a_4 h^4 + ...$$

Prenem $q = 2$ i fem extrapolació amb $p_1 = 2, p_2 = 4, ...$ prenent $\frac{\Delta_k}{2^{p_k}-1}$ (amb $\Delta_k = F_k(h) - F_k(qh)$) fent crèixer la k i parant quan els dígits en l'aproximació de v s'estabilitzen. S'obté així l'anomenat mètode de Romberg.
Obs. (Estimació de l'error) El terme $\frac{F(h)-F(qh)}{q^{p_1}-1}$ dóna una estimació de l'error. Aquesta estimació serà bona sii

$$\frac{F(h) - F(qh)}{F(qh) - F(q^2 h)} \approx \frac{1}{q^{p_1}}$$

Mètodes numèrics per a EDOs

Introducció

Considerem el problema de Cauchy o de valors inicials

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

on $x \in [a,b]$, $y(x) \in \mathbb{R}^m$, $y_0 \in \mathbb{R}^m$ i $f : [a,b] \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ prou regular de manera que existeixi una única solució.
Ens agradaria poder tenir una solució expressada en forma analítica, però en molts casos (de fet, en general) això no és possible. Els mètodes numèrics no donaran la solució analítica, sino els valors (aproximats) de la solució en una xarxa de valors $x_0, ..., x_n \in [a,b]$.
Obs. Denotarem per $y(x_n)$ la solució en x_n, mentre que y_n denotarà la solució obtinguda pel mètode numèric.

Mètodes d'un pas

Obs. Prendrem de moment $m = 1$. La idea en aquest cas és aproximar $y(x)$ en $[x_0, x_1]$ pel seu desenvolupament de Taylor de 1er ordre:

$$y(x) \approx y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)$$

i, suposant que $y_1 := y_0 + f(x_0, y_0)h$ (amb $h \equiv x_1 - x_0$) és una bona aproximació de $y(x_1)$, considerar el mateix pb de Cauchy per $y_1(x)$ amb condició inicial y_1. Procedint succesivament obtenim:
Def. El mètode d'Euler vé donat per

$$\boxed{\begin{cases} y_0 = y(x_0) \\ y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n), \quad n = 0, ..., N-1 \end{cases}}$$

Def. Considerem un mètode d'un pas; i.e., un mètode definit per un algorisme del tipus

$$\begin{cases} y_0 = y(a) \\ y_{n+1} = y_n + h\Phi(x_n, y_n, h), \quad n = 0, ..., N-1 \end{cases}$$

on Φ és una funció continua a $[a,b] \times \mathbb{R} \times [0, h_0]$ i Lipschitz en y (uniformement en x, h); és a dir:

$$\left|\Phi(x, y, h) - \Phi(x, \bar{y}, h)\right| \leq L|y - \bar{y}|\,, \quad y, \bar{y} \in \mathbb{R}$$

$\forall x \in [a,b]$, $\forall h \in [0, h_0]$ i L independent de x, h, y.
Def. Anomenem error en el punt x_n al valor

$$\epsilon_n = \left|y(x_n) - y_n\right|$$

Def. Direm que un mètode d'integració té ordre global p, $p \in \mathbb{N}$, i escriurem $\mathcal{O}(h^p)$ sii existeixen $h_0 > 0$ i $K > 0$ tq $\forall h \in [0, h_0]$ (pas d'integració) es compleix $\epsilon_n \leq K h^p$, $\quad n = 0, ..., N$.
Th. Si $\left|y(x+h) - y(x) - h\Phi(x, y(x), h)\right| \leq \hat{K} h^{p+1}$ per a certa $\hat{K} > 0$, $\forall x \in [a,b]$ i $h \in [0, h_0]$, per a cert h_0 (ho denotarem per $y(x+h) - y(x) - h\Phi(x, y(x), h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$), llavors el mètode d'integració té ordre global p.
Obs. Observem de l'expressió $\epsilon_n \leq K h^p$ que si $p \geq 1$, es té que $\epsilon_n \xrightarrow{h\to 0} 0, \quad \forall n = 0, ..., N,\ N = \frac{b-a}{h}$.
Def. En aquest cas, direm que el mètode és convergent.
Obs. Com més petita sigui la h millor serà l'aproximació i com més gran sigui la p més ràpida serà la convergència.
Prop. El mètode d'Euler té ordre 1.

Mètode de Taylor

Obs. Voldríem trobar mètodes d'ordre superior.

Def. Els mètodes de Taylor es basen en aproximar la funció desconeguda $y(x)$ en $[x_n, x_{n+1}]$, $n = 0, ..., N-1$, pel desenvolupament de Taylor fins a ordre k de la solució del PVI

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)), & x \in [x_n, x_{n+1}] \\ y(x_n) = y_n \end{cases}$$

al voltant de x_n.

Prop. S'obté així un mètode d'integració d'ordre k.

Obs. El mètode d'Euler coincideix amb el mètode de Taylor d'ordre 1.

Prop. El mètode de Taylor d'ordre 2 ve donat per

$$\boxed{\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ \qquad\qquad + \dfrac{h^2}{2}\left[f_x(x_n, y_n) + f_y(x_n, y_n)f(x_n, y_n)\right] \end{cases}}$$

per $n = 0, ..., N-1$.

Prop. El mètode de Taylor de 2n ordre té ordre 2.

Mètodes de Runge-Kutta

Def. Els mètodes de Runge-Kutta vénen definits per

$$\boxed{\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + h\sum_{i=1}^{k} c_i K_i^n, \quad n = 0, ..., N-1 \end{cases}}$$

on $k \in \mathbb{N}$ i les K_i^n són funcions definides per la fórmula recurrent:

$$\boxed{\begin{cases} K_1^n = f(x_n, y_n) \\ K_i^n = f\left(x_n + a_i h, y_n + h\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} K_j^n\right), \quad i = 2, ..., k \end{cases}}$$

amb a_i i b_{ij} constants a determinar de manera que el mètode tingui ordre global màxim.

Obs. Observem que es tracta de mètodes d'un pas on

$$\Phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^{k} c_i K_i^n$$

D'aquesta forma, es preten estalviar haver de calcular les derivades parcials de la f successivament (com passa al mètode de Taylor) i s'aproximen aquestes derivades per combinacions lineals de $f(x, y)$ avaluats en punts estratègicament escollits a l'interval $[x_n, x_{n+1}]$.

Obs. Prenent $k = 1$, $c_1 = 1$, obtenim el mètode d'Euler i podem dir que és un mètode Runge-Kutta d'ordre 1, que denotem per RK1.

Obs. Per a $k = 2$, desenvolupant per Taylor es troba una expressió per

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} - \Phi(x, y, h)$$

en termes de h. Aleshores es determinen les constants c_1, c_2, a_2, b_{21} tals que amb aquesta Φ el mètode tingui ordre màxim. Això es fa imposant que s'anul·lin els coeficients del terme independent i els dels termes en h, obtenint un sistema compatible indeterminat. S'escull una de les infinites possibles solucions.

Def. El mètode Runge-Kutta RK2 ve d'escollir els coeficients $a_2 = b_{21} = 1, c_1 = c_2 = 1/2$, de manera que RK2 ve donat per

$$\boxed{\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + h\left[\frac{1}{2}f(x_n, y_n) + \frac{1}{2}f\left(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n)\right)\right] \end{cases}}$$

amb $n = 0, ..., N-1$.

Prop. L'ordre de RK2 és 2.

Obs. De forma similar, variant k obtindríem altres mètodes de Runge-Kutta d'ordre superior. El més conegut és el RK4:

Def. El mètode de Runge-Kutta RK4 (d'ordre 4 que s'obté amb $k = 4$) ve donat per

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left[K_1^n + 2K_2^n + 2K_3^n + K_4^n\right] \end{cases}$$

on

$$\begin{cases} K_1^n = f(x_n, y_n) \\ K_2^n = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_1^n\right) \\ K_3^n = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}K_2^n\right) \\ K_4^n = f\left(x_n + h, y_n + hK_3^n\right) \end{cases}$$

amb $n = 0, ..., N-1$.

Generalització a sistemes d'EDOs

Obs. Tots els mètodes exposats són fàcilment generalitzables al cas de sistemes d'equacions diferencials ordinàries, utilitzant la notació vectorial:

$$Y(x) = (y^1(x), ..., y^m(x)), \quad x \in [a, b]$$

$$F(x, Y(x)) = \left(f^1(x, y^1(x), ..., y^m(x)), ..., f^m(x, y^1(x), ..., y^m(x))\right)$$

Obs. Per exemple, l'algorisme per al mètode d'Euler esdevé:

$$\boxed{\begin{cases} Y(a) = Y_0(a) \\ Y_{n+1} = Y_n + hF(x_n, Y_n), \quad n = 0, ..., N-1 \end{cases}}$$

on $Y_0, ..., Y_N$ són els vectors aproximació de la solució $Y(x)$. En components, per $n = 0, ..., N-1$, ho escriurem

$$\begin{pmatrix} y_{n+1}^1 \\ \vdots \\ y_{n+1}^m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n^1 \\ \vdots \\ y_n^m \end{pmatrix} + h\begin{pmatrix} f^1(x_n, y_n^1, ..., y_n^m) \\ \vdots \\ f^m(x_n, y_n^1, ..., y_n^m) \end{pmatrix}$$

Mètodes multipàs

Considerem el PVI

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y), & x \in [a, b], y \in \mathbb{R}, y_0 \in \mathbb{R} \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

on $f : [a, b] \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ és una funció prou suau per assegurar l'existència i unicitat de solució.

Obs. Als mètodes d'un sol pas el càlcul de y_{n+1} només depèn del valor de (x_n, y_n). Als mètodes multipàs farem servir més punts anteriors per calcular l'aproximació y_{n+1}.

Def. Els mètodes multipàs lineals de k passos vènen definits per

$$\boxed{(MM)\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_{n+1-i} + h\sum_{i=0}^{k} \beta_i f(x_{n+1-i}, y_{n+1-i}) \end{cases}}$$

amb $n = 0, ..., N-1$.

Obs. Observem que si $\beta_0 \neq 0$, y_{n+1} no està aïllada i per tant s'ha de resoldre l'equació. En aquest cas s'anomena mètode implícit. Si $\beta_0 = 0$, llavors y_{n+1} està aïllada i es diu mètode explícit.

Obs. El mètode no és aplicable per calcular els primers $y_1, ..., y_{k-1}$, doncs necessita k punts anteriors. Aquests es calculen típicament amb un mètode d'un pas del mateix ordre que el del mètode multipàs considerat.

Th. Si $\forall x \in [a,b]$ es té

$$y(x+h) - \sum_{i=1}^{k} \alpha_i y(x-(i-1)h) - h\sum_{i=0}^{k} \beta_i f\big(x-(i-1)h, y(x-(i-1)h)\big) = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

$p \in \mathbb{N}$, aleshores el mètode d'integració considerat té ordre p.

Mètodes d'Adams-Bashforth

Obs. La forma més corrent de generar mètodes multipàs és la d'integrar el PVI:

$$y(x_{n+1}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} y'(x)dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x,y(x))dx \approx \int_{x_n}^{x_{n+1}} P(x)dx$$

on $P(x)$ és el polinomi que aproxima $f(x,y(x))$.

Per exemple, una forma d'obtenir aquests polinomis és la següent: siguin $y_n,\ldots,y_{n-(k-1)}$ les aproximacions de la solució en els punts $x_n,\ldots,x_{n-(k-1)}$ que suposem equiespaiats amb pas h. Prenem $P(x)$ el polinomi interpolador (de grau $\le k-1$) de la xarxa $(x_i, f(x_i,y_i)), \quad i = n-(k-1),\ldots,n$. L'algorisme d'aquest mètode serà doncs:

$$\boxed{\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} P(x)dx, \quad n = 0,\ldots,N-1 \end{cases}}$$

Prop.

1) Si $k=1$, l'algorisme és

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_n,y_n), \quad n = 0,\ldots,N-1 \end{cases}$$

que és justament el mètode d'Euler. Es tracta d'un mètode d'un pas.

2) Si $k=2$, l'algorisme és

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[3f(x_n,y_n) - f(x_{n-1},y_{n-1})\right] \end{cases}$$

amb $n = 0,\ldots,N-1$, i tenim un mètode de 2 passos.

3) Si $k=3$, l'algorisme és

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{12}\left[23f(x_n,y_n) \right. \\ \qquad\qquad \left. -16f(x_{n-1},y_{n-1}) + 5f(x_{n-2},y_{n-2})\right] \end{cases}$$

amb $n = 0,\ldots,N-1$, i tenim un mètode de 3 passos.

4) Si $k=4$, l'algorisme és

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}\left[55f(x_n,y_n) - 59f(x_{n-1},y_{n-1}) \right. \\ \qquad\qquad \left. +37f(x_{n-2},y_{n-2}) - 9f(x_{n-3},y_{n-3})\right] \end{cases}$$

amb $n = 0,\ldots,N-1$, i tenim un mètode de 4 passos.

Def. Aquestes fórmules es coneixen per <u>mètodes d'Adams-Bashforth</u>.

Th. El mètode d'Adams-Bashforth de k nodes té ordre k.

Mètodes d'Adams-Moulton

Obs. Els mètodes d'Adams-Bashforth s'obtenen fent servir informació sobre els k anteriors punts a x_n. Una altra possibilitat és utilitzar també punts posteriors a x_n. La situació més senzilla és la que considera el polinomi $P(x)$ que interpola la xarxa de punts $(x_i, f(x_i,y_i)), \quad i = n-(k-1),\ldots,n+1$.

Prop. Així, per exemple:

1) Si $k=1$, el polinomi té grau ≤ 1 i ha de satisfer

$$P(x_n) = f(x_n,y_n), \quad P(x_{n+1}) = f(x_{n+1},y_{n+1})$$

Llavors integrant el PVI resulta l'algorisme

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = \frac{h}{2}\left[f(x_{n+1},y_{n+1}) + f(x_n,y_n)\right] \end{cases}$$

amb $n = 0,\ldots,N-1$, que és un mètode *implícit* d'un pas.

2) Si $k=2$, prenem el polinomi de grau ≤ 2 que ha de satisfer

$$P(x_{n-i}) = f(x_{n-i},y_{n-i}), \quad i = -1,0,1$$

Llavors integrant el PVI resulta l'algorisme

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left[5f(x_{n+1},y_{n+1}) + 8f(x_n,y_n) - f(x_{n-1},y_{n-1})\right] \end{cases}$$

amb $n = 1,\ldots,N-1$, que és un mètode *implícit* de 2 passos.

3) Si $k=3$, s'obté el mètode *implícit* de 3 passos:

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}\left[9f(x_{n+1},y_{n+1}) + 19f(x_n,y_n) \right. \\ \qquad\qquad \left. -5f(x_{n-1},y_{n-1}) + f(x_{n-2},y_{n-2})\right] \end{cases}$$

Def. Aquests mètodes s'anomenen <u>d'Adams-Moulton</u>.

Obs. Són mètodes implícits.

Th. El mètode d'Adams-Moulton de $k+1$ nodes té ordre $k+1$.

Mètodes predictor-corrector

Def. A la pràctica, les equacions (mètodes) d'Adams-Moulton no són resolubles i el que es fa és combinar les fórmules implícites amb les fórmules explícites, obtenint el que s'anomenen mètodes <u>predictor-corrector</u>.

Obs. Aquests mètodes primer *prediuen* el valor de $y(x_{n+1})$ amb un mètode explícit, obtenint un cert y_{n+1}^p que serveix per aproximar $f(x_{n+1},y_{n+1})$ per $f(x_{n+1},y_{n+1}^p)$ en el mètode implícit i *corregir* així el y_{n+1}^p.

Obs. Un dels cassos més coneguts és el predictor-corrector que s'obté per combinació del mètode d'Adams-Bashforth de 4rt ordre amb el mètode d'Adams-Moulton de 4rt ordre.

Prop. Concretament, obtenint y_{n+1}^p pel mètode d'Adams-Bashforth de 4rt ordre i fent-lo servir per substituir y_{n+1} a $f(x_{n+1},y_{n+1})$ al mètode d'Adams-Moulton de 4rt ordre, s'obté

$$\begin{cases} y(a) = y_0 \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{h}{24}\left[9f(x_{n+1},y_{n+1}^p) + 19f(x_n,y_n) \right. \\ \qquad\qquad \left. -5f(x_{n-1},y_{n-1}) + f(x_{n-2},y_{n-2})\right] \end{cases}$$

amb $n = 2,\ldots,N-1$, que té forma explícita.

Obs. Caldrà calcular prèviament y_1, y_2.

Zeros de funcions

Equacions en una variable

Sigui $f\colon I_0 = [a_0,b_0] \to \mathbb{R}$ amb $f(a_0)\,f(b_0) < 0$. Suposem $\exists!\ \alpha \in I_0$ tq $f(\alpha) = 0$.

Mètode de bisecció: $I_k = [a_k,b_k]$, $x_k = \frac{a_k+b_k}{2}$.

$$I_{k+1} = \begin{cases} [a_k,x_k] & \text{si} \quad f(a_k)\,f(x_k) < 0 \\ [x_k,b_k] & \text{si} \quad f(b_k)\,f(x_k) < 0 \end{cases}$$

Error: $|x_k-\alpha| < \frac{b_0-a_0}{2^{k+1}}$. Convergeix geomètricament.

Mètode de la secant: donats $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ i $(x_k, f(x_k))$, sigui $g(x)$ la recta que passa per ells. Prenem x_{k+1} on $g(x)=0$:

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

No sempre convergent, més ràpid que bisecció.

Mètode de la regula falsi: $I_k = [x_{k-1}, x_k]$, es calcula x_{k+1} com en la secant, es pren I_{k+1} com en la bisecció. Convergent si en $I_1 = [x_0, x_1]$, $f(x_0)f(x_1) < 0$. Més lent que secant.

Mètode de Newton: donat $(x_k, f(x_k))$ sigui $g(x)$ la recta que passa pel punt amb pendent $f'(x_k)$. Prenem x_{k+1} on $g(x)=0$:

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

No sempre convergent.

Th. Sigui $f:[a,b]\to\mathbb{R}$, de classe $\mathscr{C}^2$ tq

i. $f(a)f(b)<0$. **ii.** $f'(x)\neq 0 \quad \forall x\in[a,b]$.

iii. $f''(x)\geq 0$ (o $f''(x)\leq 0$) $\forall x\in[a,b]$.

iv. Si $c\in\{a,b\}$ és on $\left|f'(x)\right|$ és menor $\Rightarrow \left|\frac{f(c)}{f'(c)}\right| \leq b-a$.

Aleshores $\exists!\alpha\in[a,b]$ tal que $f(\alpha)=0$ i el mètode de Newton convergeix a $\alpha, \forall x_0\in[a,b]$ condició inicial.

Teoria d'iteració. Mètodes de punt fix

Th. (Punt fix). Sigui $g: I=[a,b]\to\mathbb{R}$ de classe $\mathscr{C}^1$ tq

i. $g(I)\subset I$.

ii. $|g'(x)|\leq L<1 \quad \forall x\in I$.

Llavors:

a) Existeix un únic punt fix s de g en I $(s=g(s))$.

b) $\forall x_0\in I$ la successió $x_k = g(x_{k-1})$ convergeix cap a s.

c) $|x_k - s| \leq \frac{L^k}{1-L}|x_1-x_0|$, $\qquad |x_k-s|\leq \frac{L}{1-L}|x_k - x_{k-1}|$.

Ordre de convergència

Def. Direm que una successió $(x_k)_{k\geq 0}$, convergent cap a α, té ordre de convergència almenys p si existeixen $N\geq 0$ i $C\geq 0$ tq

$$|x_{k+1}-\alpha| \leq C|x_k-\alpha|^p \quad \forall k\geq N$$

Si $p=1$ haurem d'exigir, a més, que $C<1$. En particular, si existeix el límit

$$L = \lim_{k\to\infty}\frac{x_{k+1}-\alpha}{(x_k-\alpha)^p}$$

la successió tindrà ordre de convergència almenys p (si $p=1$ haurem d'exigir, a més, que $L<1$). Si $L\neq 0$ direm que la successió té ordre de convergència p i que la L és la constant asimptòtica de l'error.

Prop. Considerem la iteració $x_{k+1} = g(x_k)$ amb $s=g(s)$ un punt fix. Si $g\in\mathscr{C}^\infty(s-\epsilon, s+\epsilon)$, $\epsilon>0$, i $g^{(j)}(s)=0$, $j=1,...,p-1$, $g^{(p)}(s)\neq 0$, llavors $\{x_k\}_{k\geq 0}$ convergeix amb ordre p.

Obs. El mètode de Newton és en general d'ordre 2.

Obs. Si $f(x)=0$ té s com a zero amb multiplicitat q, la convergència és només lineal. Podem recuperar la convergència quadràtica prenent

$$g(x) = x - q\frac{f(x)}{f'(x)}$$

Acceleració de la convergència

Mètode d'acceleració d'Aitken: definim $\Delta x_k = x_{k+1}-x_k$, $\Delta^2 x_k = \Delta x_{k+1} - \Delta x_k$. Sigui $g(x)$ la recta que passa per $(x_k, \Delta x_k)$, $(x_{k+1}, \Delta x_{k+1})$. Prenem x_k' on $g(x)=0$:

$$x_k' = x_k - \frac{(\Delta x_k)^2}{\Delta^2 x_k}$$

Prop. Suposem $\lim_{k\to\infty} x_k = s$, $x_k\neq 0\ \forall k$, i $\exists C$ amb $|C|<1$ tq $x_{k+1}-s = (C+\delta_k)(x_k-s)$, amb $\lim_{k\to\infty}\delta_k = 0$. Llavors $\{x_k'\}_{k\geq 0}$ ben definida per k prou gran i $\lim_{k\to\infty}\frac{x_k'-s}{x_k-s} = 0 \Rightarrow \{x_k'\}_{k\geq 0}$ convergeix més ràpid que $\{x_k\}_{k\geq 0}$.

Mètode d'acceleració de Steffensen: Sigui $g:[a,b]\to\mathbb{R}$ de classe $\mathscr{C}^2$, $s\in[a,b]$ amb $g(s)=s$ i $g'(s)\neq 1$. Llavors la funció d'iteració

$$G(x) = x - \frac{(g(x)-x)^2}{g(g(x))-2g(x)+x}$$

dóna un mètode de convergència almenys quadràtica cap al mateix s (cal que $g'(s)\neq 1$). Si la convergència de $x_{k+1}=g(x_k)$ és almenys lineal, llavors la de $y_{k+1}=G(y_k)$ és almenys quadràtica. Si la convergència de $x_{k+1}=g(x_k)$ és almenys d'ordre $p>1$, llavors la de $y_{k+1}=G(y_k)$ és almenys d'ordre $2p-1$.

Obs. Aitken treballa sobre la successió inicial, Steffensen construeix la successió accelerada.

Sistemes d'equacions no lineals

Th. (Punt fix). Sigui $T\subset\mathbb{R}^n$ un conjunt tancat, $\mathbf{G}: T\to\mathbb{R}^n$ tq

i. $\mathbf{G}(T)\subset T$.

ii. $\exists L<1$ tq $\left\|\mathbf{G}(\mathbf{x_2})-\mathbf{G}(\mathbf{x_1})\right\| \leq L\|\mathbf{x_2}-\mathbf{x_1}\|$, $\forall \mathbf{x_1},\mathbf{x_2}\in T$ (i.e.:$\mathbf{G}$ és Lipschitz i contractiva).

LLavors:

a) $\exists!$ $\mathbf{s}$ punt fix de $\mathbf{G}$ en T $(\mathbf{s}=\mathbf{G}(\mathbf{s}))$.

b) $\forall\mathbf{x_0}\in T$ la successió $\{\mathbf{x_k}\}_{k\geq 0} = \{\mathbf{G}(\mathbf{x_k})\}_{k\geq 0}$ convergeix a $\mathbf{s}$.

c) $\|\mathbf{x_k}-\mathbf{s}\| \leq \frac{L^k}{1-L}\|\mathbf{x_1}-\mathbf{x_0}\|$, $\qquad \|\mathbf{x_k}-\mathbf{s}\| \leq \frac{L}{1-L}\|\mathbf{x_k}-\mathbf{x_{k-1}}\|$.

Obs. ii'. es pot substituir per:

ii'. $\mathbf{G}$ és de classe $\mathscr{C}^1$ i satisfà $\left\|D\mathbf{G}(\mathbf{x})\right\| \leq L<1$, $\forall\mathbf{x}\in T$.

Mètode de Newton: sigui $\mathbf{f}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$, donat $\mathbf{x_k}\in\mathbb{R}^n$, fem Taylor $\mathbf{f}(\mathbf{x})\approx\mathbf{f}(\mathbf{x_k})+D\mathbf{f}(\mathbf{x_k})(\mathbf{x}-\mathbf{x_k})$. Sigui $\Delta\mathbf{x_k} = \mathbf{x_{k+1}}-\mathbf{x_k}$. Prenem $\mathbf{x_{k+1}}$ tal que $\mathbf{f}(\mathbf{x})=0$. Llavors resolem

$$D\mathbf{f}(\mathbf{x_k})\Delta\mathbf{x_k} = -\mathbf{f}(\mathbf{x_k}), \quad \text{i} \quad \mathbf{x_{k+1}} = \mathbf{x_k}+\Delta\mathbf{x_k}.$$

Zeros de polinomis

Obs. Si $p(x)\in\mathbb{R}_n[x]$, escriurem $p(x)=\sum_{k=0}^n a_k x^{n-k}$.

Obs. (Regla de Horner). Sigui $p(x)=\sum_{k=0}^n a_k x^{n-k}$, l'agrupem $p(x) = (\cdots(a_0x+a_1)x+a_2)x+\cdots a_{n-2})x+a_{n-1})x+a_n$. Volem $p(\alpha)$. Definim $b_0=a_0$, $b_i = b_{i-1}\alpha+a_i$, $i=1,...,n$. Llavors $p(\alpha)=b_n$.

Obs. (Divisó sintètica). La regla de Horner fa la divisó de $p(x)$ per $x-\alpha$: $p(x) = (x-\alpha)q(x)+r_p$ on $q(x)=\sum_{k=0}^{n-1} b_k x^{n-1-k}$ i $r_p = b_n = p(\alpha)$.

Obs. (Derivades en α). Desenvolupem p en Taylor entorn α, $p(x) = p(\alpha)+p'(\alpha)(x-\alpha)+\cdots\frac{p^{(n)}(\alpha)}{n!}(x-\alpha)^n$. Llavors $q(x) = \frac{p(x)-p(\alpha)}{x-\alpha} = p'(\alpha)+(x-\alpha)\sum_{j=2}^n\frac{p^{(j)}(\alpha)}{j!}(x-\alpha)^{j-2}$. Divisió sintètica de $q(x)\Rightarrow q(x) = (x-\alpha)\sum_{k=0}^{n-2}c_k x^{n-2-k}+c_{n-1}$ i $p'(\alpha)=q(\alpha)=c_{n-1}$. Iterem el procediment:

$$\begin{array}{llll}
b_0=a_0 & b_i = b_{i-1}\alpha+a_i & i=1,...,n & p(\alpha)=b_n \\
c_0=b_0 & c_i = c_{i-1}\alpha+b_i & i=1,...,n-1 & p'(\alpha)=c_{n-1} \\
d_0=c_0 & d_i = d_{i-1}\alpha+c_i & i=1,...,n-2 & p''(\alpha)=2\,d_{n-2} \\
e_0=d_0 & e_i = e_{i-1}\alpha+d_i & i=1,...,n-3 & p'''(\alpha)=3!\,e_{n-3}
\end{array}$$

Deflació

Si hem calculat l'arrel α de $p(\alpha)$, fent la divisió sintètica obtindrem $p(x)=(x-\alpha)q(x)+p(\alpha)$ amb $p(\alpha)\approx 0$. Podem passar llavors a calcular el següent zero treballant amb $q(x)$. Aquest procés es coneix com a deflació.

Si tenim arrels complexes i el polinomi té coeficients reals és millor seguir treballant en aritmètica real. Com que les arrels complexes venen en parelles conjugades tenim que si $\alpha\in\mathbb{C}$ és arrel de $p(x)$ també ho serà $\bar{\alpha}$. Així, $p(x)$ serà divisible per $(x-\alpha)(x-\bar{\alpha}) = x^2-2\Re(\alpha)x+|\alpha|^2$, que té coeficients reals.

La divisió de $p(x)$ per x^2+px+q ve donada per

$$p(x)=\sum_{k=0}^{n} a_k x^{n-k}=(x^2+px+q)\left(\sum_{k=0}^{n-2} b_k x^{n-2-k}\right)+Rx+S$$

on (definint $b_{-1}=0, b_{n-1}=R$ i $b_n=S-pb_{n-1}$) els coeficients satisfan la recurrència per $i=1,...,n$:

$$b_0=a_0,\quad b_i=a_i-pb_{i-1}-qb_{i-2},\quad R=b_{n-1},\quad S=b_n+pb_{n-1}$$

Fitació de les arrels d'un polinomi

Prop. (Regla Laguerre). Sigui $L>0$ i divisió sintètica de $p(x)$ per $x-L$, $p(x)=(x-L)\sum_{k=0}^{n-1} b_k x^{n-1-k}+b_n$. Si $b_i>0$ (o $b_i<0$) $\forall i$, L és fita superior de les arrels reals de $p(x)$.

Prop. (Regla Newton). Si $p(x)\in\mathbb{R}_n[x]$ i $L\in\mathbb{R}$ satisfà que $p(L),\ p'(L),\dots,p^{(n)}(L)$, són positius (o negatius), L és fita superior de les arrels reals de $p(x)$.

Prop. Sigui $p(x)\in\mathbb{C}_n[x]$ i $z\in\mathbb{C}$ arrel de $p(x)$. Llavors $|z|\le\max\left\{1,\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{a_i}{a_0}\right|\right\}$.

Prop. Sigui $p(x)\in\mathbb{C}_n[x]$ i $z\in\mathbb{C}$ arrel de $p(x)$. Llavors $|z|\le 1+\max\left\{\left|\frac{a_1}{a_0}\right|,\cdots,\left|\frac{a_n}{a_0}\right|\right\}$.

Obs. Fites d'altres arrels reals de $p(x)$:

i. Fita inferior d'arrels positives: $\overline{p}(x)\coloneqq p\left(\frac{1}{x}\right)$, $x\neq 0$. $\overline{L}>0$ fita superior d'arrels reals positives de $\overline{p}(x)\Rightarrow\frac{1}{L}$ fita inferior d'arrels reals positives de $p(x)$.

ii. Fita inferior d'arrels negatives: $\overline{p}(x)\coloneqq p(-x)$. $\overline{L}>0$ fita superior d'arrels reals de $\overline{p}(x)\Rightarrow -L$ fita inferior d'arrels reals negatives de $p(x)$.

iii. Fita superior d'arrels negatives: $\overline{p}(x)\coloneqq p\left(-\frac{1}{x}\right)$. $\overline{L}>0$ fita superior d'arrels reals de $\overline{p}(x)\Rightarrow -L$ fita superior d'arrels reals negatives de $p(x)$.

Mètode de Bairstow

Donat un polinomi $P(x)$ de coeficietns reals, volem obtenir els seus factors quadràtics x^2+px+q corresponents a parelles d'arrels complexes conjugades. Podem escriure

$$p(x)=\sum_{k=0}^{n} a_k x^{n-k}=(x^2+px+q)\left(\sum_{k=0}^{n-2} b_k x^{n-2-k}\right)+Rx+S$$

amb $b_0=1$ i a on hem assumit que el polinomi s'ha dividit pel coeficient de major grau. Volem doncs trobar p i q tq resolguin el sistema

$$\begin{cases} R(p,q)=0\\ S(p,q)=0\end{cases}$$

Es resol pel mètode de Newton (convergència quadràtica), iterant $p_{k+1}=p_k+\Delta p_k$ i $q_{k+1}=q_k+\Delta q_k$, amb Δp i Δq solucions del sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial R}{\partial p}\Delta p+\frac{\partial R}{\partial q}\Delta q=-R\\ \frac{\partial S}{\partial p}\Delta p+\frac{\partial S}{\partial q}\Delta q=-S\end{cases}$$

que són la linealització de les equacions $R(p+\Delta p,q+\Delta q)=0$, $S(p+\Delta p,q+\Delta q)=0$ (ometent els subíndexos k per simplificar). El càlcul de R i S es fa amb la deflació del factor x^2+px+q. Desenvolupant, s'obté que el sistema a resoldre per Δp i Δq és

$$\begin{cases} c_{n-2}\Delta p+c_{n-3}\Delta q=b_{n-1}\\ (c_{n-1}-b_{n-1})\Delta p+c_{n-2}\Delta q=b_n\end{cases}$$

on els b_i i els c_i es calculen a partir dels coeficients a_i del polinomi mònic $P(x)$ per les recurrències

$$b_i=a_i-pb_{i-1}-qb_{i-2},\quad i=1,...,n-1,\quad b_0=1,b_{-1}=0,$$
$$c_i=b_i-pc_{i-1}-qc_{i-2},\quad i=1,...,n-1,\quad c_0=1,c_{-1}=0.$$

Mètodes de continuació

Continuació dels zeros d'un sistema no lineal d'equacions

Autor: Alberto Cavallar Oriol (D.O.G.)