

TEMA 1. Conceptes bàsics

Exacte, estable, eficient i robust

Errors d'arrodoniment: Error acumulat a causa de l'execució del nostre model on les operacions descrites per l'algorisme es fan amb un # finit de dígit. Degut a l'aritmètica de punt/coma flotant de l'ordinador(- importants que els de truncament)

Errors de truncament: Aproximacions discretes i finites del model matemàtic perquè convertim un procés infinit en finit. Aproximar e^x pel polinomi de Taylor amb un cert grau és un error de truncament

Error absolut: Diferència entre el valor real i el valor aproximat. Defecte és que no es considera la magnitud del valor i depèn de les unitats

Error relatiu: Error absolut/valor absolut(valor real). També tenim el error relatiu percentual, en tant per 100

Xifres decimals correctes: La quantitat de decimals exactes d'un nombre aproximat, el # xifres exactes que estan després de la coma decimal. $|x - \tilde{x}| < 0.5 \cdot 10^{-d}$

Xifres significatives correctes: Són les xifres que coneixem amb certesa del càlcul. $|x - \tilde{x}|/|x| < 0.5 \cdot 10^{-d}$

Errors de discretització: Error que es comet al fer servir un algorisme determina. Si refinem la discretització o canviem l'algorisme, pot disminuir. Substituïm una expressió continua per una de discreta. **ed = $O(h^p)$ el mètode és convergent d'ordre p**

Propagació de l'error. Fórmula 1 variable i de dues: manera de valorar l'efecte que tenen els errors en les dades d'entrada en el càlcul de $y=f(x)$.

2 variables serà possibles fitar l'error propagat per les operacions elementals

Aritmètica de 64 bits en general o de MATLAB: La representació en coma flotant amb doble precisió: $fl(x) = (-1)^s \cdot M \cdot 2^{(c-1023)}$; 1 bit signe, 11 bits exponent enter c, i 52 bits (real) la mantissa

Història. Norma IEEE-754: Durant els anys 60/70 les operacions amb nombres reals tenien implementacions diferents en cada ordinador: format, precisió, arrodoniment, gestió d'excepcions. Era difícil escriure codi portàtil. 1982: IEEE(Institute of Electrical and Electronics Engineers) va definir la IEEE-754 i el va implementar en processadors intel 8087. En tots els ordinadors implementats, els programes obtenien els mateixos resultats.

2002 IEEE-754 es va implementar universalment en tots els ordinadors de propòsit general

1985 IEEE va publicar informe en el que s'especifiquen normes per representar nombres en coma flotant amb precisió simple, doble i extensa, revisat i actualitzar any 2008.

Avui dia quasi tots fabricants accepten aquesta norma, ordinador guarda una aproximació binària(octal/hexadecimal) en coma flotant a x.

Èpsilon de la màquina: Dóna una mesura relativa de fins a on dos nombres molt pròxims seran diferents. Afectada pel nombre de xifres significatives, poques xifres o la pèrdua en passos intermitjos, disminueix la fiabilitat dels resultats obtinguts

Algorisme numèricament estable/inestable: Un algorisme és numèricament estable si un error, no creix gaire en el procés de càlcul.

Inestable: Quan els petits errors que es produeixen en un dels seus estadis s'eixampla en etapes posteriors, fins a un punt que no podem fiar-nos del càlcul global

Algorisme sensible a les condicions inicials: la sortida de l'algorisme és sensible a petits canvis en les dades inicials/d'entrada, independentment dels errors d'arrodoniment i de l'algorisme emprat. Si petites variacions de les dades provoquen grans variacions en la solució => problema mal condicionat

Algorisme amb pèrdua de xifres significatives/Algorisme amb cancel·lació: La pèrdua de xifres significatives per cancel·lació es produeix en restar dos nombres molt propers. $G(x+\delta)-g(x)$ amb $|\delta| \ll 1$

Mètode Horner o exemple de com evitar la propagació dels errors: Per tal de reduir o evitar la propagació dels errors es recomana minimitzar el nombre d'operacions, reordenar les operacions i replantejar el problema en altres termes. Exemple:

TEMA 2. Equacions Lineals

$\|x\|_1$ $\|x\|_2$ $\|x\|_{\infty}$ vectors: Una norma és una aplicació de \mathbb{R}^n en \mathbb{R} que verificarà 3 propietats. Les tres normes són equivalents

$\|A\|_1$ $\|A\|_2$ $\|A\|_{\infty}$ matrius: Una norma és una aplicació de $\mathbb{R}^{m \cdot n}$ en \mathbb{R} que verificarà 3 propietats. Les tres normes són equivalents. També té la propietat multiplicativa

Matriu simètrica: $A^T = A$

Matriu ortogonal: $A^T = A^{-1}$ o $A^T A = A A^T = \text{Identitat}$

Radi espectral d'una matriu: $\rho(A)$ és el màxim dels mòduls dels valors propis de la matriu. Representa el radi del cercle mínim que conté a tots els valors propis de la matriu A

Nombre condició d'una matriu: $k(A)$ o bé $\text{cond}(A)$ i es diu que està ben condicionada si si el seu nombre de condició està a prop d'1 i es diu mal condicionada si és significativament més gran que 1, cosa que ens indicaria que petites variacions en les dades poden produir grans variacions en els resultats i per tant que la solució del sistema és propensa a grans errors d'arrodoniment.

$\text{Cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$, $\det(A) \neq 0$, altrament infinit

Mètode de Cramer per a resoldre sistemes. Eficiència: (Inapropiat per l'ordinador)

La solució de $Ax = b$, per cramer és: $x_i = |A_i|/|A|$

Eficiència: $n+1$ determinants d'ordre n per calcular x

Cada determinant d'ordre n requereix $n!(n-1)$ operacions

El nombre d'operacions per cap baix: $n!(n+1)-1$

Nombre de condició. Vector residu. Fites de l'error: Mal condicionat si és un nombre de condició gran. Com a criteri de comparació entre la solució exacta x i la solució calculada x^* , definim el vector residu $r(x^*)$

Sistema d'equacions ben condicionat/mal condicionat: Una petita modificació en les dades(terme independent) dona lloc a una gran modificació en el resultat(solució).

Ben condicionat: quan els errors de la matriu de coeficients A i dels vector terme independent b produeixen en la solució un error del mateix ordre

Mal condicionat: quan els errors de la matriu de coeficients A i dels vector terme independent b produeixen en la solució un error d'ordre superior en al de les dades

Mètode Gauss per a resoldre sistemes. Eficiència: 2 fases. (files -eq, columnes – incògnites)

1a: consisteix en modificar el sistema d'equacions per arribar a un sistema triangular superior.(multiplicar fila per un nombre no nul, substituir una fila per una combinació lineal de les altres, permutar files/columnes

2a: resol el sistema triangular superior obtingut en la 1a fase

Aplica sobre la matriu ampliada i converteix la matriu en una matriu triangular superior. Es redueix a triangular superior en $n-1$ passos si A té n files
Nombre de divisions és: $n-k$, i per cada fila són: $n-k$ productes i sumes.
En total: $(n-k)*(n-k+1)$.

Pivotar. Estratègies. És necessari implementar estratègies de pivotament en la resolució de sistemes d'equacions lineals
Pivot és 0: es busca la primera fila per solta que tingui valor no nul i intercanviem files
Pivot proper a 0: Pivot parcial/pivot parcial escalat

Sense pivot: Aquest mètode és el més simple, i és base a tots els altres mètodes directes. El propòsit d'aquest mètode és obtenir una matriu triangular superior. Un cop obtinguda aquesta matriu, es realitza un rebuig regressiu de les variables, per obtenir els seus valors de solució.

No s'intercanvien ni files ni columnes, només es fan operacions elementals.

Si es divideix aquest mètode per etapes, cada etapa busca convertir tots els valors que estiguin per sota de l'element de la diagonal a zero (0), fent una resta entre la fila on obtindrem zero, i la fila amb l'element a la diagonal.

La tècnica de pivotament parcial s'utilitza per **evitar errors d'arrodoniment** que es podrien produir en dividir cada entrada d'una fila per un valor de pivot que és relativament petit en comparació amb les entrades de fila restants.

Mètode compacte de resolució de sistemes. Cita exemples: **Treballen només amb la matriu A i la presenten com $A=BC$ on B, C són matrius més fàcils d'invertir (nombre d'operacions)**. Exemples:

- Factorització **LU**
- Factorització **Txoleski**
- Factorització **QR**

Factorització LU. Sempre es pot obtenir? Una matriu A , regular admet factorització LU si i només si totes les matrius A_i , $i=1, \dots, n$ són regulars

Teoremes de convergència per mètode iteratius: Hi ha dos teoremes.

Teorema I

Si A és no singular, definim $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \iff \lim_{k \rightarrow \infty} r^{(k)} = 0.$$

Teorema II

El mètode iteratiu $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + c$ és convergent a la solució x^* per qualsevol $x^{(0)} \iff \rho(B) < 1$.

Vector residu: $r^k = b - Ax^k$.

Mètode iteratiu de resolució de sistemes d'equacions lineals: Són mètodes que construeixen una successió de vectors convergents a la solució exacte amb un nombre finits d'operacions en cada iteració, si no fos pels errors d'arrodoniment acumulats i les possibles imprecisions en el coneixement inicial de la matriu A i el vector b . Adients per a sistemes lineals d'ordre alt

Mètodes iteratius: Mètode Jacobi. Mètode Gauss-Seidel. Mètode de SOR

Mètode de Jacobi. Matrius del mètode de Jacobi: El mètode Jacobi es basa en la resolució de cada variable localment respecte a les altres variables. Si A és diagonal dominant estricta el mètode és convergent

Mètode de Gauss-Seidel. Matrius del mètode de Gauss-Seidel: El mètode Gauss-Seidel és com el mètode de Jacobi, però usa valors actualitzats tan aviat com estiguin disponibles. Si A és diagonal dominant estricta el mètode és convergent i si A és simètrica definida positiva, el mètode és convergent

Precondicionament: Es pot millorar la convergència i l'estabilitat de la majoria de mètodes transformant el sistema lineal per tenir un espectre més favorable. La transformació es realitza aplicant una segona matriu, anomenada matriu preconditionadora, al sistema d'equacions. El preconditionador ideal (A^{-1}) transforma la matriu de coeficients A en una identitat.

Sistemes sobredeterminats. Equacions normals. Mètode dels mínims quadrats: El sistema $Ax=b$ no té solució llavors busquem x tal que Ax sigui la millor aproximació de b (pel mètode de mínims quadrats). Si x és la solució del sistema d'equacions normals, $\|b - Ax\|_2 = \min \|b - Ax\|_2$. Equacions normals, solució per factorització i el residu mínim

Valors i vectors propis: Per analitzar models amb oscil·lacions i ressonàncies. Page Rank.

Valors propis: Els elements de la diagonal de $T = U^{-1}AU$ són els valors propis de la matriu A

Els vectors propis són conjunts d'elements que mitjançant la multiplicació d'una constant qualsevol, són equivalents amb la multiplicació de la matriu original i els conjunts d'elements.

Mètode de la potència: Només proporcionen una parella valor propi-vectori propi. Es poden modificar per donar totes les parelles valor-vector propi d'una matriu

Mètode QR: Qualsevol matriu quadrada admet descomposició QR, $A=QR$ amb Q ortogonal i R triangular superior. Ens permet obtenir tots els valors propis en un sol algorisme

Valors singulars: Les n arrels quadrades positives dels valors propis no negatius de $A^T A$

Matriu Pseudoinversa: Sigui A una matriu $m \times n$, la pseudoinversa de Moore-Penrose, A^+ és la única matriu $n \times m$ tal que: $AA^+A = A$, $A^+AA^+ = A^+$

A^+ es pot calcular a partir de la descomposició en valors singulars de la matriu A

TEMA 3. Equacions no lineals

Mètode de la bisecció: el mètode de la bisecció és un algorisme de cerca d'arrels d'una funció contínua en un interval. L'algorisme consisteix en dividir repetidament l'interval en dos subintervals i seleccionar el que conté l'arrel, fins a trobar l'arrel o una aproximació d'aquesta. Es fa servir el teorema de Bolzano. Punt mig interval: $m = (a+b)/2$ i el criteri d'aturada: $|b-a|/2^{(n+1)} < \text{tolerància}$

Mètode de la tangent: S'escull un valor de l'abscissa raonablement pròxim a l'autèntic zero. En aquest punt, es reemplaça la corba per la seva tangent, i es calcula el zero d'aquesta recta tangent. Aquest zero, normalment, és més pròxim al zero de la funció, que el valor inicial. Aquest procés es reitera, fins a arribar a una aproximació que es dona per bona. En el cas de la gràfica, a partir de x_0 s'anirà trobant la successió x_1, x_2, \dots fins a arribar a un cert valor que es donarà com a solució de α . Podria ser que no ens convergís per una mala elecció del punt inicial.

Mètode de la secant: és un algorisme de resolució numèrica d'equacions que fa servir una successió de solucions d'equacions lineals que corresponen a rectes secants a l'equació original per tal de trobar una solució aproximada d'una funció f . Es pot pensar en el mètode de la secant com una aproximació en diferència finita del Mètode de Newton.

Mètodes iteratius del punt fix: El procediment comença amb una estimació o conjectura inicial de x , que és millorada per iteració fins a assolir la convergència. Perquè convergeixi, la derivada (dg/dx) ha de ser menor que 1 en magnitud (almenys per als valors x que es troben durant les iteracions). La convergència serà establerta mitjançant el requisit que el canvi en x d'una iteració a la següent no sigui més gran que alguna petita quantitat ϵ .

Teorema de convergència

Conceptes pràctica: tol_x i tol_f

Instruccions per la parada dels mètodes iteratius. Criteris d'stop: tol_x i tol_f

Ordre de convergència d'un mètode iteratiu

Ordre de convergència dels mètodes presentats:

Punt fix: lineal si $|g'(x)| < 1$,

Almenys quadràtica del mètode newton

Almenys superlineal del mètode de la secant $(\log(1+\sqrt{5}))/2$

Mètodes per accelerar la convergència:

Aitken: El procés Δ^2 d'Aitken és un mètode d'acceleració de la convergència i, en particular, un cas de transformació no lineal d'una successió. si i només si, convergent cap a un punt fix, la convergència és quadràtica. En aquest cas, la tècnica es coneix com a mètode de Steffensen.

Steffensen: El mètode de Steffensen es pot considerar com una combinació del mètode de punt fix i del mètode d'Aitken. El mètode de Steffensen presenta una convergència ràpida i no requereix, com en el cas del mètode de Newton, l'avaluació de cap derivada. A més, presenta l'avantatge addicional que el procés d'iteració només necessita un punt inicial. Un altre avantatge del mètode de Steffensen és que -igual que el de Newton- té convergència quadràtica. És a dir, ambdós mètodes permeten trobar les arrels d'una funció f "ràpidament" - en aquest cas ràpidament significa que en cada iteració, el nombre de dígitos correctes en la resposta es duplica. Però la fórmula per al mètode de Newton requereix l'avaluació de la derivada de la funció, el mètode de Steffensen no, per això aquest últim pot ser programat per a una funció genèrica, mentre que la funció compleixi la restricció esmentada anteriorment.

Mètodes per a sistemes d'equacions no lineals: Mètode la Iteració simple

El mètode de la iteració simple

O el mètode del punt fix

Transformen $F(\mathbf{z}) = 0$ com $\mathbf{z} = G(\mathbf{z})$, el mètode és

$$\mathbf{z}^{(k+1)} = G(\mathbf{z}^{(k)}) \quad (2)$$

per $\mathbf{z}^{(k)}$ indiquem el vector d'iteració k -èssim.

Algorisme computacional

Donats \mathbf{z}^0 i $tol = \eta > 0$ l'algorisme és:

fins que

$$\mathbf{z}^{(k+1)} = G(\mathbf{z}^{(k)})$$

$$\|\mathbf{z}^{(k+1)} - \mathbf{z}^{(k)}\| < \eta \quad \text{i} \quad \|F(\mathbf{z}^{(k+1)})\| < \eta$$

La convergència condicionada a $\|J_G(\alpha)\| < 1$.



Mètode de Newton:

Mètode de Newton

Si F és diferenciable amb contínuïtat, el mètode és

$$\mathbf{z}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)} - (J_F(\mathbf{z}^{(k)}))^{-1} \cdot F(\mathbf{z}^{(k)})$$

per $\mathbf{z}^{(k)}$ indiquem el vector d'iteració k -èssim.

Algorisme computacional

Donats x^0 i $\eta > 0$ l'algorisme és:

$$\begin{cases} (J_F(\mathbf{z}^{(k)})) \cdot \mathbf{w}^{(k)} = -F(\mathbf{z}^{(k)}) \\ \mathbf{z}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k)} + \mathbf{w}^{(k)} \end{cases}$$

fins que

$$\|\mathbf{z}^{(k+1)} - \mathbf{z}^{(k)}\| < \eta \quad \text{i} \quad \|F(\mathbf{z}^{(k+1)})\| < \eta$$

Variants del mètode de Newton

Es redueix el cost computacional de cada iteració contra l'ordre de convergència.

- **Newton modificat.** Es fixa la matriu $J_F(\mathbf{z}^{(k)})$ per un nombre constant d'iteracions.
- **Mètode de Jacobi.** La matriu $J_F(\mathbf{z}^{(k)})$ es substitueix per una matriu diagonal, amb la diagonal de $J_F(\mathbf{z}^{(k)})$. Matriu $D_F(\mathbf{z}^{(k)})$.
- **Mètode de Gauss-Seidel.** La matriu $J_F(\mathbf{z}^{(k)})$ es substitueix per la matriu triangular inferior de $J_F(\mathbf{z}^{(k)})$. Matriu $G_F(\mathbf{z}^{(k)})$.
- **Mètode de sobrerelaxació o SOR.** Per $\omega = 1/(1 + \rho)$
$$\mathbf{z}^{(i+1)} = \mathbf{z}^{(i)} - (\rho \cdot D_F(\mathbf{z}^{(i)}) + G_F(\mathbf{z}^{(i)}))^{-1} \cdot F(\mathbf{z}^{(i)})$$

TEMA 4. Interpolació polinòmica

Polinomi interpoladors. Concepte. Nodes d'interpolació: La interpolació és un recurs de primer ordre dins del camp de l'aproximació de funcions. Es pot substituir una expressió molt costosa (per processar-la) per una més senzilla: polinomis.

Les $n+1$ parelles $\{x_0, y_0\}, \{x_1, y_1\}, \dots, \{x_n, y_n\}$ reben el nom de nodes o nusos. Aquests nodes construeixen la funció continua f que representa la funció que hi ha amagada darrere aquest conjunt de nodes.

Donats els nodes volem determinar els $n+1$ coeficients del polinomi de grau n de tal manera que passi per tots els punts de suport $\{x_i, y_i\}$. Les condicions donen lloc a un sistema lineal de $n+1$ equacions i de $n+1$ incògnites. El determinant del sistema s'anomena de Vandermonde

Existència i unicitat del polinomi interpolador: Teorema: La solució del problema existeix i és única si tots els nodes x_i són diferents

Interpolació polinomial, càlcul del polinomi interpolador: El mètode la fórmula de Lagrange és una manera d'obtenir el polinomi interpoladors dels $n+1$ nodes (la rutina `polyinterp` de matlab retorna el valor del polinomi interpolador i fa ús de la fórmula de Lagrange). El mètode de Newton de diferències dividides és una altra forma d'obtenir el polinomi interpolador dels $n+1$ punts

Interpolació inversa

Suposem coneguts (x_k, f_k) les dades corresponents a una funció $f(x)$ i volem trobar una aproximació del valor de x tal que $f(x) = c$, on c és un valor donat.

El que farem és resoldre l'equació $x = g(c)$ on g és la funció inversa de f . Llavors, interpolarem aquesta funció $g(y)$ i l'avaluarem a $y = c$, és a dir, si seguim el mètode de Newton posarem a la primera fila els valors f_j i en la segona els valors x_j i procedirem de la mateixa manera.

Interpolació en abscisses equiespaiades. Interpolació en abscisses de Tchebixev: Ens interessa escollir els punts de manera que s'obtingui el mínim error possible, i per això farem servir els polinomis de Tchebixev. Els nodes de tchebixev no són equiespaiats i tene la propietat $w(x)$ és mínim en l'interval $[-1, 1]$.

Els nodes d'interpolació de Tchebixev són numèricament estables i permeten interpolar la funció de Runge amb errors propers a l'epsilon de la màquina. Aquest mètode consisteix, en resum, en utilitzar una distribució de nodes més densa en els extrems dels intervals d'interpolació. Això es fa de la següent manera: suposem que volem interpolar una funció amb $n+1$ nodes. Aquests nodes els trobarem de la següent manera: $x_j = \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{j}{n}\right)$, $j = 0, 1, \dots, n$. Com es veu al gràfic de l'esquerra, aquesta distribució dels nodes permet arribar a errors de $1e-15$ (és a dir, molt propers a l'epsilon de la màquina) utilitzant 175 nodes. Des d'aquest punt, veiem que augmentar el nombre de nodes amb prou feines augmenta l'error de la interpolació. Els nodes de Chebyshev són, per tant, numèricament estables.

Fenomen de Runge. Error en la interpolació polinòmica en abscisses equiespaiades: El fenomen de Runge és un problema que apareix en la interpolació polinòmica de funcions quan s'utilitzen un alt nombre de nodes. És un resultat important perquè demostra que no sempre augmentar el nombre de nodes d'una interpolació millora la precisió d'aquesta, la qual cosa promou la creació de dos camins diferents en l'anàlisi numèrica, la interpolació no equiespaiada i la interpolació per splines.

En definitiva, arribem a la conclusió que la interpolació equiespaiada és numèricament inestable. Cal, doncs, trobar mètodes alternatius per tal de solucionar aquest problema. A continuació explicarem alguns dels remeis més habituals.

Interpolació d'Hermite: Els polinomis cúbics d'Hermite a trossos són els més emprats en computació gràfica.

El polinomi d'Hermite és aquell que interpola una col·lecció de punts i el valor de les seves derivades en els punts que desitgem. És a dir, suposem que tenim (x_k, f_k) i (x_k, f'_k) .

Llavors construïm la mateixa taula que en el mètode de Newton, posant a la primera columna els x_k , escrivint dues vegades el mateix punt si coneixem el valor de la derivada en aquest punt, i a la segona columna els valors de f corresponent a la x de la mateixa fila. És a dir, si coneixem el valor de f en x_0 i el de la seva derivada també, escriurem dues vegades x_0 i al costat de cada un f_0 . Per exemple,

Splines cúbics i ajust de corbes: Una spline cúbica és una corba definida per polinomis de grau 3 amb continuïtat fins la derivada segona.

Ajust de corbes: podem fer un ajust de corbes amb: spline cúbic, polinomi interpolador. Una tècnica per trobar un polinomi per connectar els punts en l'ordre previst consisteix en fer ús d'un paràmetre fent ús dels polinomis de Lagrange. També amb Hermite i spline. Les corbes de Bézier: és una corba paramètrica, que a partir d'uns punts de control permeten a l'usuari controlar les pendent en aquests punts i modelitzar a voluntat. Es poden connectar entre elles amb diverses continuïtats i ampliar-se per definir superfícies en 3D.

B-spline: és una combinació lineal de splines positives amb un suport compacte mínim.

Interpolació polinomial a trossos: Spline: Donats $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n), \dots$ la idea és interpolar cada subinterval $[x_i, x_{i+1}]$ format per cada parell DE NODES PER UN POLINOMI DE GRAU BAIX.

Una spline és una corba definida per polinomis de grau k amb continuïtat fins la derivada $k-1$. Una spline lineal és el cas més simple, els punts a interpolar es connecten per segments de recta. Una spline cúbica

Ajust de dades, i mètodes dels mínims quadrats: Cap mètode d'interpolació és adequat per extrapolar informació de les dades disponibles, és a dir donar valor en punts fora de l'interval on es donen els nodes d'interpolació.