RESUM DE MÈTODES NUMÈRICS I

Mario Vilar

25 de gener de 2022

1 Errors

1.1 Preliminars

Definició 1.1 (Error absolut i relatiu).

- 1. $\Delta a = \overline{a} a$. Ho denotarem per $e_a(\overline{a})$.
- 2. $\frac{\Delta a}{a}$, sempre que $a \neq 0$. Ho escriurem com $e_r(\overline{a})$.

Definició 1.2 (Fita d'error). Una fita d'error (e), relatiu (e_r) o absolut (e_a) , és:

$$\varepsilon(\overline{a}) \iff |e(\overline{a})| \le \varepsilon(\overline{a}).$$
 (1.1)

Propietat 1.3 (Operacions aritmètiques dels errors).

$$\begin{aligned} e_{a}(x+y) &= (\overline{x}+\overline{y}) - (x+y) = (\overline{x}-x) + (\overline{y}-y) = e_{a}(x) + e_{a}(y), \\ |e_{a}(x+y)| &= |e_{a}(x) + e_{a}(y)| \le |e_{a}(x)| + |e_{a}(y)| \le \varepsilon_{a}(x) + \varepsilon_{a}(y) \\ \varepsilon_{r}(x+y) &= \left| \frac{x}{x+y} \right| \varepsilon_{r}(x) + \left| \frac{y}{x+y} \right| \varepsilon_{r}(y) \\ \varepsilon_{r}(x-y) &= \left| \frac{x}{x-y} \right| \varepsilon_{r}(x) + \left| \frac{y}{x-y} \right| \varepsilon_{r}(y) \\ e_{a}(xy) &= \overline{xy} - xy = (x + e_{a}(x))(y + e_{a}(y)) - xy = ye_{a}(x) + xe_{a}(y) + e_{a}(x)e_{a}(y) \\ e_{r}(xy) &= \frac{e_{a}(xy)}{xy} = \frac{e_{a}(x)}{x} + \frac{e_{a}(y)}{y} + \frac{e_{a}(x)}{x} \frac{e_{a}(y)}{y} = e_{r}(x) + e_{r}(y) + e_{r}(x)e_{r}(y) \approx e_{r}(x) + e_{r}(y) \\ e_{r}\left(\frac{x}{y}\right) &= e_{r}(x) - e_{r}(y) \implies \left| e_{r}\left(\frac{x}{y}\right) \right| \le |e_{r}(x)| + |e_{r}(y)| \end{aligned}$$

$$(1.2)$$

Teorema 1.4 (Arrodoniment d'operacions aritmètiques). Sigui \odot qualsevol operador aritmètic del conjunt $\{+,-,\cdot,/\}$, assumint que $x \odot y \neq 0$ i x,y no tenen error en la representació:

$$\left| \frac{fl[x \odot y] - x \odot y}{x \odot y} \right| \le \mu \equiv fl[x \odot y] = (x \odot y)(1 \pm \varepsilon), \tag{1.3}$$

 $per \ a \ algun \ \varepsilon \ que \ satisf\`a \ |\varepsilon| \le \mu \ on \ \mu = \tfrac{1}{2}\beta^{-t}.$

Corol·lari 1.5. Existeix un ε tal que $\overline{x} = x(1 + \varepsilon)$, on \overline{x} és el nombre aproximat i x és el valor real.

Corol·lari 1.6. Amb error en la representació d'x, y considerem fl(x), fl(y) i ens queda:

$$fl(x \odot y) = fl(fl(x) \odot fl(y)) = [x(1 \pm \varepsilon_r(x)) \odot y(1 \pm \varepsilon_r(y))](1 \pm \varepsilon_r(x \odot y)) \tag{1.4}$$

1.2 Propagació de l'error

Teorema 1.7 (Teorema del valor mitjà). Si la funció f és derivable, existeix un punt $\xi \mid \xi \in [x, \overline{x}]$ tal que

$$\Delta f = f(\overline{x}) - f(x) = f'(\xi)(\overline{x} - x). \tag{1.5}$$

Teorema 1.8. Si la funció de variable real f és derivable en un entorn $d'x = (x_1, ..., x_n)$ i $\overline{x} = x + \Delta x$ és un punt que hi viu, aleshores existeix un nombre $\theta, 0 < \theta < 1$, tal que

$$\Delta f = f(\overline{x}) - f(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_k} (x + \theta \Delta x) \Delta x_k. \tag{1.6}$$

Demostració. Definim la funció $F(t) = f(x + t\Delta x)$. 1.7 i la regla de la cadena ens dona:

$$\Delta f = F(1) - F(0) = F'(\theta) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_k} (x + \theta \Delta x_k) \Delta x_k. \tag{1.7}$$

Quan volem una estimació pràctica de l'error, les derivades parcials s'avaluen a $x = \overline{x}$. Quan sols hi ha fites d'error a \overline{x} , la fita per Δf es determina amb designaltat triangular. En definitiva:

$$\Delta f = f(\overline{x}) - f(x) \approx \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_k}(\overline{x}) \Delta x_k$$
 (1.8)

$$|\Delta f| \lesssim \sum_{k=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_k}(\overline{x}) \right| \Delta x_k$$
 (1.9)

Figura 1: Fórmula general de la propagació de l'error (1.8) i la fita d'error màxima (1.9).

2 Àlgebra numèrica

2.1 Sistemes triangulars

U és regular si, i només si, tots els elements de la diagonal u_{ii} són diferents de zero. En tal cas, el sistema

$$u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \dots + u_{1n}x_n = c_1$$

$$u_{22}x_2 + \dots + u_{2n}x_n = c_2$$

$$\vdots$$

$$u_{nn}x_n = c_n$$
(2.1)

es pot resoldre amb el següent algorisme de substitució enrere.

Algorisme 2.1 (Algorisme de substitució enrere). Usualment utilitzat per trobar la solució única d'un sistema amb una matriu triangular superior regular, és a dir, aquella en què tots els elements de la diagonal són diferents a 0. S'aplica iterativament el següent:

$$x_{n} = \frac{c_{n}}{u_{n}^{n}},$$

$$x_{i} = \frac{c_{i} - \sum_{j=i+1}^{n} u_{j}^{i} x_{j}}{u_{i}^{i}}, i = n - 1, \dots, 1.$$
(2.2)

De manera totalment anàloga, la matriu L és regular si $l_{ii} \neq 0$, $\forall i$. En tal cas, el sistema

$$l_{11}y_1 = d_1$$

$$l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = d_2$$

$$\vdots$$

$$l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \dots + l_{nn}y_n = d_n$$
(2.3)

es pot resoldre amb l'algorisme de substitució endavant.

Algorisme 2.2 (Algorisme de substitució endavant). Utilitzat per trobar la solució única d'un sistema amb una matriu triangular inferior regular. S'aplica iterativament el següent:

$$y_1 = \frac{d_1}{l_1^1},$$

$$y_i = \frac{d_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_j^i y_j}{l_i^i}, i = 2, \dots, n.$$
(2.4)

Definició 2.3 (Flops). Definim un flop com una operació aritmètica simple amb punts flotants. Estem parlant de suma, multiplicació i divisió. Anteriorment, es considerava com a flop una suma i una multiplicació o bé una divisió.

Figura 2: Nombre d'operacions en els dos algorismes de substitucions que hem vist

2.2 Eliminació gaussiana

Procés 2.4 (Eliminació gaussiana). Ens cal assumir que els elements de la diagonal no són nuls i reduïm la matriu:

$$\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_{1}^{(1)} \\
0 & \overline{a}_{2}^{(2)} & \overline{a}_{23}^{(2)} & \cdots & \overline{a}_{2r}^{(2)} & \cdots & \overline{a}_{rn}^{(2)} & \overline{b}_{2}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & \overline{a}_{rr}^{(r)} & \cdots & \overline{a}_{rn}^{(r)} & \overline{b}_{r}^{(r)} \\
0 & 0 & 0 & \cdots & \overline{a}_{r+1,r}^{(r)} & \cdots & \overline{a}_{r+1,n}^{(r)} & \overline{b}_{r+1}^{(r)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & \overline{a}_{nr}^{(r)} & \cdots & \overline{a}_{nn}^{(r)} & \overline{b}_{n}^{(r)}
\end{pmatrix}$$

$$(2.5)$$

on els elements que han variat els identificarem amb \overline{a}^i_j i l'exponent identifica el pas i-èsim d'eliminació. Ara ho farem amb més detall: ens toca suposar novament que $a^{(r)}_{rr} \neq 0$. Per reduir

la columna r els elements $\overline{a}_{ij}^{(r)} \mid r < i \leq n, r < j \leq n$ es transformen en:

$$m_{ir} = \frac{\overline{a}_{ir}^{(r)}}{\overline{a}_{ij}^{(r)}};$$

$$\overline{a}_{ij}^{(r+1)} = \overline{a}_{ij}^{(r)} - m_{ir}\overline{a}_{rj}^{(r)}, j = r+1, \dots, n;$$

$$\overline{b}_{i}^{(r+1)} = \overline{b}_{i}^{(r)} - m_{ir}b_{r}^{(r)};$$

$$(2.6)$$

La fila que s'utilitza per fer zeros a la k-èsima columna s'anomena k-èsima fila de pivot i $\overline{a}_{rr}^{(r)}$ és l'element de pivot. El sistema Ax = b deriva, finalment, en Ux = c.

Proposició 2.5. La transformació d'una matriu $n \times n$ a la seva forma triangular per a un sistema d'n equacions utilitzant l'eliminació gaussiana necessita, aproximadament, de $\frac{2}{3}n^3$ flops.

2.3 Pivotatge

Algorisme 2.6 (Pivotatge parcial). Considerem el pas r-èsim de l'eliminació gaussiana. Agafem la r-èsima columna i busquem, des d' $\overline{a}_{rr}^{(r)}$ fins al final, l'element de major magnitud. Trobem l'índex de fila ν tal que

$$|a_{\nu r}| = \max_{r \le i \le n} |\overline{a}_{ir}^{(r)}|. \tag{2.7}$$

Si $\nu > r$, aleshores les files r i ν s'intercanvien i es procedeix amb l'eliminació gaussiana. Efectivament, amb el pivotatge parcial els m_{ir} satisfan

$$|m_{ir}| = \left| \frac{\overline{a}_{ir}^{(r)}}{\overline{a}_{rr}^{(r)}} \right| \le 1. \tag{2.8}$$

Definició 2.7 (Definida positiva). Una matriu simètrica A és definida positiva si $x^T A x \ge 0$ i és igual a 0 si, i només si, $x = \vec{0}$.

Proposició 2.8. Si els vectors columna de la matriu A són linealment independents, l'eliminació gaussiana amb pivotatge parcial té tots els pivots diferents a zero. Si det $A \neq 0$, aleshores sempre es pot fer eliminació gaussiana amb pivotatge.

2.4 LU

Definició 2.9 (Matriu de permutació simple o transposició). La matriu P_{rs} és obtinguda intercanviant les files r is a la matriu unitària I i té zeros en les posicions (r, r), (s, s), (r, s), (s, r).

Observació 2.10. La multiplicació PA dona una permutació de les files en A. La corresponent permutació de les columnes d'A s'obté multiplicant P^T per la dreta, AP^T .

Proposició 2.11. Les matrius de permutació són ortogonals:

$$P^T P = P P^T = I. (2.9)$$

Demostració. Sigui $P=P_aP_b$ el producte de dues matrius de permutació elementals. Sabent que $P_{rs}=P_{rs}^T=P_{rs}^{-1}$, obtenim:

$$P^T = P_b^T P_a^T P_a P_b = I. (2.10)$$

La demostració és similar per ${\cal P}{\cal P}^T$ i per més de dos factors.

Definició 2.12 (Transformació de Gauss). Definim la transformació de Gauss L_k com una matriu triangular inferior que difereix de la matriu unitària solament en la r-èsima columna:

$$\begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & 0 & \cdots & m_{k+1} & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & m_n & 0 & \cdots & 1
\end{pmatrix},$$
(2.11)

on l'element m_i correspon al multiplicador m_{ir} a l'eliminació gaussiana. La transformada de Gauss es pot utilitzar per fer zeros en un vector i és útil per reduir-lo.

Teorema 2.13 (Factorització LU). Tota matriu regular A, $n \times n$, es pot factoritzar en PA = LU, on P és una matriu de permutació, L una matriu triangular inferior unitària i U una matriu triangular superior.

Corol·lari 2.14. Si fixem la sequència de pivotatge (fixem la matriu P), aleshores els factors L, U són únics.

Demostració. El resultat és una conseqüència directa del fet que la descomposició LU és equivalent a eliminació gaussiana aplicada a la matriu PA: si $A = L_1U_1 = L_2U_2$, U_1, U_2 no singulars:

$$L_1 = L_2 U_2 U_1^{-1}, \ L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = \mathbb{I}.$$
 (2.12)

Observació 2.15 (Resolució de sistemes amb LU). Una vegada hem trobat la factorització LU, podem resoldre fàcilment el sistema Ax = b; és equivalent a PAx = LUx = Pb. Definint y = Ux, el sistema es pot resoldre en dos passos:

- 1. resoldre Ly = Pb,
- 2. resoldre Ux = y.

Observació 2.16. Com L, U són ambdós triangulars, la complexitat algorísmica és de l'ordre de $\mathcal{O}(n^2)$ i, en particular, de $2n^2$ flops.

2.5 SPD, LDL^T i Cholesky

Al llarg d'aquesta subsecció també considerarem A, una matriu simètrica i definida positiva.

Teorema 2.17. La factorització LU, A = LU, de qualsevol matriu A simètrica i definida positiva es pot resoldre sense pivotatge. En particular, $A = LDL^T$, on L és una matriu triangular inferior unitària i D és una matriu diagonal amb elements positius a la diagonal.

Lema 2.18. L'element més gran en magnitud d'A és positiu i està a la diagonal principal. Tots els elements que sorgeixen del procés de la descomposició LU d'A sense pivotatge són o bé més petits en magnitud o bé iguals a l'element més gran d'A. En altres paraules:

$$a_{kk} > 0, k = 1, \dots, n \quad i \quad \max_{i,j} |a_{ij}| = \max_{k} \{a_{kk}\}.$$
 (2.13)

Teorema 2.19. Tots els elements generats durant la factorització LDL^T estan fitats en magnitud per l'element més gran d'A.

Corol·lari 2.20. El nombre de flops involucrats en resoldre la factorització LDL^T d'una matriu $n \times n$, simètrica i definida positiva és d'aproximadament $\frac{1}{3}n^3$. Ens cal solament emmagatzemar uns $\frac{1}{2}n^2$ elements de la matriu.

Observació 2.21 (Descomposició LU i matrius simètriques definides positives). En el cas que A sigui simètrica i definida positiva, tenim que $A = LDL^T = LU$ i $U = DL^T$.

Proposició 2.22 (Criteri de Sylvester). Per a matrius definides positives, els elements diagonals $d_{k,k}$ són positius.

Procés 2.23 (Factorització de Cholesky). Els elements a la diagonal a D són positius. Per tant, la matriu

$$D^{1/2} = \begin{pmatrix} \sqrt{d_{11}} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{d_{nn}} \end{pmatrix}$$
 (2.14)

també té elements reals. Obtenim que:

$$A = LDL^{T} = (LD^{1/2})(D^{1/2}L^{T}) = C^{T}C, \ D = D^{1/2}D^{1/2}.$$
(2.15)

La matriu $C = D^{1/2}L^T$ és una matriu triangular superior. Aquesta versió de la factorització LDL^T s'anomena factorització de Cholesky d'A. Si la coneixem, el sistema $Ax = C^TCx = b$ es resol en els següents dos passos:

- 1. resoldre $C^T y = b$,
- 2. resoldre Cx = y.

Observació 2.24. La factorització de Cholesky necessita $\frac{1}{3}n^3$ flops i la complexitat en trobar la solució de cadascun dels sistemes triangulars $C^Ty = b$ i Cx = y és de n^2 flops.

2.6 Matrius banda

Definició 2.25 (Banda i amplada). Una matriu és banda si existeixen $p, q \in \mathbb{N}$ tals que $a_{ij} = 0$, j < i - q, j > i + p. L'amplitud de la banda és el màxim nombre de no nuls en una mateixa fila de la matriu i val w = p + q + 1.

Observació 2.26. Suposem que no necessitem pivotatge i que el sistema tridiagonal és de la forma Ax = f, donat que A és diagonalment dominant. En tal cas, solament ens fa falta anul·lar un únic element per columna durant l'eliminació:

$$m_{k+1,k} = c_{k+1}/a'_k,$$

$$a'_{k+1} = a_{k+1} - m_{k+1,k}b_k,$$

$$f'_{k+1} = f_{k+1} - m_{k+1,k}f_k,$$
(2.16)

on $a'_1 = a_1$ per a k = 1, 2, ..., n - 1. Sense pivotatge, necessitem de 3(n - 1) flops per a la factorització, 5(n - 1) per a les substitucions endavant i endarrere, sumant un total de 8(n - 1) flops i aproximadament uns 8n flops.

Normes matricials 2.30

Observació 2.27. Generalitzant, l'eliminació gaussiana amb pivotatge en aquest tipus de matrius l'amplada de banda d'U pot créixer fins p + q + 1. Igualment, l'amplada de banda d'L es manté en q + 1. Si fem servir eliminació gaussiana sense pivotatge els elements * no es donaran. Així doncs, si A té q elements no nuls per sobre la diagonal i p per sota, les matrius L i U tindran bandes d'amplada $w_L = q + 1$ i $w_U = p + 1$.

2.7 Inversa d'una matriu

Procés 2.28 (Com calcular la matriu inversa). Podem resoldre el sistema AX = Id, on definim I com la matriu unitària amb vectors columna tals que

$$(e_k)_i = \begin{cases} 0, & i \neq k, \\ 1, & i = k. \end{cases}$$
 (2.17)

Suposant que hem trobat A = LU sense pivotatge, aleshores $x_{:k}$, el k-èsim vector columna d' A^{-1} es troba en els dos següents passos:

- 1. resoldre $Ly_{:k} = e_{:k}$,
- 2. resoldre $Ux_{:k} = y_{:k}$.

De forma general, la solució de cadascun d'aquests dos sistemes necessita de $2n^2$ flops, però ens estalviem operacions ja que el vector $e_{:k}$ sols té un element no nul: com que els primers k-1 elements en e_k són zero, els k primers elements de $y_{:k}$ són zero. Essencialment, els elements no nuls a $y_{:k}$ es troben resolent les últimes n-k+1 equacions de les últimes n-k+1 incògnites: necessitem $(n-k+1)^2$ flops. Així, el treball per a conèixer totes les columnes $y_{:k}$ és de

$$\sum_{i=1}^{n} (n-k+1)^2 = \sum_{\nu=1}^{n} \nu^2 \approx \frac{1}{3} n^3.$$
 (2.18)

Malauradament, en el sistema $Ux_{:k} = y_{:k}$ no ens podem estalviar càlculs. Així doncs, el càlcul de la inversa d'una matriu $n \times n$ necessita d'uns $2n^3$ flops.

2.8 Normes matricials

Definició 2.29 (Norma). Sigui E un espai vectorial sobre \mathbb{R} o \mathbb{C} . Una norma a E és una aplicació

$$\parallel \quad \parallel : \quad E \quad \longrightarrow \quad \mathbb{R} \quad (sempre \ a \ \mathbb{R}!)$$

$$v \quad \longmapsto \quad \parallel v \parallel$$

$$(2.19)$$

que compleix

- $1. \|v\| = 0 \iff v = \vec{0},$
- 2. $||kv|| = |k| \cdot ||v||$,
- 3. $||u+v|| \le ||u|| + ||v||$ (designaltat triangular).

|k| indica el valor absolut si $k \in \mathbb{R}$ o bé indica el mòdul si $k \in \mathbb{C}$.

Definició 2.30 (Normes ℓ_p). Definim una norma ℓ_p com

$$||x||_p = (|x_1|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}, \ p \ge 1.$$
 (2.20)

essent aquestes les més utilitzades:

$$||x||_{1} = \sum_{1 \le i \le n} |x_{i}|,$$

$$||x||_{2} = (x_{1}^{2} + \dots + x_{n}^{2})^{\frac{1}{2}} = \sqrt{x^{T}x},$$

$$||x||_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} |x_{i}|,$$

$$(2.21)$$

on la $\|\cdot\|_2$ s'anomena norma euclidiana i $\|\cdot\|_{\infty}$ és la norma màxima.

Definició 2.31 (Error absolut i relatiu en un vector). Siqui \overline{x} una aproximació a un vector x. Donada una norma $\|\cdot\|$ definim:

- 1. l'error absolut, $\|\delta x\| = \|\overline{x} x\|, \delta x \in \mathbb{R}^n$, 2. l'error relatiu, $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = \frac{\|\overline{x} x\|}{\|x\|}$.

Definició 2.32 (Norma matricial). Una norma matricial és una norma en l'espai vectorial $\mathcal{M}_{n,n}$ que sigui multiplicativa; això és, que compleixi

$$||AB|| \le ||A|| \cdot ||B||, \ \forall A, B \in \mathcal{M}_{n,n}.$$
 (2.22)

Definició 2.33 (Norma induïda de la matriu). $Sigui \parallel \cdot \parallel una norma d'un vector. La norma$ induïda de la matriu és

$$||A|| = \sup_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||},\tag{2.23}$$

Lema 2.34.

$$||A|| = \max_{||z||=1} ||Az|| \iff \max_{||z||=1} = ||Ay||, ||y|| = 1.$$
 (2.24)

Lema 2.35.

$$||A||_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} \left\{ \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \right\}.$$
 (2.25)

Lema 2.36. Si ||F|| < 1, la matriu I + F és regular.

Demostració. Raonarem per reducció a l'absurd suposant que I+F és no regular. Aleshores, (I+F)x=0 per algun $x\neq 0.$ Això implica que $\|x\|=\|-Fx\|\leq \|F\|\cdot \|x\|,$ mostrant així que $||F|| \ge 1$, la qual cosa és una contradicció.

Anàlisi d'errors 2.9

Si b és pertorbada la solució al sistema Ax = b s'expressa com $A(x + \delta x) = b + \delta b$.

Definició 2.37 (Nombre de condició). Per a una matriu regular A el nombre de condició és $\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$. Evidentment, depèn de la norma associada: posem $\kappa_{\infty}(A) = \|A\|_{\infty}$ $||A^{-1}||_{\infty}$.

Teorema 2.38. Sigui Ax = b i $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$. Si A és regular i

$$||A^{-1}|| \cdot ||\delta A|| = \kappa(A) \frac{||\delta A||}{||A||} = \tau < 1,$$
 (2.26)

aleshores la matriu $A + \delta A$ també és regular i

$$e_r = \frac{\|\overline{x} - x\|}{\|x\|} \le \frac{\kappa(A)}{1 - \tau} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right).$$
 (2.27)

Preliminars 3.3

Definició 2.39 (Matriu ben condicionada). Anàloga a la definició que vam donar de condicionament anteriorment, diem que una matriu amb un nombre de condició petit és ben condicionada. En canvi, una matriu mal condicionada és aquella que té un nombre de condició gran.

Observació 2.40. És fals que $||A^{-1}|| \leq \frac{1}{||A||}$, el que és cert és que

$$||A^{-1}|| \ge \frac{1}{||A||}. (2.28)$$

Teorema 2.41. [Anàlisi d'errors a LU] Suposem que es troba la solució del sistema $(A+\delta A)\overline{x}=b+\delta b$. Siguin $\overline{L},\overline{U}$ els factors pertorbats de la descomposició LU aplicada a PA. Així, sigui \overline{x} la solució obtinguda per substitució endavant i enrere, respectivament, en els sistemes

$$\overline{L}\overline{y} = Pb, \ \overline{U}\overline{x} = \overline{y}.$$
 (2.29)

Aleshores, \overline{x} és la solució del sistema pertorbat $(A + \delta A)\overline{x} = b$, on

$$\|\delta A\|_{\infty} \le \mu(n^3 + 3n^2)g_n \|A\|_{\infty}, \ g_n = \frac{\max_{i,j,k} |\overline{a}_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}.$$
 (2.30)

Els $\overline{a}_{ij}^{(k+1)}$ són els elements que resulten del k-èsim pas de l'eliminació gaussiana. Si $\tau = \mu \kappa_{\infty}(A)(n^3 + 3n^2)g_n < 1$, essent μ la unitat d'arrodoniment, aleshores:

$$\frac{\|\overline{x} - x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} \le \frac{\tau}{1 - \tau}.$$
(2.31)

3 Interpolació polinòmica

3.1 Preliminars

Definició 3.1 (Interpolació polinòmica). És el procés de determinació d'un polinomi P(x) de grau més petit o igual a n tal que

$$P(x_i) = f_i, \ i = 0, \dots, n. \tag{3.1}$$

Aquest polinomi es pot fer servir per estimar el valor d'f en un punt x, on x és en l'interval format per x_0, \ldots, x_n . Quan f_k sigui el valor d'una funció f en x_i , parlarem d'interpolació polinòmica de la funció f en les abscisses d'interpolació x_i .

Teorema 3.2 (Existència i unicitat del polinomi interpolador). Siguin x_0, \ldots, x_n coeficients aleatoris i diferents. Per a valors arbitraris f_0, \ldots, f_n existeix un únic polinomi P de grau més petit o igual a n que interpola.

Teorema 3.3 (Error del polinomi interpolador). Sigui $f \in C^{n+1}(\langle x, x_0, \dots, x_n \rangle)$, és a dir, una funció amb n+1 derivades contínues en l'interval format pels punts x, x_0, \dots, x_n . Si P_n és el polinomi únic de grau $\leq n$, satisfà que:

$$P(x_i) = f_i = f(x_i), \ i = 0, 1, \dots, n$$

$$f(x) - P(x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta(x))}{(n+1)!} (x - x_0) \cdots (x - x_n),$$
(3.2)

per a $\zeta(x)$ en l'interval $\langle x, x_0, \dots, x_n \rangle$.

Notació 3.4. $f_0 = f(x_0), f_1 = f(x_1)$. A més:

- 1. R_X : error en l'argument x de la interpolació;
- 2. R_{XF} : errors en els valors de f_0 i f_1 ;
- 3. R_T : l'error de truncament donat per l'aproximació d'f amb una recta;
- 4. R_C: d'errors d'arrodoniment durant la computació.

3.2 Interpolació lineal

Teorema 3.5. Sigui f una funció derivable dues vegades en l'interval $[x_0, x_1]$, $x_1 = x_0 + h$. Sigui P(x) el polinomi que interpola els punts $(x_0, f(x_0))$ i $(x_1, f(x_1))$. Per $x_0 \le x \le x_1$ l'error de truncament es pot estimar com:

$$|R_T| = |f(x) - P(x)| \le \frac{h^2}{8} \max_{x_0 \le \zeta \le x_1} |f''(\zeta)|.$$
 (3.3)

Teorema 3.6. Siguin \overline{f}_0 i \overline{f}_1 valors aproximats de f_0, f_1 , respectivament. L'error induït en l'interpolació lineal satisfà:

$$|R_{XF}| \le \varepsilon = \max\{|\overline{f}_0 - f_0|, |\overline{f}_1 - f_1|\}. \tag{3.4}$$

3.3 Interpolació de Newton

Definició 3.7 (Diferència dividida). El k-èsim quocient de diferències (diferència dividida) d'f respecte els punts x_0, \ldots, x_k és donat per:

$$f[x_i] = f(x_i),$$

$$f[x_0, \dots, x_k] = \frac{f[x_1, \dots, x_k] - f[x_0, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_0}.$$
(3.5)

Observació 3.8. Podem construir una taula de diferències dividides de la següent manera:

Teorema 3.9 (Polinomi interpolador de Newton). El polinomi

$$P_n(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \dots (x - x_{n-1}),$$
(3.7)

interpola f en els punts x_0, \ldots, x_n , on el grau de P_n és $\leq n$ i $P_n(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$.

Teorema 3.10 (Fórmula de l'error en la interpolació de Newton). Sigui $f:[a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^{n+1}([a,b]), \{x_0,\ldots,x_n\} \subset [a,b]$ diferents dos a dos, $x \in [a,b]$ i $x \notin \{x_0,\ldots,x_n\}$. Aleshores, existeix $\xi(x) \in \langle x_0,\ldots,x_n,x \rangle$ tal que:

$$f[x_0, \dots, x_n, x] = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}.$$
(3.8)

3.4 Interpolació d'Hermite

Definició 3.11 (Problema d'Hermite). Donats x_i , $0 \le i \le n$ volem les següents condicions d'interpolació:

$$P^{(j)}(x_i) = y_i^{(j)}, \ 0 \le j \le n_i - 1, \ 0 \le i \le m, \tag{3.9}$$

on:

$$\{x_i\}_{i=0}^m \subset \mathbb{R}, \ x_0 < \dots < x_m \ (abscisses \ d'interpolació),$$

$$\{n_i\}_{i=0}^m \subset \mathbb{N}, \ (ordres \ màxims \ de \ derivació \ decrementats \ en \ una \ unitat),$$

$$\{y_i^{(k)}\}, \ i=0 \div m, \ k=0 \div n_i-1, \ (ordenades \ d'interpolació),$$

$$(3.10)$$

i

$$P_n^{(k)}(x_i) = y_i^{(k)}, \ i = 0 \div m, \ k = 0 \div n_i - 1.$$
(3.11)

Si anomenem $n+1=\sum_{i=0}^m n_i$, n serà el grau màxim del grau del polinomi interpolador.

Procés 3.12 (Càlcul del polinomi interpolador d'Hermite). Com que $x_0 < \cdots < x_m$, tenim que $\xi_0 \le \xi_1 \le \cdots \le \xi_n$. El polinomi interpolador d'Hermite és:

$$P_n(x) = f[\xi_0] + f[\xi_0, \xi_1](x - \xi_0) + f[\xi_0, \xi_1, \xi_2](x - \xi_0)(x - \xi_1) + \dots + f[\xi_0, \dots, \xi_n](x - \xi_0) \cdot \dots \cdot (x - \xi_{n-1}).$$
(3.12)

La recurrência de les diferències s'ha de modificar; poden haver-hi arguments repetits.

Teorema 3.13. Siguin $\xi_0 \leq \cdots \leq \xi_m \ m+1 \ punts \ differents$. Aleshores:

$$f[\xi_{i}, \dots, \xi_{i+j}] = \begin{cases} \frac{f[\xi_{i+1}, \dots, \xi_{i+j}] - f[\xi_{i}, \dots, \xi_{i+j-1}]}{\xi_{i+j} - \xi_{i}}, & si \ \xi_{i} \neq \xi_{i+j}, \\ \frac{y_{l}^{(j)}}{j!}, & si \ \xi_{i} = \xi_{i+j} \ per \ l \ tal \ que \ x_{l} = \xi_{i}. \end{cases}$$
(3.13)

Corol·lari 3.14. Si $\xi_i = \xi_{i+j}$, tenim que $\xi_i = \xi_{i+1} = \cdots = \xi_{i+j}$ i, per tant,

$$f[\xi_i, \stackrel{j+1}{\dots}, \xi_i] = \frac{f^{(j)}(\xi_i)}{j!}.$$
 (3.14)

Teorema 3.15 (Error en la interpolació d'Hermite). Sigui $f : [a, b] \longrightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}^{n+1}$, $\{x_0, \dots, x_m\} \subset [a, b]$, $x_0 < x_1 < \dots < x_m$, $\{n_0, \dots, n_m\} \subset \mathbb{N}$, $n_0 + \dots + n_m = n + 1$. Sigui P_n el polinomi interpolador d'Hermite corresponent que interpola en (3.9),

$$P_n^{(k)}(x_i) = f^{(k)}(x_i), \ i = 0 \div m, \ k = 0 \div n_i - 1.$$
 (3.15)

Aleshores, per a tot $x \in [a,b]$ existeix $\xi_x \in \langle x_0, \dots, x_m, x \rangle$ tal que

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \cdot \prod_{i=0}^n (x - x_i)^{k_i}, \ \xi \in \langle x, x_0, \dots, x_n \rangle.$$
 (3.16)

3.5 Interpolació de Lagrange

Definició 3.16 (Polinomi interpolador de Lagrange). El polinomi interpolador de Lagrange de $grau \leq n$, el qual interpola f en x_0, \ldots, x_n és donat per

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x), \tag{3.17}$$

on L_i és el polinomi de grau n que compleix

$$L_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{si } i \neq j, \\ 1, & \text{si } i = j, \end{cases}$$

$$(3.18)$$

i és de la forma:

$$L_i(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} = \frac{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x - x_j)}{\prod_{j=0, j \neq i}^n (x_i - x_j)}.$$
 (3.19)

Teorema 3.17 (Fórmula de l'error en la interpolació de Lagrange). Siguin $f \in C^{n+1}([a,b])$ i $x_0, \ldots, x_n \in [a,b]$ abscisses diferents i $P_n(x)$ el polinomi interpolador de grau $\leq n$ de la funció f en x_0, \ldots, x_n llavors $\forall x \in [a,b]$ existeix $\xi(x)$ tal que:

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0) \cdots (x - x_n).$$
(3.20)

4 Derivació i integració

4.1 Derivació i extrapolació

Proposició 4.1. Sigui $f \in C^{(m+1)}([a,b])$. Donats x_0, \ldots, x_m punts pròxims a x. Si x pertany al conjunt d'abscisses x_0, \ldots, x_m (és a dir, si $x = x_k$ per a algun $k = 0 \div m$), aleshores tenim:

$$f(x_k) - P'_m(x_k) = \frac{f^{(m+1)}(\xi(x_k))}{(m+1)!} \prod_{i \neq k} (x_k - x_i), \tag{4.1}$$

on $\xi(x_k) \in \langle x_0, \dots, x_m \rangle$. Generalitzant per a derivades d'ordre superior:

$$f^{(d)}(x) \simeq d! \cdot f[x_0, \dots, x_d].$$
 (4.2)

Teorema 4.2 (Extrapolació de Richardson). Si $F(h) = F(0) + ch^p + \mathcal{O}(h^r), r > p$, amb p conegut i c desconeguda, independents d'h. Aleshores:

$$F(h) + \frac{1}{q^p - 1}(F(h) - F(qh)) = F(0) + \mathcal{O}(h^r). \tag{4.3}$$

Observació 4.3. Posem $F_1(h) = F(h)$ i calculem:

$$F_{k+1}(h) = F_k(h) + \frac{1}{a^{p_k} - 1} (F_k(h) - F_k(qh)), \ k = 1, 2, \dots, n$$
(4.4)

En aquesta extrapolació, el terme h^{p_k} es cancel·la en l'expansió, de tal manera que:

$$F_{k+1}(h) = F(0) + \overline{a}_{k+1}h^{p_{k+1}} + \overline{a}_{k+2}h^{p_{k+2}} + \cdots$$
(4.5)

4.2 Integració amb Newton-Côtes

Definició 4.4 (Mètode de Newton-Côtes). El mètode de Newton-Côtes es basa en substituir f per un polinomi interpolador i integrar-ho. El polinomi interpola f a $x_i = a + ih$, $i = 0 \div n$; $h = \frac{b-a}{n}$.

 $P_n(x)$ de grau $\leq n$ és determinat tal que $P_n(x_i) = f(x_i), i = 0 \div n$. Obtenim:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{b} P_{n}(x)dx + R_{T}.$$
(4.6)

Proposició 4.5 (Error de les fórmules d'integració interpolatòria).

$$f \in \mathcal{C}^{(n+1)}([a,b]) \implies R_T = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} (x-x_0) \cdots (x-x_n) dx, \ \xi(x) \in (a,b).$$
 (4.7)

4.3 Integració amb trapezis

Definició 4.6 (La regla del trapezi). És la fórmula dels trapezis de Newton-Côtes per a n = 1. L'aproximació de f per la línia de punts $(x_0, f(x_0))$ i $(x_1, f(x_1))$: la integral s'aproxima, doncs, per l'àrea del trapezi:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + R_T \simeq \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)). \tag{4.8}$$

Teorema 4.7 (Error amb la regla simple dels trapezis). L'error de truncament R_T és

$$R_T = \frac{1}{2}h^3 f''(\xi(x_0 + \hat{t}h)) \int_0^1 t(t-1)dt = -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi(x_0 + \hat{t}h)), \ x_t = x_0 + th. \tag{4.9}$$

Definició 4.8 (Regla composta dels trapezis).

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \sum_{i=1}^{m} \frac{h}{2} (f(x_{i-1} + f(x_i))) + R_T, \tag{4.10}$$

Teorema 4.9 (Error de la regla composta dels trapezis). Sigui $f \in C^2([a,b])$ i $\xi \in (a,b)$ un punt. Es compleix:

$$R_T = -\frac{b-a}{12}f''(\xi)h^2. \tag{4.11}$$

Teorema 4.10 (Teorema del valor mitjà del càlcul integral). Si la funció φ és contínua i la funció ϕ és contínua i no canvia de signe en l'interval [a,b], aleshores existeix un punt \hat{x} dins l'interval tal que

$$\int_{a}^{b} \varphi(x)\phi(x)dx = \varphi(\hat{x}) \int_{a}^{b} \phi(x)dx, \ \hat{x} \in (a,b).$$

$$(4.12)$$

5.2 Zeros

4.4 Integració amb Simpson i Romberg

Teorema 4.11 (Regla de Simpson). Es compleix que

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = S(h) + R_{T},$$

$$S(h) = \frac{h}{3}(f_{0} + 4f_{1} + 2f_{2} + 4f_{3} + \dots + 2f_{m-2} + 4f_{m-1} + f_{m}),$$
(4.13)

on m és un nombre natural parell, $h=\frac{b-a}{m}$ i $f_j=f(a+jh)$. Si $f^{(4)}$ és contínua, es dona que

$$R_T = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\eta), a < \eta < b.$$
(4.14)

Teorema 4.12 (Fórmula d'Euler-Maclaurin). Si $f \in C^{2k+2}([a,b])$, aleshores es compleix que:

$$T(h) = \int_{a}^{b} f(x)dx + a_{1}h^{2} + a_{k}h^{2k} + \mathcal{O}(h^{2k+2}), \tag{4.15}$$

on els coeficients a_1, \ldots, a_k són independents d'h.

Procés 4.13 (Mètode de Romberg). Quan 4.12 se satisfà, podem usar l'extrapolació de Richardson: posem $T_1(h) = T(h)$ i suposem que hem calculat $T_1(2h), T_1(4h), \ldots$ En tal cas, els valors calculats usant que

$$T_{r+1}(h) = T_r(h) + \frac{T_r(h) - T_r(2h)}{2^{2r} - 1}, \ r = 1, 2, \dots, k$$
 (4.16)

satisfan

$$T_r(h) = I + R_T, \quad I = \int_a^b f(x)dx, \ R_T = \begin{cases} \mathcal{O}(h^{2r}), \ r \le k+1, \\ \mathcal{O}(h^{2k+2}), \ r > k+1. \end{cases}$$
 (4.17)

5 Zeros

5.1 Mètode de la bisecció

Definició 5.1 (Mètode de la bisecció). Si f(m)f(b) > 0, aleshores l'arrel es troba en el subinterval [a, m]; altrament, es troba en [m, b]. Aquest procés de divisió es pot repetir successivament fins arribar a la solució.

Proposició 5.2. Sigui $f:[a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ contínua amb $f(a)f(b) \leq 0$ i suposem que apliquem l'algorisme de la bisecció. Llavors, $\forall i = 1, 2, 3, \ldots$ es dona que:

$$\exists \alpha \in I_i : f(\alpha) = 0, |p_i - \alpha| \le \frac{b - a}{2^i},$$
 (5.1)

on p_i és una aproximació d' α .

5.2 Mètode de Newton-Raphson

Definició 5.3 (Mètode de Newton-Raphson).

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \ k = 0, 1, \dots$$
 (5.2)

5.3 Mètode de la secant

Definició 5.4 (Mètode de la secant).

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \ k = 1, 2, \dots$$
(5.3)

5.4 Mètodes de punt fix

Lema 5.5. Prenem $x_0 \in [a,b]$ i $x_{i+1} = \varphi(x_i)$, suposem $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subseteq [a,b]$ i que existeix $\alpha := \lim_{k \to \infty} x_n$. Aleshores $\varphi(\alpha) = \alpha$.

Teorema 5.6 (Teorema del punt fix). Posem \mathcal{I} un interval al voltant d' α , tal que:

$$\mathcal{I} = \{ x \in \mathbb{R} \mid |x - \alpha| \le \delta \}. \tag{5.4}$$

Suposem que la funció φ té un punt fix α i que $|\varphi'(x)| \leq m < 1$, $\forall x \in \mathcal{I}$. Si $x_0 \in \mathcal{I}$, aleshores:

- 1. $x_k \in \mathcal{I}, k = 1, 2, \ldots,$
- 2. $\lim_{k\to\infty} x_k = \alpha$,
- 3. α és la única arrel en \mathcal{I} de l'equació $x = \varphi(x)$.

Les iteracions d'un mètode de punt fix es poden representar en una gràfica amb les corbes $y = \varphi(x)$ i y = x. De la següent figura se segueix que el cas crític és $|\varphi'(x)| = 1$, convergència per $|\varphi'(x)| < 1$ i divergència per $|\varphi'(x)| > 1$:

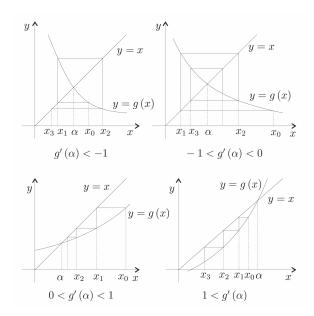


Figura 3: Tipus de comportament de $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ al voltant d'un punt fix.

Teorema 5.7. Es dona que:

$$|x_k - \alpha| \le \frac{\lambda^n}{1 - \lambda} |x_1 - x_0|,$$

$$|x_k - \alpha| \le \frac{\lambda^n}{1 - \lambda} |x_{k+1} - x_k|.$$
(5.5)

5.5 Zeros

5.5 Ordre de convergència

Definició 5.8 (Ordre de convergència). Siguin $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ una successió que convergeix a α . L'ordre de convergència p és el major nombre positiu tal que:

$$\lim_{k \to \infty} \frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|x_k - \alpha|^p} = C, \quad 0 < C < \infty, \tag{5.6}$$

on C és una constant asimptòtica de l'error. Per a p=1 i p=2 la convergència és lineal o quadràtica, respectivament. Si es compleix

$$|x_{k+1} - \alpha| = \mathcal{O}(|x_k - \alpha|^p), \ k \to \infty, \tag{5.7}$$

direm que la convergència és d'ordre almenys p.

Proposició 5.9. Sigui $\varphi : [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$, $\varphi \in \mathcal{C}^p([a,b])$ i $\alpha \in (a,b)$ tal que $\varphi(\alpha) = \alpha$. Es compleix: 1. Suposem $\varphi^{(j)}(\alpha) = 0$, $j = 1 \div p - 1$, és a dir,

$$\varphi'(\alpha) = \varphi''(\alpha) = \dots = \varphi^{(p-1)}(\alpha) = 0; \tag{5.8}$$

amb $|\varphi^{(p)}(\alpha)| < 1$ si p = 1. Aleshores, la funció d'iteració φ dona lloc a un mètode iteratiu d'ordre almenys p per trobar α .

2. Si, a més, imposem $\varphi^{(p)}(\alpha) \neq 0$, l'ordre del mètode iteratiu donat per φ és exactament p, amb constant asimptòtica de l'error:

$$C = \frac{|\varphi^{(p)}(\alpha)|}{p!}. (5.9)$$

Corol·lari 5.10. Sigui $\varphi \in \mathcal{C}^k([a,b])$, $k \geq p$. Es dona que $\{x_k\}_n \to \alpha$ amb ordre p si, i només si, $\varphi^{(p)}(\alpha) \neq 0$ i $\varphi^{(j)}(\alpha) = 0$ per a $j = 1, \ldots, p-1$.