Informàtica Aplicada a la Química.

Si el mètode iteratiu simple $g(x) = x + f(x)$ no funciona

En la determinació el valor $x = \xi$ que fa que la funció $f(x)$ s'anul·le, el mètode iteratiu simple calcula la sèrie $x_{i+1} = x_i + f(x_i) = g(x_i)$. La convergència implica que $g(\xi) = \xi$, fet que deriva de que $f(\xi) = 0$.

En un punt intermedi del procés tenim que $x_{i+1} = g(x_i)$. Podem escriure $x_i = \xi + \epsilon_i$, on ϵ_i és l'error en la i-èssima iteració. Desenvolupem en sèrie Taylor:

$$\xi + \epsilon_{i+1} = g(\xi + \epsilon_i) = g(\xi) + \epsilon_i g'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_i^2 g''(\xi) + \ldots = \xi + \epsilon_i g'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_i^2 g''(\xi) + \ldots$$

i.e.,

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i g'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_i^2 g''(\xi) + \ldots$$

$$\rightarrow g'(\xi) \approx \frac{\epsilon_{i+1}}{\epsilon_i}$$

Si volem que $|\epsilon_{i+1}| < |\epsilon_i|$ cal que $|g'(\xi)| < 1$. És a dir que $|1 + f'(\xi)| < 1 \Leftrightarrow -1 < 1 + f'(\xi) < 1 \Leftrightarrow -2 < f'(\xi) < 0$. Per tant, si $f(x)$ té una pendent positiva (o més negativa que -2) el mètode no convergirà.

Qu podem fer en aquests casos? Podem acudir a altres mètodes com ara el de Newton o la bisecció, però podem fer una altra cosa que és definir $g(x) = x - f(x)$. La definició permet iterar com quan usem la definició $g(x) = x + f(x)$ però les condicions de convergència canvien. En efecte, ara la condició $|g'(\xi)| < 1$ implica $|1 - f'(\xi)| < 1 \Leftrightarrow -1 < 1 - f'(\xi) < 1 \Leftrightarrow -2 < -f'(\xi) < 0 \Leftrightarrow 2 > f'(\xi) > 0$. Per tant, sempre que la pendent de $f(x)$ no supere 2 (abans no podia superar 0) tindrem convergència.