

Informàtica Aplicada a la Química.

Sobre el mètode iteratiu simple

En el capítol III de la guia "Informàtica Aplicada a la Química" es mostra gràficament la condició de convergència del mètode iteratiu simple (que el mòdul de la derivada de la funció $g(x) = f(x) + x$ siga menor que 1 en la regió de recerca). Tot seguit donem una versió algebraica d'aquesta condició.

Recordem que el problema plantejat és la determinació el valor x que fa que la funció $f(x)$ s'anul·le. Aleshores, definim una nova funció $g(x) = f(x) + x$, per a la qual el valor x que fa que la funció $f(x)$ s'anul·le es tradueix en que $g(x) = x$. El mètode iteratiu simple consisteix, com es pot trobar llargament explicat en el capítol III de la guia "Informàtica Aplicada a la Química", en definir $x_{i+1} = g(x_i)$ i, a partir d'un valor donat x_0 , trobar iterativament aquell valor x_i que dona compliment a $|x_i - g(x_{i-1})| < \varepsilon$, on ε representa la precisió requerida en la convergència.

Comencem escrivint $g(x_i) = x_{i+1}$ i, a partir d'aquesta definició, l'identitat,

$$g(x_i) - g(x_{i-1}) = x_{i+1} - x_i \quad (1)$$

Desenvolupem $g(x_{i-1})$ en sèrie Taylor al voltant de x_i :

$$g(x_{i-1}) = g(x_i) + (x_i - x_{i-1}) g(x_i)' + \dots \quad (2)$$

Substituint l'equació 2 en l'equació 1 tenim:

$$g(x_i) - [g(x_i) + (x_i - x_{i-1}) g(x_i)'] \approx x_{i+1} - x_i$$

i.e.,

$$g(x_i)' \approx -\frac{x_{i+1} - x_i}{x_i - x_{i-1}}$$

La sèrie convergeix si $|x_{i+1} - x_i| < |x_i - x_{i-1}|$, és a dir si:

$$|g(x_i)'| < 1,$$

com volíem demostrar.

Un altra manera de demostrar-ho podria ser la següent. Partim de que la convergència implica que:

$$|x_{i+2} - x_{i+1}| < |x_{i+1} - x_i|.$$

Atès que $x_{i+1} = g(x_i)$ podem escriure-ho en la forma:

$$|g(x_{i+1}) - g(x_i)| < |x_{i+1} - x_i| \rightarrow \frac{|g(x_{i+1}) - g(x_i)|}{|x_{i+1} - x_i|} \approx |g(x_i)'| < 1.$$

que seria equivalent a allò que hem fet més amunt.