

## Informàtica Aplicada a la Química.

### Comparació del mètode iteratiu simple i el mètode de Newton-Rapson

El problema plantejat és la determinació el valor  $x = \xi$  que fa que la funció  $f(x)$  s'anul·le. En el mètode iteratiu simple calculem la sèrie  $x_{i+1} = x_i + f(x_i) = g(x_i)$ . En el de Newton  $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = g(x_i)$ . En tots dos casos 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  $\epsilon_i$  és l'error en la i-èsima iteració. Desenvolupem en sèrie Taylor:

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

i.e.,

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

En el mètode iteratiu simple  $g'(\xi) = 1 + f'(x_i)$  mentre que en el mètode de Newton  $g'(\xi) = 1 - \frac{g'(\xi)^2 - g''(\xi)g(\xi)}{g'(\xi)^2} = \frac{g''(\xi)g(\xi)}{g'(\xi)^2} = 0$ , perquè  $g(\xi) = 0$  i  $g'(\xi) \neq 0$  (d'altra forma no hi ha convergència possible amb Newton-Rapson). Aleshores, en el mètode de Newton la velocitat de convergència ve controlada pel factor  $g''(\xi) = f''(\xi)/f'(\xi)$ .

Podem extraure una conclusió immediata: Newton-Rapson serà més ràpidament convergent que el mètode iteratiu simple perquè en cada etapa d'aquest l'error és proporcional al quadrat de l'error en l'etapa prèvia  $\epsilon_{i+1} \approx \frac{1}{2} \epsilon_i^2 g''(\xi)$  mentre que en el mètode iteratiu simple és proporcional a l'error en l'etapa prèvia  $\epsilon_{i+1} \approx \epsilon_i g'(\xi)$  (la convergència s'assoleix en aquest cas mercès a que  $|g'(\xi)| < 1$ . Si  $|g'(\xi)| \geq 1$  el mètode no convergeix).