Mètodes Numèrics per Equacions Diferencials Ordinàries

Part III: Mètodes multipàs

Lluís Alsedà
Departament de Matemàtiques
Universitat Autònoma de Barcelona
http://www.mat.uab.cat/∼alseda

23 de desembre de 2025 (versió 2.1)

Universitat Autònoma de Barcelona — Departament de Matemàtiques

Continguts

Introducció i recordatori de terminologia base

Definicions

Recordem que

Els mètodes numèrics per problemes de valor inicial són *equacions en diferències* que permeten calcular una successió d'aproximacions $\{x_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ dels vertaders valors de la solució $\{x(t_k)\}_{k\in\mathbb{N}}$ a partir d'un cert nombre d'aproximacions anteriors *consecutives*
$x_{k-1}, x_{k-2}, x_{k-3}, \ldots, x_{k-q}$.
El nombre $q \geq 1$ s'anomena *nombre de passos del mètode*.

Mètodes d'un pas i mètodes multi-pas

Un mètode numèric per a l'aproximació d'un problema de valor inicial s'anomena *mètode d'un pas* quan el nombre de passos q del mètode és 1.
Quan $q > 1$ el mètode s'anomena *multi-pas*.

Mètodes numèrics per problemes de valor inicial

Definicions

Mètodes explícits i implícits

Es diu que un mètode és *implícit* quan cada aproximació x_k depèn implícitament d'ella mateixa.
El mètodes que no són implícits s'anomenen *explícits*.

Observació

Si llegim atentament la definició del nombre de passos d'un mètode veurem que solament es tenen en compte les aproximacions *anteriors* a x_k.

Recordem que, per a integrar un PVI

$$\begin{cases} \dot{x} = f(t,x), \\ x(t_0) = x_0, \end{cases}$$

a un interval $I = [t_0, t_0 + T]$, fixem un *pas de discretització* h i una successió de *nodes de discretització* $t_k = t_0 + k \cdot h$ amb $k = 1, 2, \ldots, L_h = \left\lfloor \frac{T}{h} \right\rfloor$, i calculem aproximacions $\{x_k\}_{k=0}^{L_h}$ dels vertaders valors de la solució $\{x(t_k)\}_{k=0}^{L_h}$.

Per altra banda recordem que

$$x(t) = x(t^\star) + \int_{t^\star}^{t} f(s, x(s))ds.$$

Llavors, si ja hem calculat $\{x_i\}_{i=0}^{k}$ amb $k \geq q - 1$, tenim

$$x(t_{k+1}) = x(t_{k+1-q}) + \int_{t_{k+1-q}}^{t_{k+1}} f(s, x(s))ds.$$

Ara, aproximem la funció $f(s, x(s))$ a l'interval $[t_{k+1-q}, t_{k+1}]$ pel polinomi interpolador de Lagrange amb punts de suport $f(t_{k+1-q}, x_{k+1-q}), f(t_{k+2-q}, x_{k+2-q}), \ldots, f(t_{k+1}, x_{k+1})$, i integrem el polinomi interpolador usant les fórmules de Newton-Côtes. Tenim,

$$\begin{aligned} x(t_{k+1}) &= x(t_{k+1-q}) + h \sum_{i=k+1-q}^{k+1} A_i f(t_i, x(t_i)) + E_q(h) \\ &\approx x_{k+1-q} + h \sum_{i=k+1-q}^{k+1} A_i f(t_i, x_i), \end{aligned}$$

on els A_i's són els coeficients interpolatoris de Newton-Côtes i $E_q(h)$ és l'error de truncament de Newton-Côtes amb pas h.

Resumint: hem vist que $x(t_{k+1})$ es pot aproximar per expressions lineals respecte de les x_j's i les $f(t_j, x_j)$'s. Això motiva la següent definició

Mètode de Multipàs Lineal

Un *mètode lineal de $q \geq 1$ passos* és de la forma

$$x_{k+1} := \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f(t_{k-j}, x_{k-j}) + h\beta f(t_{k+1}, x_{k+1})$$

amb $\beta, \beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_{q-1}, \alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_{q-1} \in \mathbb{R}$.

Òbviament si $q = 1$ és tracta d'un mètode d'un pas.

D'altra banda, el mètode és implícit si i només si $\beta \neq 0$.

Observació

Recordem la condició $k \geq q - 1$ que implica que, per iniciar un mètode de q passos, és necessiten $k = q - 1$ aproximacions inicials $x_0, x_1, \ldots, x_{q-1}$. En particular, quan $q > 1$, el mètode no es pot inicialitzar solament a partir de la condició inicial $x(t_0) = x_0$.

Per a iniciar un mètode de $q > 1$ passos, es necessita un mètode d'un pas per a generar recursivament x_{j+1} a partir de x_j per $j = 0, 1, \ldots, q - 2$.

O bé, si volem controlar molt bé els errors, un mètode de dos passos per a calcular x_2 a partir d'x_0 i x_1, i un mètode de tres passos per a calcular x_3 a partir d'x_0, x_1 i x_2, i ...

Exemples de mètodes explícits de dos passos

Mètode del punt mitjà

Diferència centrada de primer ordre per a aproximar $\dot{x}(t)$

$$x_{k+1} = x_{k-1} + 2hf(t_k, x_k).$$

Mètode de Simpson

$$x_{k+1} = x_{k-1} + \tfrac{h}{3}\big(f(t_{k-1}, x_{k-1}) + 4f(t_k, x_k) + f(t_{k+1}, x_{k+1})\big).$$

L'exemple següent desenvolupa una variant de l'aproximació de la Pàgina 4 per a obtenir mètodes de multipàs lineals. En particular, justifica la necessitat d'incorporar els termes $\sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j}$ (en comptes d'afegir simplement x_{k+1-q}) a la definició de mètode de multipàs lineal. És un dels més senzills entre els mètodes de multipàs lineals explícits i serveix d'introducció a la família de mètodes *Adams-Bashforth*, que introduirem a continuació.

Exemples de mètodes explícits de dos passos

Variants de la *fàbrica* de mètodes que també donen mètodes lineals

Exemple simulant la deducció d'un mètode d'un pas però obtenim un mètode de dos passos aproximant $f(s, x(s))$ a l'interval $[t_k, t_{k+1}]$ mitjançant el polinomi interpolador amb punts de suport $(t_k, f(t_k, x_k))$ i $(t_{k-1}, f(t_{k-1}, x_{k-1}))$ (no $(t_{k+1}, f(t_{k+1}, x_{k+1}))$)

Tenim,

$$x_{k+1} \approx x(t_{k+1}) = x(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, x(s))ds \approx$$

$$x_k + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(f(t_k, x_k)\frac{s - t_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} + f(t_{k-1}, x_{k-1})\frac{t_k - s}{t_k - t_{k-1}} \right) ds =$$

$$x_k + f(t_k, x_k)\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{s - t_{k-1}}{t_k - t_{k-1}} ds + f(t_{k-1}, x_{k-1})\int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{t_k - s}{t_k - t_{k-1}} ds =$$

$$x_k + \frac{h}{2}\big(3f(t_k, x_k) - f(t_{k-1}, x_{k-1})\big).$$

Mètodes d'Adams-Bashforth

Definició: Els mètodes Adams-Bashfort de q passos

Són mètodes *explícits* de la forma

$$x_{k+1} := x_k + h\sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f(t_{k-j}, x_{k-j}) \quad \text{amb} \quad k \geq q-1,$$

que s'obtenen a partir de

$$x_{k+1} - x_k \approx \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, x(s))ds$$

aproximant $f(s, x(s))$ a l'interval $[t_k, t_{k+1}]$ mitjançant el polinomi interpolador amb punts de suport

$$(t_k, f(t_k, x_k)), (t_{k-1}, f(t_{k-1}, x_{k-1})), \ldots, (t_{k+1-q}, f(t_{k+1-q}, x_{k+1-q}))$$

equiespaiats (és a dir, $t_k = t_0 + k \cdot h$).

Observació

Els mètodes d'Adams-Bashforth són una generalització per a q arbitrari del mètode deduït a la pàgina anterior.

La *fàbrica* dels Adams-Bashforth

Exercici fàcil

Comproveu que el mètode d'Adams-Bashforth d'un pas ($q = 1$) és el mètode d'Euler.

Per definició els mètodes Adams-Bashforth són de la forma:

$$x_{k+1} := x_k + \sum_{j=0}^{q-1} f(t_{k-j}, x_{k-j}) \cdot \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{q-1} \frac{s - t_{k-i}}{t_{k-j} - t_{k-i}} \right) ds\,.$$

Recordem que les integrals de l'expressió anterior s'anomenen *Coeficients de Côtes* i no depenen de l'interval $[t_k, t_{k+1}]$.

La *fàbrica* dels Adams-Bashforth

Efectivament, com que $t_k = t_0 + k \cdot h$ i $s \in [t_k, t_{k+1}]$, podem escriure $s = t_k + t \cdot h$ amb $t \in [0,1]$. Llavors, tenim

$$\beta_j = \frac{1}{h} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{q-1} \frac{s - t_{k-i}}{t_{k-j} - t_{k-i}} \right) ds =$$

$$\frac{1}{h} \int_{t_k}^{t_k+h} \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{q-1} \frac{(t_k + t \cdot h) - (t_k - i \cdot h)}{(t_k - j \cdot h) - (t_k - i \cdot h)} \right) d(t_k + t \cdot h) =$$

$$\int_0^1 \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{q-1} \frac{t + i}{i - j} \right) dt\,.$$

La *fàbrica* dels Adams-Bashforth

Acabem de veure que, efectivament, els *Coeficients de Côtes* $h \cdot \beta_j$ no depenen de l'interval $[t_k, t_{k+1}]$. A la taula següent es donen els valors de β_j per $q = 1, 2, 3, 4, 5$.

q	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
1	1		Mètode d'Euler		
2	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	Aquest és el mètode de la Pàgina 8		
3	$\frac{23}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{5}{12}$		
4	$\frac{55}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{9}{24}$	
5	$\frac{1901}{720}$	$-\frac{2774}{720}$	$\frac{2616}{720}$	$-\frac{1274}{720}$	$\frac{251}{720}$

Exercici

Observeu que $\sum_{j=0}^{q-1} \beta_j = 1$. Demostreu que no és casualitat.

Mètodes d'Adams-Moulton

Definició: Els mètodes Adams-Moulton de q passos

Són mètodes *implícits* de la forma

$$x_{k+1} := x_k + h\beta f\big(t_{k+1}, x_{k+1}\big) + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f\big(t_{k-j}, x_{k-j}\big)$$

amb $k \geq q - 1$, que s'obtenen a partir de

$$x_{k+1} - x_k \approx \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, x(s)) ds$$

aproximant $f(s, x(s))$ a l'interval $[t_k, t_{k+1}]$ mitjançant el polinomi interpolador amb punts de suport $\big(t_{k+1}, f(t_{k+1}, x_{k+1})\big)$, $\big(t_k, f(t_k, x_k)\big)$, $\big(t_{k-1}, f(t_{k-1}, x_{k-1})\big), \dots, \big(t_{k+1-q}, f(t_{k+1-q}, x_{k+1-q})\big)$ *equiespaiats* (és a dir, $t_k = t_0 + k \cdot h$).

La *fàbrica* dels Adams-Moulton

Com abans, els *Coeficients de Côtes* no depenen de l'interval $[t_k, t_{k+1}]$. A la taula següent es donen els valors de β i β_j per $q = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

q	β	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4
0	1			Mètode d'Euler endarrere		
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		Mètode de Crank-Nicolson		
2	$\frac{5}{12}$	$\frac{8}{12}$	$-\frac{1}{12}$			
3	$\frac{9}{24}$	$\frac{19}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{1}{24}$		
4	$\frac{251}{720}$	$\frac{646}{720}$	$-\frac{264}{720}$	$\frac{106}{720}$	$-\frac{19}{720}$	
5	$\frac{95}{288}$	$\frac{1427}{1440}$	$-\frac{133}{240}$	$\frac{241}{720}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{3}{160}$

La *fàbrica* dels Adams-Moulton

I la tira d'exercicis

Exercici raret

Comproveu que el mètode d'Adams-Moulton de *zero passos* ($q = 0$) és el mètode d'Euler endarrere.

Exercici

Comproveu que el mètode d'Adams-Moulton d'un pas ($q = 1$) és el mètode de Crank-Nicolson.

Exercici

Una vegada més, $\beta + \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j = 1$. Demostreu que continua sense ésser casualitat.

Exercici pesadet

Calculeu la taula anterior pel mètode que creieu més convenient (de manera que el càlcul sigui el més eficient possible); encara que sigui fent un programa. Si feu un programa és millor que sigui de càlcul numèric o de càlcul formal?? Tingueu en compte la precisió, ja que els coeficients són racionals "facilets".

La *fàbrica* BDF: *Backward Differentiation Formulae*

Definició: Els mètodes BDF de q passos

Són mètodes *implícits* de la forma

$$x_{k+1} := h\beta f\big(t_{k+1}, x_{k+1}\big) + \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} \quad \text{amb} \quad k \geq q-1,$$

que s'obtenen aproximant

$$f\big(t_{k+1}, x_{k+1}\big) \approx f\big(t_{k+1}, x(t_{k+1})\big) = \dot{x}(t)\big|_{t=t_{k+1}} \approx \frac{d}{dt} P_{x_{k+1},x_k,x_{k-1},\dots,x_{k+1-q}}(t)\big|_{t=t_{k+1}},$$

on $P_{x_{k+1},x_k,x_{k-1},\dots,x_{k+1-q}}(t)$ denota el polinomi interpolador amb punts de suport *equiespaiats*

$$\big(t_{k+1}, x_{k+1}\big), \big(t_k, x_k\big), \big(t_{k-1}, x_{k-1}\big), \dots, \big(t_{k+1-q}, x_{k+1-q}\big).$$

Exercici

Comproveu que el mètode BDF d'un pas és el mètode d'Euler endarrere.

Coeficients dels mètodes BDF

A la taula següent es donen els valors de β i α_j dels mètodes BDF de q passos amb $q = 1, 2, 3, 4, 5, 6$.

q	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	β
1	1		Mètode d'Euler endarrere				1
2	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{3}$					$\frac{2}{3}$
3	$\frac{18}{11}$	$-\frac{9}{11}$	$\frac{2}{11}$				$\frac{6}{11}$
4	$\frac{48}{25}$	$-\frac{36}{25}$	$\frac{16}{25}$	$-\frac{3}{25}$			$\frac{12}{25}$
5	$\frac{300}{137}$	$-\frac{300}{137}$	$\frac{200}{137}$	$-\frac{75}{137}$	$\frac{12}{137}$		$\frac{60}{137}$
6	$\frac{360}{147}$	$-\frac{450}{147}$	$\frac{400}{147}$	$-\frac{225}{147}$	$\frac{72}{147}$	$\frac{-10}{147}$	$\frac{60}{147}$

El mètode BDF de dos passos

Tenim:

$$P_{x_{k+1},x_k,x_{k-1}}(t) = x_{k+1}\frac{\big(t-t_k\big)\big(t-t_{k-1}\big)}{\big(t_{k+1}-t_k\big)\big(t_{k+1}-t_{k-1}\big)} + x_k\frac{\big(t-t_{k+1}\big)\big(t-t_{k-1}\big)}{\big(t_k-t_{k+1}\big)\big(t_k-t_{k-1}\big)} + x_{k-1}\frac{\big(t-t_{k+1}\big)\big(t-t_k\big)}{\big(t_{k-1}-t_{k+1}\big)\big(t_{k-1}-t_k\big)} =$$

$$x_{k+1}\frac{t^2-(t_k+t_{k-1})t+C_{k+1}}{2h^2} - x_k\frac{t^2-(t_{k+1}+t_{k-1})t+C_k}{h^2} + x_{k-1}\frac{t^2-(t_{k+1}+t_k)t+C_{k-1}}{2h^2};$$

i, per tant,

$$\frac{d}{dt}P_{x_{k+1},x_k,x_{k-1}}(t)\big|_{t=t_{k+1}} = \left(x_{k+1}\frac{2t-(t_k+t_{k-1})}{2h^2} - x_k\frac{2t-(t_{k+1}+t_{k-1})}{h^2} + x_{k-1}\frac{2t-(t_{k+1}+t_k)}{2h^2}\right)\Bigg|_{t=t_{k+1}} =$$

$$x_{k+1}\frac{2t_{k+1}-t_k-t_{k-1}}{2h^2} - x_k\frac{2t_{k+1}-t_{k+1}-t_{k-1}}{h^2} + x_{k-1}\frac{2t_{k+1}-t_{k+1}-t_k}{2h^2} =$$

$$x_{k+1}\frac{3h}{2h^2} - x_k\frac{2h}{h^2} + x_{k-1}\frac{h}{2h^2} = x_{k+1}\frac{3}{2h} - x_k\frac{2}{h} + x_{k-1}\frac{1}{2h}.$$

Resumint: el mètode BDF de dos passos

En conseqüència, a partir de la definició (Pàgina 16) s'obté

$$x_{k+1}\frac{3}{2h} - x_k\frac{2}{h} + x_{k-1}\frac{1}{2h} = f\left(t_{k+1}, x_{k+1}\right),$$

que és equivalent a

$$x_{k+1} = \tfrac{2}{3}hf\left(t_{k+1}, x_{k+1}\right) + \tfrac{4}{3}x_k - \tfrac{1}{3}x_{k-1}.$$

Com funcionen els mètodes implícits

Un mètode lineal de $q \geq 1$ passos *implícit* es pot escriure de la forma

$$x_{k+1} = \Psi(x_{k+1}) = \Psi(x_{k+1}; x_k, x_{k-1}, \dots, x_{k+1-q})$$

on

$$\Psi(z) = \Psi(z; x_k, x_{k-1}, \dots, x_{k+1-q}) := \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f\left(t_{k-j}, x_{k-j}\right) + h\beta f\left(t_{k+1}, z\right).$$

Hi ha dues maneres de calcular x_{k+1}:

1. resoldre l'equació $\Psi(z) - z = 0$ amb el Mètode de Newton;
2. usar *iteració directa* per a trobar el punt fix de Ψ: $\Psi(z) = z$.

En la segona estratègia (més fàcil que la primera (si funciona)) la primera pregunta a fer és: quines garanties tenim de la seva convergència?

Com funcionen els mètodes implícits

Suposem que la funció f està definida a un domini Ω i sigui

$$K = \sup_{(t,z)\in\Omega} \left\| D_2 f(t, z) \right\|.$$

Llavors,

La funció Ψ és contractiva per a tot $h < \frac{1}{|\beta| K}$

Conclusió: és suficient de prendre h prou petit i fer iteració directa

Per Teorema del valor mitjà,

$$\left\|\Psi(z) - \Psi(\tilde{z})\right\| = \left\|\nabla\Psi(\xi)\right\| \cdot \|z - \tilde{z}\| \leq h\,|\beta| \left\| D_2 f\left(t_{k+1}, z\right)\Big|_{z=\xi} \right\| \cdot \|z - \tilde{z}\| \leq h\,|\beta|\,K\,\|z - \tilde{z}\|.$$

Per tant, la funció Ψ és contractiva amb constant de contracció $h\,|\beta|\,K < 1$.

Mètodes Predictor-Corrector: Com fer fàcil l'ús de mètodes implícits

Tal com acabem de dir, per a usar un mètode implícit, cal prendre un pas h prou petit i fer iteració directa de la funció Ψ prenent una llavor prou bona de x_{k+1}. *Aquest mètode és molt precís però molt lent*. A més té el ja famós *problema de la llavor*.

L'estratègia *Predictor-Corrector* és la següent:

a. Calcular *una* llavor o, més ben dit, fer una predicció de x_{k+1} usant un mètode multipàs lineal *explícit*;
b. Fer un cert nombre n (fixat a priori) d'iteracions del mètode d'iteració directa mitjançant Ψ, per a *corregir* el valor predit pel mètode explicit.

Això dóna lloc a *esquemes Predictor-Corrector del tipus* PC^n.

Resumint: L'algorisme Predictor-Corrector al complet

Inicialització

0. Prendre un pas h prou petit per assegurar la convergència ràpida de l'iteració directa de la funció Ψ. En funció de la contracció prevista de la funció Ψ decidir un *número màgic n* de *passos de correcció*.

1 2 ••• $q-1$ Per $k = 1, 2, \ldots, q-1$, generar x_k a partir d'x_{k-1} amb un mètode explícit d'un pas d'ordre alt. Alternativament, en cas de gran entusiasme, per a millorar la precisió de les aproximacions generades, es pot usar un mètode de k passos d'ordre alt per a generar x_k a partir d'$x_{k-1}, x_{k-2}, \ldots, x_1, x_0$.

Resumint: L'algorisme Predictor-Corrector al complet

La iteració de l'esquema PC^n

for $k \geq q$ **do**

(k)—0 Predictor Usar un mètode *explícit de q passos* per a generar una aproximació $x_{k+1}^{(0)}$ (o llavor) d'$x_{k+1} \approx x(t_{k+1})$ a partir d'$x_k, x_{k-1}, \ldots, x_{k+1-q}$.

(k)—i $(i = 1, 2, \ldots, n)$ Passos de Corrector Calcular
$$x_{k+1}^{(i)} = \Psi\left(x_{k+1}^{(i-1)}\right)$$
per a *corregir n vegades* l'aproximació $x_{k+1}^{(0)}$.

$(k) \to (k+1)$ Definir $x_{k+1} := x_{k+1}^{(n)}$.

until true(condició de parada**);**

Mètodes Predictor-Corrector: Un exemple

Exemple: comparació de les aproximacions d'$\boldsymbol{x(t)}$ de mètodes implícits i Predictor-Corrector

Considerem el PVI
$$\begin{cases} \dot{x} = x^2, \\ x(0) = 1, \end{cases}$$
que té $x(t) = \frac{1}{1-t}$ com a solució.

Fixarem el pas $h = 0.1$ i compararem els valors d'$x(t_k)$ per $k = 2, 3, 4, 5$, amb els valors aproximats x_k calculats:

- solament amb el predictor,
- amb **PC^1** (és a dir amb el predictor i una iteració del corrector), i
- amb **PC$^\infty$** (on ∞ vol dir que s'ha fet iteració directa fins al final — és a dir fins que es satisfà la condició de parada).

Exemple: per simplicitat usarem *mètodes de dos passos*. Concretament usarem els següents mètodes:

- *Adams-Bashforth com a predictor:*
$$x_{k+1} := x_k + \frac{h}{2}\Big(3f\left(t_k, x_k\right) - f\left(t_{k-1}, x_{k-1}\right)\Big), \text{ i}$$
- *Adams-Moulton (Crank-Nicolson) com a corrector:*
$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{2}\Big(f\left(t_{k+1}, x_{k+1}\right) + f\left(t_k, x_k\right)\Big).$$

Fase d'inicialització: conseqüències de l'ús de mètodes de dos passos

Inicialitzador per a generar
$$x_1 \approx x(h) = \frac{1}{1-h} = \frac{1}{0.9} = 1.\widehat{1},$$
a partir de la condició inicial $x(0) = 1 = x_0$

Com a *inicialitzador* usarem el *mètode de Heun (Ruge-Kutta-2)*:
$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{2}\Big(f\left(t_k, x_k\right) + f\left(t_{k+1}, x_k + h\,f\left(t_k, x_k\right)\right)\Big).$$

Tenim $f(t_0, x_0) = x_0^2 = 1$, $t_1 = t_0 + h = h$ i
$$x_1 = x_0 + \frac{h}{2}\Big(f(t_0, x_0) + f\left(t_1, x_0 + h\,f(t_0, x_0)\right)\Big) = 1 + \frac{h}{2}\left(1 + f(h, 1+h)\right)$$
$$= 1 + \frac{h}{2}\left(1 + (1+h)^2\right) = 1 + h + h^2 + \frac{h^3}{2} = 1.1105.$$

Mètodes Predictor-Corrector: Un exemple

Taula: De comparació de $\mathbf{P}$ amb $\mathbf{PC}^1$ i $\mathbf{PC}^\infty$ pel PVI de la Pàgina 25.
El nombre d'iterats n a $\mathbf{PC}^\infty$ és el de l'estabilització del valor de $x_k := x_k^{(n)}$ amb 16 dígits (amb arrodoniment).
Aquesta és l'aproximació d'$x(t_k)$ que usem per a iterar el càlcul d'x_{k+1}.

k	2	3	4	5
t_k	0.2	0.3	0.4	0.5
$x(t_k)$	1.25	$1.42857142\cdots$	$1.\widehat{6}$	2.0
$\mathbf{P} \to x_k^{(0)}$	$1.245481\cdots$	$1.423163\ldots$	$1.659798\cdots$	$1.990786\cdots$
$\lvert x_k^{(0)} - x(t_k)\rvert$	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$9.2 \cdot 10^{-3}$
$\mathbf{PC}^1 \to x_k^{(1)}$	$1.249721\cdots$	$1.429761\cdots$	$1.670974\cdots$	$2.011352\cdots$
$\lvert x_k^{(1)} - x(t_k)\rvert$	$2.7 \cdot 10^{-4}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$1.1 \cdot 10^{-2}$
$\mathbf{PC}^\infty \to x_k := x_k^{(n)}$	$1.250326\cdots$	$1.430860\cdots$	$1.673209\cdots$	$2.016506\cdots$
n	15	17	19	21
$\lvert x_k^{(n)} - x(t_k)\rvert$	$3.263060 \cdot 10^{-4}$	$2.288707 \cdot 10^{-3}$	$6.543042 \cdot 10^{-3}$	$1.650608 \cdot 10^{-2}$

Mètodes Predictor-Corrector: Un exemple

Comentaris i preguntes en relació a la taula de la pàgina anterior

Comentaris

- Els errors augmenten (tal com ha de ser) en anar d'esquerra a dreta.
- A cada columna l'error de $\mathbf{PC}^1$ és menor que l'error de $\mathbf{P}$ (encara que a la darrera columna és aproximadament igual).
- La fila n augmenta (però no molt) en anar d'esquerra a dreta.

Temes de meditació

1. Perquè l'error és tan gran?
2. Perquè l'error de $\mathbf{PC}^\infty$ és més gran que el de $\mathbf{PC}^1$?

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Error local de truncament

Recordem: Un *mètode lineal de $q \geq 1$ passos* és de la forma

$$x_{k+1} := \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f(t_{k-j}, x_{k-j}) + h\beta f(t_{k+1}, x_{k+1})$$

amb $\beta, \beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_{q-1}, \alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_{q-1} \in \mathbb{R}$.

Definició (Error local de truncament)

Anàloga a la dels mètodes explícits d'un pas

L'*error local de truncament* $\tau(t_{k+1}, h)$ (amb $k \geq q-1$) d'un mètode de multipàs lineal és per definició

$$\tau(t_{k+1}, h) := \frac{1}{h}\Bigg(x(t_{k+1}) - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x(t_{k-j}) - \beta h f\big(t_{k+1}, x(t_{k+1})\big) - h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f\big(t_{k-j}, x(t_{k-j})\big) \Bigg).$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Error global de truncament, Ordre i Consistència

Definició (Error global de truncament)

La quantitat

$$\tau(h) := \max_{k=q,q+1,\ldots,L_h-1} \big|\tau(t_k, h)\big|$$

s'anomena *error global de truncament (o de discretització) del mètode*.

Definició (Consistència i Ordre)

Un mètode lineal de $q \geq 1$ passos s'anomena *consistent* quan l'error global de truncament tendeix a zero amb h:

$$\lim_{h \to 0} \tau(h) = 0.$$

A més, el mètode té *ordre p* si és consistent i

$$\tau(h) = \mathcal{O}(h^p).$$

Definició (Convergència)

Un mètode s'anomena *convergent* si

$$\lim_{m\to\infty} u(t,h_m) - x(t) = 0$$

per tot $t \in [t_0, t_0+T]$, i *convergent d'ordre p* si

$$u(t,h_m) - x(t) = \mathcal{O}(h_m^p).$$

Recordem que, per a cada $t \in [t_0, t_0+T]$ i $m \in \mathbb{N}$, denotem $h_m := \frac{t-t_0}{m}$ i definim els nodes de discretització $t_k := t_0 + kh_m$ per a tot $k \in \{0, 1, 2, \ldots, L_{h_m}\}$.

Per altra banda, per a fer explícit el pas usat en el càlcul d'x_k, denotem l'aproximació x_k d'$x(t_k)$ obtinguda amb pas $h = h_m$ per $u(t_k, h_m)$.

En particular, $t = t_m$ i $u(t,h_m) = u(t_m,h_m)$.

Teorema

Un mètode lineal de $q \geq 1$ passos és consistent si i només si

$$\sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j = 1 \quad i \quad \beta + \sum_{j=0}^{q-1} (\beta_j - j\alpha_j) = 1.$$

Addicionalment, si $x(t) \in \mathcal{C}^{p+1}(I)$ per algun $p \geq 1$, on $x(t)$ és la solució del PVI $\dot{x} = f(t,x); x(t_0) = x_0$; el mètode és d'ordre p si i només si es compleixen les dues igualtats anteriors i, a més,

$$\sum_{j=1}^{q-1} (-j)^\ell \alpha_j + \ell\beta + \ell \sum_{j=1}^{q-1} (-j)^{\ell-1} \beta_j = 1$$

per $\ell = 2, 3, \ldots, p$.

Exercici tediós

Comprovar la consistència i calcular l'ordre de tots els mètodes multipàs deduïts fins ara (Adams-Bashforth i Adams-Moulton fins a 5 passos, i BDF fins a 6 passos).

Demostració.

Desenvolupant $x(t_{k-j})$ i $f\big(t_{k-j}, x(t_{k-j})\big)$ per Taylor tenim:

$$\begin{aligned} x(t_{k-j}) &= x(t_k - jh) = x(t_k) - jh\dot{x}(t_k) + \mathcal{O}(h^2), \text{ i} \\ f\big(t_{k-j}, x(t_{k-j})\big) &= f\big(t_k - jh, x(t_k - jh)\big) \\ &= f\big(t_k, x(t_k)\big) + \mathcal{O}(h) = \dot{x}(t_k) + \mathcal{O}(h). \end{aligned}$$

Ara substituïm aquestes expressions aproximades a l'error local de truncament:

$$\sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x(t_{k-j}) + \beta h f\big(t_{k+1}, x(t_{k+1})\big) + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f\big(t_{k-j}, x(t_{k-j})\big) =$$

$$x(t_k) \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j + h\beta\dot{x}(t_k) + h\dot{x}(t_k) \sum_{j=0}^{q-1} (\beta_j - j\alpha_j) + \mathcal{O}(h^2).$$

Demostració. En conseqüència

$$\tau(t_{k+1},h) := \frac{1}{h}\Big(x(t_{k+1}) - \sum_{j=0}^{q-1}\alpha_j x(t_{k-j}) - \beta h f\big(t_{k+1},x(t_{k+1})\big) - h\sum_{j=0}^{q-1}\beta_j f\big(t_{k-j},x(t_{k-j})\big)\Big) =$$

$$\frac{x(t_k+h)-x(t_k)}{h} + \frac{x(t_k)}{h}\Big(1-\sum_{j=0}^{q-1}\alpha_j\Big) - \beta\dot{x}(t_k) - \dot{x}(t_k)\sum_{j=0}^{q-1}(\beta_j - j\alpha_j) + \mathcal{O}(h).$$

Ara observem que, per tot k,

$$\lim_{h\to 0}\Big(\frac{x(t_k+h)-x(t_k)}{h} - \beta\dot{x}(t_k) - \dot{x}(t_k)\sum_{j=0}^{q-1}(\beta_j - j\alpha_j)\Big) = \dot{x}(t_k)\Big(1-\beta-\sum_{j=0}^{q-1}(\beta_j - j\alpha_j)\Big).$$

Demostració.

Per tant, per tot k, $\lim_{h\to 0}\tau(t_{k+1},h) = 0$ si i només si

$$\sum_{j=0}^{q-1}\alpha_j = 1 \quad \text{i} \quad \beta + \sum_{j=0}^{q-1}(\beta_j - j\alpha_j) = 1.$$

Les condicions per $\ell = 2,3,\ldots,p$ s'obtenen de manera anàloga usant desenvolupaments de Taylor d'ordre superior. ■

Exercici

Feu *al menys* el cas $\ell = 2$ de la demostració del teorema anterior per a veure el perquè de les darreres igualtats de l'enunciat.

Exemple: Determinar els coeficients dels mètodes lineals explícits de 2 passos perquè siguin consistents i d'ordre màxim

El mètode és

$$x_{k+1} := \alpha_0 x_k + \alpha_1 x_{k-1} + h\Big[\beta_0 f\big(t_k,x_k\big) + \beta_1 f\big(t_{k-1},x_{k-1}\big)\Big].$$

Com que tenim 4 coeficients podem provar d'imposar 4 condicions:

Condicions de consistència: $\begin{cases}\alpha_0+\alpha_1 = 1,\\ \beta_0 + (\beta_1-\alpha_1) = 1.\end{cases}$

Condicions per tenir ordre 2: $\Big\{\alpha_1 - 2\beta_1 = 1$

Condicions per tenir ordre 3: $\Big\{-\alpha_1 + 3\beta_1 = 1$

La solució del sistema és

$$\alpha_0 = -4,\qquad \alpha_1 = 5,\qquad \beta_0 = 4 \quad \text{i} \quad \beta_1 = 2.$$

A més, $\alpha_1 - 4\beta_1 = -3 \neq 1$ i per tant, el mètode amb els coeficients anteriors té ordre exactament 3.

Reconsiderem el problema de Cauchy:

$$\dot{x} = -x \qquad \text{amb} \qquad x(0) = 1.$$

La seva solució és $x(t) = e^{-t}$. Recordem que era un exemple senzill de convergència "perfecta" amb mètodes explícits d'un pas.

Aquesta vegada usarem el mètode d'ordre 3 que hem deduït a l'exemple anterior. Per aquest PVI concret el mètode és ($f(t,x) = -x$)

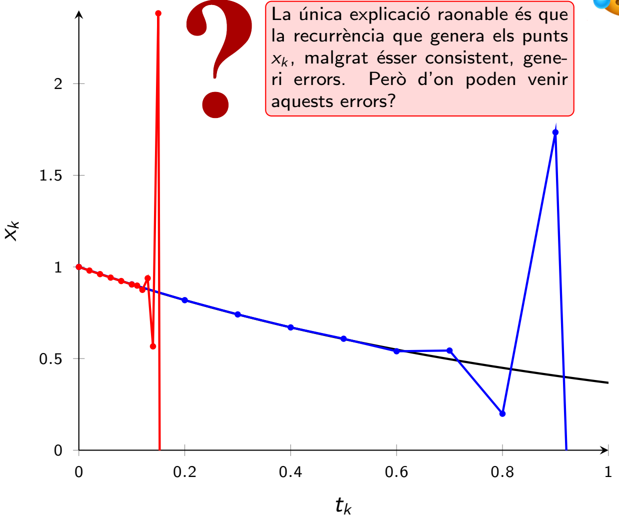
$$\begin{aligned} x_{k+1} &= -4x_k + 5x_{k-1} - h\big[4x_k + 2x_{k-1}\big] \\ &= -4(1+h)x_k + (5-2h)x_{k-1}. \end{aligned}$$

Com que és un mètode de 2 passos necessitem x_0 i x_1 per a inicialitzar-lo. Clarament cal prendre $x_0 = 1$ (condició inicial). Per inicialitzar x_1 farem trampa per a començar , teòricament, en les millors condicions possibles (recordem el desastre de l'exemple dels mètodes Predictor-Corrector) i fixarem $x_1 = e^{-h}$; és a dir usarem la solució (que en escenaris reals no coneixem).

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Atenció: Les coses no són tan idíl·liques com sembla

Tenim un mètode consistent i d'ordre alt que de cap manera convergeix a la solució. I, de fet, disminuir el pas h empitjora la convergència.



La única explicació raonable és que la recurrència que genera els punts x_k, malgrat ésser consistent, generi errors. Però d'on poden venir aquests errors?

En negre la gràfica de la vertadera solució $x(t) = e^{-t}$. En blau la gràfica d'x_0, x_1 i els iterats del mètode x_k amb $k = 2, 3, \dots, 10$, amb pas $h = 0.1$. En vermell la gràfica d'x_0, x_1 i alguns iterats x_k del mètode amb $k \leq 16$, amb pas $h = 0.01$.

Equacions en diferències

Inspirat en *Linear recurrence with constant coefficients*, Wikipedia.

Definició

Una *recurrència lineal a coeficients constants* és una equació de la forma

$$x_{k+n} = a_1 x_{k+n-1} + a_2 x_{k+n-2} + \cdots + a_n x_k + b,$$

amb $a_1, a_2, \dots, a_n, b \in \mathbb{R}$ i $a_n \neq 0$.

L'enter positiu n s'anomena *ordre de recurrència* i indica el nombre de valors anteriors usats en el càlcul de cada iterat.

L'equació s'anomena *homogènia* si $b = 0$ i *no homogènia* si $b \neq 0$.

Observació

Tota recurrència no homogènia d'ordre n es pot reescriure com una homogènia d'ordre n o $n+1$ òbviament amb coeficients diferents.

Equacions en diferències

Polinomi característic

Per les recurrències homogènies estem interessats en trobar una expressió dels iterats x_k que solament depengui dels coeficients de la recurrència i dels n valors inicials. Per a això usarem les arrels de:

Definició (polinomi característic d'una recurrència)

El *polinomi característic* d'una recurrència

$$x_{k+n} = a_1 x_{k+n-1} + a_2 x_{k+n-2} + \cdots + a_n x_k$$

és, per definició,

$$\lambda^n - a_1 \lambda^{n-1} - a_2 \lambda^{n-2} - \cdots - a_{n-1} \lambda - a_n$$

Equacions en diferències

La solució

Solució d'una recurrència homogènia

Siguin $r_1, r_2, \dots, r_\ell$ les arrels del polinomi característic de la recurrència, de multiplicitats $m_1, m_2, \dots, m_\ell$, respectivament. Llavors, per $k = 0, 1, \dots,$

$$x_k = \sum_{i=1}^{\ell} \left(\sum_{j=0}^{m_i - 1} \gamma_{i,j} \, k^j \right) r_i^k .$$

En particular, si totes les arrels r_i són diferents (és a dir $\ell = n$ i $m_1 = m_2 = \cdots = m_n = 1$), la solució és

$$x_k = \sum_{i=1}^{\ell} \gamma_i \, r_i^k .$$

Equacions en diferències
Determinació dels coeficients $\gamma_{i,j}$

Observació

Els coeficients $\gamma_{i,j}$ (γ_i) es poden calcular resolent el sistema d'equacions corresponent als n valors inicials:

$$\begin{cases} \sum_{i=1,j=0}^{i=\ell,j=m_i-1} \gamma_{i,j}\, k^j = x_0, \\ \sum_{i=1,j=0}^{i=\ell,j=m_i-1} \gamma_{i,j}\, k^j\, r_i = x_1, \\ \sum_{i=1,j=0}^{i=\ell,j=m_i-1} \gamma_{i,j}\, k^j\, r_i^2 = x_2, \\ \qquad \vdots \\ \sum_{i=1,j=0}^{i=\ell,j=m_i-1} \gamma_{i,j}\, k^j\, r_i^{n-1} = x_{n-1}. \end{cases}$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals
Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

La recurrència és $x_{k+2} + 4(1+h)x_{k+1} + (-5+2h)x_k = 0$,

que té polinomi característic $\lambda^2 + 4(1+h)\lambda + (-5+2h)$.

Les arrels del polinomi característic son

$$r_1 = -2(1+h) + 3\sqrt{1 + \tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2}, \text{ i}$$
$$r_2 = -2(1+h) - 3\sqrt{1 + \tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2}.$$

Llavors la solució és $x_k = \gamma_1\, r_1^k + \gamma_2\, r_2^k$, on γ_1 i γ_2 han de verificar

$$\begin{cases} \gamma_1 + \gamma_2 = x_0 = 1, \\ \gamma_1\, r_1 + \gamma_2\, r_2 = x_1 = e^{-h}. \end{cases}$$

Això dóna $\gamma_1 = 1 - \gamma_2$ i

$$\gamma_2 = \frac{r_1 - e^{-h}}{r_1 - r_2} = \frac{r_1 - e^{-h}}{6\sqrt{1 + \tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2}}.$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals
Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

L'arrel $\sqrt{1 + \frac{2}{3}h + \frac{4}{9}h^2}$ és un problema a l'hora d'estudiar el comportament asimptòtic de les solucions x_k de la recurrència. Volem obtenir una expressió (aproximada) més senzilla d'aquesta arrel. Per a això usarem el desenvolupament de Taylor d'ordre 2 de

$$\sqrt{1+z} = 1 + \frac{z}{2} - \frac{z^2}{8} + \frac{z^3}{16} - \frac{5}{128}z^4 + \mathcal{O}(z^5).$$

Per tant tenim:

$$\begin{aligned} \sqrt{1 + \tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2} &= 1 + \frac{1}{2}\left(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2\right) - \frac{1}{8}\left(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2\right)^2 \\ &\quad + \frac{1}{16}\left(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2\right)^3 - \frac{5}{128}\left(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2\right)^4 + \mathcal{O}(h^5) \\ &= 1 + \frac{1}{2}\left(\tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2\right) - \frac{1}{8}\left(\tfrac{4}{9}h^2 + \tfrac{16}{27}h^3 + \tfrac{16}{81}h^4\right) \\ &\quad + \frac{1}{16}\left(\tfrac{8}{27}h^3 + \tfrac{16}{27}h^4\right) - \frac{5}{128}\frac{16}{81}h^4 + \mathcal{O}(h^5) \\ &= 1 + \frac{1}{3}h + \frac{1}{6}h^2 - \frac{1}{18}h^3 + \frac{1}{216}h^4 + \mathcal{O}(h^5). \end{aligned}$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals
Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

Llavors, les arrels del polinomi característic de la recurrència són:

$$\begin{aligned} r_1 &= -2(1+h) + 3\sqrt{1 + \tfrac{2}{3}h + \tfrac{4}{9}h^2} \\ &= 1 - h + \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{72} + \mathcal{O}(h^5), \text{ i} \\ r_2 &= -5 - 3h + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

En conseqüència, usant les aproximacions

$$e^{-h} = 1 - h + \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \frac{h^4}{24} + \mathcal{O}(h^5), \text{ i}$$
$$(1+z)^{-1} = 1 - z + \mathcal{O}(z^2),$$

tenim

$$\gamma_2 = \frac{r_1 - e^{-h}}{6\sqrt{1 + \frac{2}{3}h + \frac{4}{9}h^2}} = \frac{-\frac{1}{36}h^4 + \mathcal{O}(h^5)}{6\left(1 + \frac{h}{3} + \mathcal{O}(h^2)\right)} =$$
$$-\frac{1}{216}\left(h^4 + \mathcal{O}(h^5)\right)\left(1 + \tfrac{h}{3} + \mathcal{O}(h^2)\right)^{-1} =$$
$$-\frac{1}{216}\left(h^4 + \mathcal{O}(h^5)\right)\left(1 - \tfrac{h}{3} + \mathcal{O}(h^2)\right) = -\frac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5).$$

i

$$\gamma_1 = 1 - \gamma_2 = 1 - \frac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5).$$

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

Resumint, donat que $(1+z)^k = 1 + k \cdot z + \mathcal{O}(z^2)$,

$$x_k = \gamma_1 r_1^k + \gamma_2 r_2^k = \left(1 - \tfrac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5)\right) \cdot \left(1 - h + \mathcal{O}(h^2)\right)^k -$$
$$(-5)^k \left(\tfrac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5)\right) \cdot \left(1 + \tfrac{3}{5}h + \mathcal{O}(h^2)\right)^k$$
$$= \left(1 - \tfrac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5)\right) \cdot \left(1 - kh + \mathcal{O}(h^2)\right) -$$
$$(-5)^k \left(\tfrac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5)\right) \cdot \left(1 + \tfrac{3k}{5}h + \mathcal{O}(h^2)\right)$$
$$= \left(1 - kh + \mathcal{O}(h^2)\right) - (-5)^k \left(\tfrac{h^4}{216} + \mathcal{O}(h^5)\right)$$
$$\approx (1 - kh) - (-5)^k \frac{h^4}{216}.$$

És a dir, la nostra solució aproximada és essencialment $(-5)^k$, que no té res a veure amb e^{-t}.

Anàlisi dels mètodes de multipàs lineals

Sobre el desastre de l'exemple paradigmàtic i gens innocu anterior

Conclusió

Ara és totalment clar el motiu del comportament oscil·latori del mètode a l'exemple anterior. El responsable d'això, *donat que h és petit*, és el terme $(-5)^k$.

Recordem que aquest -5 és el terme dominant de l'arrel r_2 del polinomi característic de la recurrència.

Convergència dels mètodes multipàs

La condició de l'arrel

Definició (Condició de l'arrel)

Sigui

$$x_{k+1} := \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} + h \sum_{j=0}^{q-1} \beta_j f\left(t_{k-j}, x_{k-j}\right) + h\beta f\left(t_{k+1}, x_{k+1}\right)$$

un mètode multipàs lineal consistent. Es diu que el mètode *satisfà la condició de l'arrel*, si totes les arrels del polinomi característic de la recurrència anterior amb $h = 0$:

$$x_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} = 0$$

estan contingudes al disc unitat tancat del pla complex, centrat a l'origen. A més les arrels de mòdul 1 (que són a la frontera del disc) han de ser simples (és a a dir, han de tenir multiplicitat 1).

Observació important: Motivació de la condició de l'arrel

Observem que la recurrència

$$x_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} = 0$$

no inclou tots els termes de mètode. La motivació d'aquest fet és la de considerar el mètode en el cas límit $h = 0$. Altrament dit, la condició de l'arrel fixa el comportament del mètode (vist com a recurrència) en el límit $h = 0$.

Observació sobre les arrels del polinomi característic

Recordem que tot mètode consistent verifica $\sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j = 1$. Això implica que 1 és una de les arrels del polinomi característic de la recurrència anterior i, òbviament, és de modul 1. La condició de l'arrel, en particular, imposa que 1 sigui una arrel simple del polinomi característic de la recurrència $x_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} = 0$.

El següent teorema, que no demostrarem, aclareix perquè pels mètodes multipàs la convergència i la consistència no són equivalents.

Teorema (Convergència)

Un mètode multipàs lineal consistent és convergent si i solament si satisfà la condició de l'arrel, i l'error a les dades inicials tendeix a zero quan h tendeix a zero. A més, el mètode convergeix amb ordre p si té ordre de consistència p i l'error a les dades inicials tendeix a zero com $\mathcal{O}(h^p)$.

Per acabar demostrarem la proposició següent, que justifica la necessitat de la condició de l'arrel.

Proposició (Necessitat de la condició de l'arrel)

Tot mètode multipàs lineal convergent verifica la condició de l'arrel.

Per simplicitat farem la demostració *en el cas particular d'arrels reals*. El cas d'arrels complexes funciona "mutatis mutandis" amb una petita complicació addicional.

Demostració.

Comencem observant que la noció de convergència fa referència al mètode (no al PVI considerat), i ha de ser vàlida per a tot PVI (és a dir per a tota f i tota condició inicial). Per tant usarem que $\lim_{m\to\infty} u(t, h_m) = x(t)$ per a tot $t \in [0, T]$ $(t_0 = 0)$, on $x(t)$ és la solució del PVI $\dot{x} = 0$ amb $x(0) = 0$ i $u(t, h_m)$ denota l'aproximació d'$x(t = t_m)$ obtinguda amb pas $h = h_m$.

Demostració.

Per aquest PVI concret tenim $\lim_{m\to\infty} u(t, h_m) = 0$ per a tot $t \in [0, T]$, donat que $x(t) = 0$ per tot $t \in \mathbb{R}$. A més, qualsevol mètode multipàs lineal aplicat a l'EDO $\dot{x} = 0$ dóna

$$u(t_{k+1}, h_m) = \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j u(t_{k-j}, h_m)$$

per a tot $k \geq q - 1$.

Demostrarem per contradicció que es compleix la condició de l'arrel *per arrels reals*.

El polinomi característic de la recurrència $x_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j x_{k-j} = 0$ és $P(\lambda) = \lambda^q - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j \lambda^{q-1-j}$. Clarament, $P'(\lambda) = q\lambda^{q-1} - \sum_{j=0}^{q-2} (q-1-j)\alpha_j \lambda^{q-2-j}$.

Sigui r una arrel real de $P(\lambda)$. Per a tot $k \in \mathbb{Z}^+$, definim $z_k := a \cdot r^k$ on $a \in \mathbb{R}$.

Demostració.

En primer lloc volem veure que $\{z_k\}_{k\in\mathbb{Z}^+}$ és solució (real) de la recurrència. En efecte, fixem $x_0 = z_0, x_1 = z_1, \ldots, x_{q-1} = z_{q-1}$ com a condicions inicials. Llavors, per a tot $k \geq q-1$,

$$z_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j z_{k-j} = a \cdot r^{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j \big(a \cdot r^{k-j}\big) = a \cdot r^{k+1-q} \cdot P(r) = 0.$$

Ara apliquem el mètode multipàs

$$u\big(t_{k+1}, h_m\big) = \textstyle\sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j u\big(t_{k-j}, h_m\big)$$

al PVI $\dot{x} = 0$ amb $x(0) = 0$. Fixant $a > 0$ prou petit, per a cada node de discretització $t_0, t_1, \ldots, t_{q-1}$, podem fixar aproximacions inicials $u\big(t_k, h_m\big) := z_k$ tan properes com es vulgui a la vertadera solució del PVI $x(t_k) = 0$. Aleshores, $u\big(t, h_m\big) = u\big(t_m, h_m\big) = z_m$ perquè $\{z_k\}_{k\in\mathbb{Z}^+}$ és solució de la recurrència.

Demostració.

Si $|r| > 1$ tenim

$$\lim_{m\to\infty} \big|u\big(t, h_m\big)\big| = \lim_{m\to\infty} |z_m| = a \cdot \lim_{m\to\infty} |r|^m = \infty,$$

que és una contradicció.

Suposem ara que r és una arrel de P amb multiplicitat més gran que 1 i $|r| = 1$. En particular, $P(r) = P'(r) = 0$.

En aquest cas, per a tot $k \in \mathbb{Z}^+$, definim $w_k := a(1+k)r^k$ amb $a \in \mathbb{R}$.

Demostració.

Com abans, fixant $x_0 = w_0, x_1 = w_1, \ldots, x_{q-1} = w_{q-1}$ com a condicions inicials, per a tot $k \geq q-1$, tenim[1]

$$w_{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j w_{k-j} = a(k+2)r^{k+1} - \sum_{j=0}^{q-1} a\alpha_j (k+1-j) r^{k-j} =$$

$$a \cdot r^{k+1-q} \left(((k+2-q)+q)r^q - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j ((k+2-q) + (q-1-j)) r^{q-1-j} \right) =$$

$$a \cdot r^{k+1-q} \left((k+2-q) \left(r^q - \sum_{j=0}^{q-1} \alpha_j r^{q-1-j} \right) + r \left(q r^{q-1} - \sum_{j=0}^{q-2} (q-1-j) \alpha_j r^{q-2-j} \right) \right) =$$

$$a \cdot r^{k+1-q} \Big((k+2-q)P(r) + rP'(r) \Big) = 0.$$

És a dir, $\{w_k\}_{k\in\mathbb{Z}^+}$ és solució (real) de la recurrència en aquest cas.

[1] El càlcul que segueix ajuda a entendre perquè la solució d'una recurrència ha d'incloure termes de la forma $\left(\sum_{j=0}^{m_i-1} \gamma_{i,j}\, k^j\right) r_i^k$ associats a arrels r_i de multiplicitat $m_i > 1$.

Demostració.

Fixant una altra vegada $a > 0$ prou petit, podem fixar aproximacions inicials $u\big(t_k, h_m\big) := w_k$ tan properes com es vulgui a la solució del PVI $x\big(t_k\big) = 0$. Aleshores, com abans, $u\big(t, h_m\big) = u\big(t_m, h_m\big) = w_m$.

A més,

$$\lim_{m\to\infty} \big|u\big(t, h_m\big)\big| = \lim_{m\to\infty} |w_m| = \lim_{m\to\infty} a(1+m)\,|r|^m = \lim_{m\to\infty} a(1+m) = \infty,$$

que és, novament, una contradicció. ∎

Finis Coronat Opus