



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Facultat de Matemàtiques
i Informàtica

GRAU DE MATEMÀTIQUES

Treball final de grau

Integració numèrica: fórmules
interpolatòries, gaussianes, el
mètode doble-exponencial i exemples

Autora: Alba Clemente García

Director: Dr. Arturo Vieiro Yanes

Realitzat a: Departament de Matemàtiques i Informàtica

Barcelona, 24 de gener de 2022

Abstract

The integral over a bounded interval $[a, b]$ of a continuous f function can be numerically approximated using interpolation or Gaussian quadrature formulas, which evaluate the function f in $m + 1$ abscissas. The choice of abscissas is essential in Gaussian integration to obtain exact formulas for polynomials of degree less than or equal to $2m + 1$, improving the accuracy of interpolation formulas. From a numerical point of view, quadrature formulas that provide a small error with few evaluations of f are needed. One of these formulas is the one provided by the double exponential method, which consist of using a suitable transformation that maps the endpoints of the interval of integration to infinity, in order to obtain a double exponential decay of the integrand, and then apply the trapezoidal formula. We will see that this method allows to approximate converging improper integrals with singularities at the endpoints and that it can be adapted to approximate oscillatory integrals with different types of decay. Oscillatory integrals with a fast decay of the integrand are naturally found in dynamical systems when the Melnikov integral is considered to measure the splitting of separatrices. Throughout the work, some examples are analyzed and compared with numerical implementations using Pari/GP software.

Resum

La integral sobre un interval acotat $[a, b]$ d'una funció f contínua es pot aproximar numèricament usant fórmules interpolatòries o de quadratura gaussiana, que avaluen la funció f en $m + 1$ abscisses. La tria de les abscisses és essencial en la integració gaussiana per obtenir fórmules exactes per a polinomis de grau menor o igual que $2m + 1$, millorant l'exactitud de les fórmules interpolatòries. Des del punt de vista numèric calen fórmules de quadratura que proporcionin un error petit amb poques avaluacions de f , com la que ens proporciona l'anomenat mètode doble-exponencial. La fórmula doble-exponencial consisteix a usar un canvi de variable adequat, que envia els extrems d'integració a l'infinit, per tal d'obtenir un decaïment doble-exponencial de l'integrand, i posteriorment aplicar-hi la regla dels trapezis. Veurem que permet aproximar integrals impròpies convergents amb singularitats als extrems i que es pot adaptar per aproximar integrals oscil·latòries amb diferent tipus de decaïment. Integrals oscil·latòries amb decaïment ràpid sorgeixen de manera natural en sistemes dinàmics quan es considera la integral de Melnikov per mesurar l'escissió de separatrius. Al llarg del treball s'analitzen analíticament alguns exemples i es comparen amb implementacions numèriques usant el programari Pari/GP.

Agraïments

Vull agrair a totes aquelles persones que d'una manera o altra m'han ajudat, no només a fer aquest treball, sinó també durant els anys que he estat cursant el grau de matemàtiques.

En particular, vull donar les gràcies a l'Arturo per haver estat present sempre que he necessitat ajuda; als meus amics Anna i David que m'han donat l'empenta necessària per resoldre els dubtes que m'han anat sorgint; i, per últim, a la meva família per sempre confiar en mi i donar-me el suport necessari.

Índex

Introducció	1
1 Integració numèrica	4
1.1 Fórmules d'integració interpolatòria	4
1.1.1 Error de les fórmules d'integració interpolatòria	5
1.2 Regla dels trapezis	6
1.2.1 Error de la regla dels trapezis	6
1.3 Integració gaussiana	7
1.3.1 Error de les fórmules gaussianes	11
1.3.2 Algunes fórmules gaussianes	12
1.3.3 Exemples	13
2 Integració doble-exponencial (Integració DE)	15
2.1 El mètode doble-exponencial	15
2.2 Errors	17
2.2.1 Error de discretització de la fórmula d'integració DE	17
2.2.2 Error de truncament de la fórmula d'integració DE	20
2.2.3 Relació entre l'error de discretització i l'error de truncament	20
2.3 Optimalitat de la fórmula DE	20
2.4 Canvis de variable útils per a la fórmula DE	21
2.5 Exemple d'aplicació del mètode DE	23
3 Integrals oscil·latòries i exemples	26
3.1 Integrals oscil·latòries amb decaïment lent	26
3.1.1 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment lent	28
3.2 Integrals oscil·latòries amb decaïment ràpid	30
3.2.1 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment ràpid	30
4 Escissió de separatrius: la integral de Melnikov	34

4.1	La integral de Melnikov	34
4.2	Exemple d'aplicació d'integral de Melnikov	37
	Conclusions	43
	Bibliografia	46
	A Resultats preliminars	47
A.1	Teorema del Valor Mig per a Integrals	47
A.2	Teorema del Punt Fix de Banach	47
A.3	Teorema dels Residus	47
A.4	Fórmula Integral de Cauchy	48
A.5	Lema de Gronwall	48
A.6	Teorema de la Funció implícita	48
	B Codi	49
B.1	Exemple d'aplicació del mètode DE	49
B.2	Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment lent	50
B.3	Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment ràpid	51
B.4	Exemple d'aplicació d'integral de Melnikov	51

Introducció

Molts problemes de la matemàtica i de les seves aplicacions en diversos camps de la ciència es redueixen a problemes que involucren el càlcul d'integrals. Sovint, realitzar aquest càlcul és difícil o impossible analíticament, degut al fet que pot ser que no existeixi una primitiva de f o no es té l'integrand de manera explícita. Aquest fet motiva l'interès històric de l'estudi de les fórmules de quadratura numèrica. Així, Newton ja va considerar aquest problema i va donar les bases de les fórmules d'integració interpolatòria, considerant el cas particular de les fórmules de Newton-Cotes. Posteriorment, Gauss va obtenir les fórmules d'integració gaussiana, que són més precises i tenen un cost computacional similar, és a dir, requereixen el mateix nombre d'avaluacions de la funció a integrar. Nous reptes van aparèixer en computació amb les implementacions numèriques amb aritmètica de punt flotant; per aquest motiu es van desenvolupar tècniques per obtenir la precisió, sovint simple o doble precisió, que els càlculs requerien (per exemple els mètodes de Romberg, veure [1]). Recentment, alguns problemes (es veuran alguns) requereixen multiprecisió i s'han desenvolupat tècniques més competitives, com la integració doble-exponencial que estudiarem en aquest treball.

A l'hora de calcular numèricament una integral cal tenir en compte diversos aspectes:

- De quin tipus és l'interval d'integració: és un interval acotat o infinit? Notem que, des del punt de vista computacional, el cas de tenir un interval acotat “llarg” presenta dificultats a l'hora d'aplicar fórmules d'integració, ja que calen moltes avaluacions de la funció per obtenir una bona precisió.
- L'integrand $f(x)$ és analític? En aquest cas, té singularitats i on es troben?
- Si l'interval d'integració és infinit, com es comporta $f(x)$ a l'infinit? Decau de manera exponencial, polinomial, oscil·latòria...?

En aquest treball és té el particular interès d'estudiar mètodes d'integració numèrica que permetin calcular el valor d'una integral amb una precisió elevada amb un cost raonable. Ens centrarem en els mètodes d'integració gaussiana i doble-exponencial (s'emprarà l'abreviació DE per a referir-nos a doble-exponencial). Un dels objectius del treball és entendre com es pot fer una implementació numèrica d'aquest últim mètode, i s'usarà la funció `intnum` de Pari/GP [2] que implementa el mètode DE.

Pari/GP és un llenguatge de programació que fa servir la llibreria de multiprecisió GMP ². Notem que a partir de la versió 2.2.9 de Pari/GP es va canviar la implementació de la funció `intnum`, que actualment usa el mètode DE. Abans d'aquest canvi, `intnum`

²<https://gmplib.org/>

implementava el mètode de Romberg. En una sèrie de conferències i referències es justifica aquest canvi per motius d'eficiència quan es requereix una precisió elevada [3].

Aquest treball està dividit en quatre capítols, i cada capítol comença amb una introducció on s'explica tot el que es tracta en els diferents apartats d'aquest.

El primer capítol del treball és un breu recordatori de conceptes d'integració numèrica ja vists al grau de matemàtiques, però que són necessaris per entendre altres parts d'aquest treball. Es tractarà la integració gaussiana, que tot i que haver-hi llibres que la inclouen en el nivell de grau universitari, és un tema que no es va tractar a les assignatures obligatòries de càlcul numèric del grau. Entendre la integració gaussiana permet conèixer un mètode d'integració d'alta precisió que s'ha estat usant fins ara per a resoldre numèricament molts tipus d'integrals.

En el segon capítol es tracta la integració numèrica usant el mètode doble-exponencial. És un mètode relativament nou, de finals de segle XX, i per això aquest capítol se centra en explicar com s'aplica, quins tipus d'error hi ha a l'hora d'aplicar la fórmula d'integració DE i quins són, i la raó per la qual es diu que aquesta fórmula és òptima. També s'afegeix un llistat de canvis de variable que poden ser útils en determinats casos d'integrals i, per últim, es comprova que la funció `intnum` de Pari/GP usa el mètode d'integració DE usant la teoria explicada en tot aquest capítol. El mètode d'integració DE originàriament assumia que $f(x)$ és analítica, tot i que també es veurà que es pot adaptar si hi ha singularitats als extrems de l'interval d'integració. El mètode DE es basa en la idea d'aplicar un canvi de variable adequat per tal que l'integrand es comporti millor i sigui més fàcil fer l'aproximació de la integral. Concretament, aquest canvi de variable es fa per tal que l'integrand que s'obté decaigui de manera doble-exponencial quan es tendeix a infinit. Posteriorment, s'aplica la regla dels trapezis a la integral resultant. Com es demostra en [9] i es veurà en aquest capítol, per aquest tipus d'integrands, la fórmula de trapezis proporciona la màxima precisió en un mínim nombre d'avaluacions, degut a l'error de discretització de la fórmula DE. En particular, les possibles singularitats que tingui f , sense importar el tipus, s'envien a infinit. Aquest fet permet considerar integrals impròpies convergents amb qualsevol tipus de singularitats als extrems de l'interval d'integració. A més, això fa que aquest mètode sigui altament adaptable i fàcil de programar.

Al tercer capítol del treball es considera el mètode doble-exponencial però aplicant-ho a integrals oscil·latòries, és a dir, quan la funció $f(x)$ és una funció oscil·latòria. S'ha dedicat un capítol sencer a les integrals oscil·latòries perquè calcular aquests tipus d'integrals és més complex, ja que els mètodes tradicionals, com els mètodes d'integració interpolatòria o les fórmules gaussianes, tendeixen a donar poca precisió. Es distingeixen dos casos que convé tractar per separat: si $f(x)$ decau ràpidament, és a dir de forma exponencial, no hi ha problemes per aplicar la fórmula DE; però si decau de manera més lenta, com en les integrals de tipus Fourier, aleshores ja no es pot aplicar la fórmula DE de manera directa. En aquest cas s'utilitza un canvi de variable $\phi(t)$ proposat per Ooura i Mori [9] que consisteix a identificar els extrems de l'interval d'integració $(0, \infty)$ amb $-\infty$ i 0 , respectivament, fent que el nou integrand $f(\phi(t))\phi'(t)$ tendeixi a 0 quan $t \rightarrow -\infty$ i que el canvi $\phi(t)$ tendeixi a t quan la t creix cap a ∞ . S'il·lustrarà aquest canvi en alguns exemples concrets.

Com ja s'ha mencionat prèviament, apareixen de manera natural integrals oscil·latòries en sistemes dinàmics, per exemple quan es vol mesurar la distància entre varietats invariants de punts fixos. Es veurà en el quart capítol del treball que s'obté una aproximació (a primer ordre respecte d'un petit paràmetre de pertorbació) d'aquesta distància utilitzant

la integral de Melnikov. S'usarà el mètode DE per a calcular la integral de Melnikov que apareix en el sistema de Duffing per mesurar el trencament de les separatrius, quan sobre el sistema integrable actua una pertorbació periòdica i un fregament dissipatiu. S'obtindrà integrals oscil·latòries que decauen de manera ràpida, a les quals es pot aplicar el mètode DE.

Per acabar, el treball té un capítol final de conclusions en què es fa una cloenda i un repàs de tot el que s'ha fet en aquest treball i es mencionen alguns aspectes relacionats que no s'han considerat.

Aquest treball té dos apèndixs: el primer inclou un llistat d'enunciats de lemes i teoremes vists al grau de matemàtiques, però que cal recordar per facilitar la comprensió d'alguns aspectes d'aquest treball; el segon apèndix és un recull de tots els programes implementats en Pari/GP usats en els exemples.

Capítol 1

Integració numèrica

Donada una funció f definida sobre un interval acotat $[a, b]$, es vol calcular el valor de la integral

$$J(f) = \int_a^b f(x)dx$$

per aquelles funcions f que tinguin sentit matemàticament, per exemple quan la f és contínua en $[a, b]$. Sovint, realitzar aquest càlcul és difícil o impossible analíticament, degut al fet que pot ser que no existeixi una primitiva de f o potser només es coneix un conjunt de punts $f(x_k)$ i no la funció f de manera explícita. Per aquest motiu, és necessari conèixer mètodes numèrics que permeten trobar el valor de la integral de manera aproximada amb una precisió adequada.

En aquest capítol es presentaran les fórmules d'integració interpoladora de $m + 1$ abscisses, s'explicarà amb detall la regla dels trapezis i estudiarem la integració o quadratura gaussiana recordant els polinomis ortogonals, il·lustrant aquest últim mètode amb un parell d'exemples. No s'escriurà la demostració d'aquells teoremes que ja s'han vist al grau de matemàtiques, però se citarà referències on es poden trobar.

1.1 Fórmules d'integració interpolatòria

Signi $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_m \leq b$ una partició de $m + 1$ abscisses de l'interval $[a, b]$ i considerem el polinomi interpolador $p_m(x)$ de grau menor o igual que m que verifica

$$p_m(x_k) = f(x_k) \quad \text{per a } k = 0 \div m.$$

Les fórmules d'integració interpolatòria consisteixen a aproximar $J(f)$ per $J(p_m)$, és a dir, considerar

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_m(x)dx.$$

Si expressem el polinomi interpolador en la forma de Lagrange, és a dir,

$$p_m(x) = \sum_{j=0}^m f(x_j)L_j(x),$$

on

$$L_j(x) = \prod_{k=0, k \neq j}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k},$$

aleshores, quan aproximem la funció f per $p_m(x)$, obtenim que

$$f(x) \approx \sum_{j=0}^m f(x_j)L_j(x). \quad (1.1.1)$$

Com que el que volem és calcular la integral de f a l'interval $[a, b]$, integrant a banda i banda l'expressió 1.1.1 obtenim

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^m f_j W_j, \quad (1.1.2)$$

on $W_j = \int_a^b L_j(x)dx = \int_a^b \prod_{k \neq j, k=0}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx.$

Aquesta fórmula s'anomena *fórmula d'integració interpolatòria de $m + 1$ abscisses*. Els coeficients W_j són els *pesos* de la fórmula interpolatòria, que depenen de l'interval $[a, b]$ i de les abscisses x_0, \dots, x_m , però no depenen de la funció f . Com que el polinomi interpolador és únic, la fórmula 1.1.2 és exacta per a qualsevol polinomi de grau menor o igual a m i per a qualsevol tria de les abscisses dins de l'interval d'integració.

Observació 1.1.1. No cal resoldre la integral $W_j = \int_a^b L_j(x)dx$ per trobar els pesos de la fórmula interpolatòria. Imposant l'exactitud per als polinomis $\{1, x, x^2, \dots, x^m\}$ s'obté el sistema de $m + 1$ equacions i $m + 1$ incògnites

$$\begin{cases} \int_a^b 1dx &= W_0 + W_1 + \dots + W_m \\ \int_a^b xdx &= W_0x_0 + W_1x_1 + \dots + W_mx_m \\ &\dots \\ \int_a^b x^m dx &= W_0x_0^m + W_1x_1^m + \dots + W_mx_m^m \end{cases}$$

1.1.1 Error de les fórmules d'integració interpolatòria

Es recorda breument com s'obté una expressió de l'error de les fórmules d'integració numèrica interpolatòries a partir de l'error d'interpolació.

Sigui $f \in \mathcal{C}^{m+1}([a, b])$ i sigui $p_m(x)$ el polinomi interpolador de Lagrange de f de grau menor o igual que m a les abscisses x_0, x_1, \dots, x_m . Aleshores, com es veu en [1], per a tot $x \in [a, b]$ l'error d'interpolació expressat en forma de Lagrange és

$$f(x) - p_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi(x))}{(m+1)!} (x - x_0) \dots (x - x_m), \quad \xi \in (a, b). \quad (1.1.3)$$

Integrant a banda i banda (1.1.3) obtenim que l'error de la fórmula d'integració interpolatòria de $m + 1$ abscisses és

$$\int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_m(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(\xi(x))}{(m+1)!} (x - x_0) \dots (x - x_m) dx. \quad (1.1.4)$$

Les fórmules d'integració interpolatòria tenen un baix cost computacional però, en general, proporcionen baixa precisió. En el proper apartat recordarem la regla dels trapezidis, ja que té un paper molt important en el mètode d'integració doble-exponencial que explicarem al capítol 3. Com es veurà, aquest mètode permet aproximar les integrals amb precisió alta.

1.2 Regla dels trapezidis

Un exemple de fórmula d'integració interpoladora és la fórmula del trapezi, que consisteix a aproximar el resultat de la integral $\int_a^b f(x)dx$, on $f \in \mathcal{C}^2$, a partir del valor de l'àrea del trapezi de base $h = b - a$, com es representa a la figura 1.1.

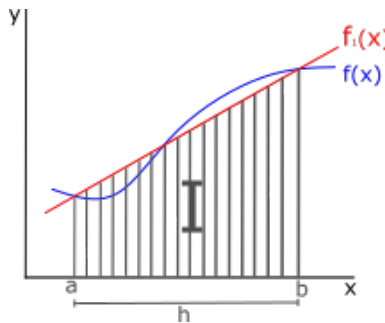


Figura 1.1: Representació de l'aproximació per la fórmula del trapezi, on la funció a integrar és $f(x)$, representada en color blau, i $f_1(x)$, en color vermell, és el polinomi interpolador de grau 1 que aproxima $f(x)$.

Usant la mateixa notació que a l'apartat anterior, es diu que la *fórmula del trapezi* és

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}[f(a) + f(b)] - \frac{f^{(2)}(\xi)}{12}h^3, \quad \xi \in (a, b). \quad (1.2.1)$$

Aquesta fórmula és un cas particular de les anomenades *fórmules (tancades) de Newton-Cotes* [1], que s'obtenen si es prenen que les $m + 1$ abscisses de la fórmula (1.1.2) siguin equidistants sobre l'interval $[a, b]$, és a dir, ara $h = \frac{b-a}{m}$. Són tancades perquè els extrems de l'interval $[a, b]$ també són abscisses a considerar.

La fórmula del trapezi es dedueix usant $m = 1$ a la fórmula (1.1.2), aleshores $h = b - a$ i

$$\int_a^b f(x)dx \approx f_0W_0 + f_1W_1,$$

escrivint $x_0 = a$ i $x_1 = b$ s'obté

$$\int_a^b f(x)dx \approx f(a) \int_a^b \frac{x-b}{a-b} dx + f(b) \int_a^b \frac{x-a}{b-a} dx = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)).$$

1.2.1 Error de la regla dels trapezidis

Per calcular l'error de la fórmula del trapezi es substitueix $m = 1$ a la fórmula (1.1.4). Com que se suposa que $f \in \mathcal{C}^2([a, b])$ i que hem usat el polinomi interpolador de f de grau

menor o igual que 1 en els punts a i b , aleshores

$$\int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b \frac{f^{(2)}(\xi(x))}{2!}(x-a)(x-b)dx,$$

i usant el Teorema del Valor Mig per a Integrals, enunciat a l'apèndix A.1, sabem que existeix $\xi \in (a, b)$ tal que

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_1(x)dx &= \frac{f^2(\xi)}{2!} \int_a^b (x-a)(x-b)dx = \frac{f^2(\xi)}{2!} \frac{1}{6}(a-b)^3 \\ &= -\frac{f^2(\xi)}{12}h^3. \end{aligned}$$

Si dividim $[a, b]$ en M subintervalls d'amplada $h = \frac{b-a}{M}$ i apliquem la fórmula del trapezi (1.2.1) a cada subinterval, obtenim *la regla (composta) dels trapezis*:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2}[f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + \dots + 2f(b-h) + f(b)] \\ &\quad - \frac{b-a}{12}f^{(2)}(\xi)h^2, \quad \xi \in (a, b), \quad f \in \mathcal{C}^2([a, b]). \end{aligned} \tag{1.2.2}$$

Observació 1.2.1. La regla dels trapezis és una de les fórmules tancades de Newton-Cotes. Com a tal no permet calcular integrals impròpies convergents amb singularitats als extrems de l'interval d'integració. En la següent secció es veurà que, en canvi, les fórmules gaussianes són obertes. Més endavant, es veurà que el mètode doble-exponencial també permet calcular integrals impròpies convergents tot i usar la regla dels trapezis, ja que el canvi de variable envia les singularitats a l'infinit i s'aplica la regla dels trapezis en un interval finit.

1.3 Integració gaussiana

A l'apartat 1.1 es diu que la fórmula (1.1.2) és exacta per a qualsevol polinomi de grau menor o igual a m i per a qualsevol tria de les abscisses dins de l'interval d'integració. Una bona elecció de les $m + 1$ abscisses proporciona fórmules d'integració numèrica de $m + 1$ abscisses que són exactes per a polinomis de grau menor o igual a $2m + 1$, les anomenades *fórmules gaussianes*.

Aquesta bona elecció de la qual es fa referència, consisteix a escollir les abscisses com els zeros d'un polinomi ψ_{m+1} de grau $m + 1$ d'una família de polinomis ortogonals. A continuació es recorda quins són aquests tipus de polinomis.

Definició 1.3.1. Sigui V un espai vectorial sobre \mathbb{K} . Diem que (V, \langle, \rangle) és un **espai prehilbertià** si l'aplicació $\langle, \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{K}$, que anomenem **producte escalar**, satisfà,

a) $\langle f, h \rangle = \overline{\langle h, f \rangle}$, si $\mathbb{K} = \mathbb{C}$
 $\langle f, h \rangle = \langle h, f \rangle$, si $\mathbb{K} = \mathbb{R}$,

b) $\langle f + g, h \rangle = \langle f, h \rangle + \langle g, h \rangle$,

c) $\langle \alpha f, h \rangle = \alpha \langle f, h \rangle$,

d) $\langle f, f \rangle > 0$ si $f \neq 0$,

on $f, g, h \in V$ i $\alpha \in \mathbb{K}$.

Teorema 1.3.2. *Sigui $(E, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ un espai prehilbertià de funcions reals contínues definides en un interval, tal que $\langle fg, h \rangle = \langle f, gh \rangle$, $\forall f, g, h \in E$. Aleshores existeix una única família de polinomis p_0, \dots, p_m, \dots a coeficients reals tal que $p_0 \equiv 1$ i, per tot $i \geq 1$:*

- a) grau $p_i = i$, $i = 0 \div n$,
- b) p_i és mònic,
- c) $\langle p_i, p_j \rangle = 0$, $\forall 0 \leq j < i$,

A més, $(p_i)_{i \geq 0}$ satisfà la recurrència:

$$p_i(x) = (x - \delta_i)p_{i-1} - \gamma_i^2 p_{i-2}(x)$$

on $p_{i-1} = 0$ i

$$\gamma_i^2 = \begin{cases} 0 & \text{si } i = 1 \\ \frac{\langle p_{i-1}, p_{i-1} \rangle}{\langle p_{i-2}, p_{i-2} \rangle} & \text{si } i \geq 2 \end{cases}$$

$$\delta_i = \frac{\langle xp_{i-1}, p_{i-1} \rangle}{\langle p_{i-1}, p_{i-1} \rangle} \quad \text{si } i \geq 1.$$

La demostració d'aquest teorema es pot trobar a [14].

Definició 1.3.3. *Els polinomis que s'obtenen a partir de l'anterior teorema se'ls anomena **polinomis ortogonals (mònics)** associats al producte escalar $\langle \cdot, \cdot \rangle$.*

Teorema 1.3.4. *Sigui p_m el polinomi de grau m pertanyent a una família de polinomis ortogonals en l'espai prehilbertià $(C^0([a, b]), \langle \cdot, \cdot \rangle)$, on*

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx,$$

sent w l'anomenada funció pes, que és contínua i positiva. Llavors, p_m té m zeros reals simples en l'interval obert (a, b) .

Demostració. Ho demostrarem per reducció a l'absurd. Suposem que $p_m(x)$ té k zeros en (a, b) , $0 \leq k < m$; és a dir, $p_m(x)$ té k canvis de signe en (a, b) . Siguin t_1, t_2, \dots, t_m els zeros de multiplicitat senar (si la multiplicitat fos parella no hi hauria canvis de signe). Llavors, si escrivim

$$q(x) = \prod_{i=1}^k (x - t_i),$$

tenim que $p_m(x)q(x)$ és un polinomi sense canvis de signe i, per tant:

$$\langle p_m, q \rangle = \int_a^b p_m(x)q(x)w(x)dx \neq 0.$$

Fixem-nos que el grau del polinomi $q(x)$ és k , i $k < m$, fet que implica que $p_m(x)$ i $q(x)$ són ortogonals, és a dir, $\langle p_m, q \rangle = 0$, obtenint contradicció amb la desigualtat anterior. \square

Definició 1.3.5. Anomenem *fórmules gaussianes* o *fórmules de quadratura gaussiana* a les fórmules

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{j=0}^m W_j f_j, \quad (1.3.1)$$

$$W_j = \int_a^b w(x)L_j dx = \int_a^b w(x) \prod_{k \neq j, k=0}^m \frac{x - x_k}{x_j - x_k} dx,$$

on $f_j = f(x_j)$ i les x_j són els zeros d'un polinomi ortogonal $\psi_{m+1}(x)$ respecte al producte escalar $\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx$.

Es diu que W_j són els **pesos** de les fórmules gaussianes i, com que si s'escriu A_{m+1} que sigui el coeficient principal de $\psi_{m+1}(x)$, també es poden expressar [1] com

$$W_j = \frac{A_{m+1} \langle \psi_m, \psi_m \rangle}{A_m \psi'_{m+1}(x_k) \psi_m(x_k)}.$$

Com ja s'ha vist en el teorema 1.3.4 que els zeros dels polinomis ortogonals són reals i simples, podem enunciar el següent teorema que ens garanteix l'exactitud de les fórmules gaussianes per a polinomis de grau menor o igual que $2m+1$, en contraposició a les fórmules d'integració interpolatòria que ho eren per a polinomis de grau menor o igual que m . L'ús de la funció pes en les fórmules gaussianes fa que sigui possible considerar integrals que tinguin alguna singularitat, ja que podem separar l'integrand com a $f(x) = w(x)g(x)$, on $g(x)$ sigui una funció sense cap singularitat i $w(x)$ sigui el pes a usar a l'hora de calcular els polinomis ortogonals.

Teorema 1.3.6. Si escollim que les abscisses x_k de fórmules de quadratura siguin els $m+1$ zeros d'un polinomi $\psi_{m+1}(x)$ de grau $m+1$ d'una família de polinomis ortogonals, aleshores aquestes fórmules seran exactes per a polinomis de grau menor o igual que $2m+1$.

Demostració. Sigui $w : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ una funció pes positiva i contínua sobre l'interval $[a, b]$ i sigui $\psi_{m+1}(x) = A_{m+1}x^{m+1} + \dots$ el polinomi ortogonal associat al producte escalar

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x)p(x)g(x)dx.$$

Considerem ara la fórmula d'interpolació de $m+1$ abscisses avaluada en els zeros del polinomi $\psi_{m+1}(x)$, és a dir,

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=0}^m W_k f(x_k). \quad (1.3.2)$$

Veiem que és exacta per a polinomis de grau $2m+1$. Sigui p_{2m+1} un polinomi de grau menor o igual a $2m+1$. Podem escriure'l com

$$p_{2m+1}(x) = q_m(x)\psi_{m+1}(x) + r_m(x)$$

on $q_m(x)$, $r_m(x)$ són polinomis de grau menor o igual a m . Tenim que $q_m(x)$ és ortogonal a $\psi_{m+1}(x)$, és a dir,

$$\langle q_m(x), \psi_{m+1}(x) \rangle = \int_a^b w(x)q_m(x)\psi_{m+1}(x)dx = 0.$$

Per tant,

$$\begin{aligned}\int_a^b w(x)p_{2m+1}dx &= \int_a^b w(x)q_m(x)\psi_{m+1}(x)dx + \int_a^b w(x)r_m(x)dx = \\ &= \int_a^b w(x)r_m(x)dx = \sum_{k=0}^m W_k r_m(x)\end{aligned}$$

i tenim l'última igualtat perquè la fórmula (1.3.2) sabem que és exacta per a polinomis de grau menor o igual a m . Com que x_k són els zeros del polinomi ortogonal $\psi_{m+1}(x)$, tenim que $\psi_{m+1}(x_k) = 0$ per $k = 0 \div m$. Amb tot això, tenim que

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^m W_k p_{2m+1}(x_k)dx &= \sum_{k=0}^m W_k q_m(x_k)\psi_{m+1}(x_k)dx + \sum_{k=0}^m W_k r_m(x_k)dx = \\ &= \int_a^b w(x)p_{2m+1}(x)dx\end{aligned}$$

prova l'exactitud de (1.3.2) per a polinomis de grau menor o igual que $2m + 1$. \square

Teorema 1.3.7. *Sigui $\{p_n(x)\}_{n \geq 0}$ una seqüència de polinomis ortogonals a l'interval (a, b) i considerem $m < n$. Aleshores, entre dos zeros de $p_m(x)$ hi ha almenys un zero de $p_n(x)$.*

Demostració. Siguin $x_{m,k}$ i $x_{m,k+1}$ dos zeros consecutius de $p_m(x)$. Per reducció a l'absurd, suposem que no hi ha cap zero de $p_n(x)$ a l'interval $(x_{m,k}, x_{m,k+1})$.

Considerem el polinomi

$$g(x) = \frac{p_m(x)}{(x - x_{m,k})(x - x_{m,k+1})}.$$

Per tant, $g(x)p_m(x) \geq 0 \quad \forall x \notin (x_{m,k}, x_{m,k+1})$.

Sabem que la fórmula gaussiana ens dona

$$\int_a^b w(x)g(x)p_m(x)dx = \sum_{i=1}^n \lambda_{n,i}g(x_{n,i})p_m(x_{n,i})$$

on $\{x_{n,i}\}_{i=1}^n$ són els zeros de $p_n(x)$. Com que no hi ha zeros de $p_n(x)$ en $(x_{m,k}, x_{m,k+1})$, podem dir que $g(x_{n,i})p_m(x_{n,i}) \geq 0 \quad \forall i = 1 \div n$. A més, tenim que $\lambda_{n,i} > 0 \quad \forall i = 1 \div n$. Aleshores la part de la dreta de la igualtat no es pot anular. No obstant, la part de l'esquerra de la igualtat és 0 per ortogonalitat.

Per tant, ha d'haver almenys un zero de $p_n(x)$ entre $x_{m,k}$ i $x_{m,k+1}$. \square

Notem que aquest teorema facilita el càlcul dels zeros dels polinomis ortogonals, ja que permet separar els zeros de $p_n(x)$ en intervals adequats, en funció dels zeros de $p_{n-1}(x)$, i aplicar un algorisme per calcular-los (per exemple Newton-Rhapson). Un altre mètode efectiu per obtenir els zeros dels polinomis ortogonals usa el fet que són valors propis de les matrius de Jacobi [4].

1.3.1 Error de les fórmules gaussianes

Les fórmules d'integració gaussiana s'obtenen a partir d'integrar el polinomi interpolador d'Hermite en abscisses adequades (zeros dels polinomis ortogonals). Tenint en compte que el polinomi interpolador d'Hermite $p_{2m+1}(x)$ és un polinomi de grau menor o igual a $2m+1$ tal que $p(x_k) = f(x_k)$, aleshores es té que la fórmula gaussiana és exacta per aquest polinomi i, per tant, el podem considerar per donar l'expressió de l'error de la fórmula gaussiana.

Recordem que l'expressió de l'error d'interpolació d'Hermite [1] és la següent:
Per a tot $x \in [a, b]$,

$$\begin{aligned} f(x) - p_{2m+1}(x) &= \frac{f^{(2m+2)}(\xi(x))}{(2m+1)!} (x-x_0)^2(x-x_1)^2 \dots (x-x_m)^2 \\ &= \frac{f^{(2m+2)}(\xi(x))}{(2m+1)!} \omega_m^2(x), \quad \text{on } \xi(x) \in \langle x_0, x_1, \dots, x_m, x \rangle. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Si multipliquem aquesta expressió per la funció pes $w(x)$, integrem entre a i b i suposant que $f \in \mathcal{C}^{2m+2}$ podem aplicar el Teorema del Valor Mig per a integrals, obtenim l'expressió de l'error de la fórmula gaussiana de $m+1$ abscisses,

$$\int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{j=0}^m W_j f(x_j) = \frac{f^{(2m+2)}(\xi)}{(2m+2)!} \frac{1}{A_{m+1}^2} \int_a^b w(x)\psi_{m+1}^2(x)dx \quad (1.3.4)$$

on $\xi \in (a, b)$ i A_{m+1} és el coeficient principal del polinomi ψ_{m+1} escollit.

Observació 1.3.8. Comparant l'error de la fórmula gaussiana (1.3.4) amb l'error de les fórmules interpolatòries (1.1.4) s'aprecia la millora degut al fet que el denominador de (1.3.4) creix molt més ràpidament que el de (1.1.4) quan la m augmenta. És aquesta una de les raons per la qual la quadratura gaussiana ha estat un mètode que s'ha usat per aproximar integrals amb una precisió elevada. Un altre avantatge d'usar fórmules gaussianes és que permeten calcular integrals en què l'integrand $f(x)$ presenti alguna singularitat, separant $f(x) = w(x)g(x)$, on $g(x)$ sigui una funció sense cap singularitat i $w(x)$ sigui el pes a usar a l'hora de calcular els polinomis ortogonals. Per una altra banda, el fet d'haver de calcular els zeros dels polinomis ortogonals per poder usar la quadratura gaussiana fa que numèricament s'hagin d'efectuar més operacions, tot i com ja s'ha vist en el teorema 1.3.7 disposem de la localització d'aquests zeros.

1.3.2 Algunes fórmules gaussianes

Per usar les fórmules gaussianes tan sols s'ha de treballar amb polinomis ortogonals adequats. Hi ha diverses famílies de polinomis ortogonals conegudes que fan que les fórmules gaussianes tinguin noms concrets. Alguns exemples són:

Gauss-Txebixev

Es treballa amb els polinomis de Txebixev, que són polinomis ortogonals respecte al producte escalar $\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x)g(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$. Són polinomis de la forma

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)),$$

on $\arccos : [-1, 1] \rightarrow [-\pi, 0]$, que es poden calcular usant la recurrència següent:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_{n+1}(x) &= 2xT_n(x) - T_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Les abscisses d'aquests polinomis es coneixen com les *abscisses de Txebixev* i són de la forma $x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{n} \frac{\pi}{2}\right)$ per $k = 0 \div (n-1)$.

Gauss-Legendre

S'usen els polinomis de Legendre, que són polinomis ortogonals respecte al producte escalar $\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x)g(x) dx$. Estan definits com

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1, \\ p_n(x) &= \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \quad n \geq 1, \end{aligned}$$

i es poden generar recurrentment

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1, \\ p_1(x) &= x, \\ p_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{n+1} x p_n(x) - \frac{n}{n+1} p_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Gauss-Hermite

En aquesta fórmula gaussiana s'utilitza els polinomis ortogonals d'Hermite que estan definits com

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2})$$

i són ortogonals respecte al producte escalar $\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x)e^{-x^2} dx$. Segueixen la recurrència

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, \\ H_1(x) &= 2x, \\ H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \end{aligned}$$

1.3.3 Exemples

A continuació es presenten un parell d'exemples d'aplicació d'integració gaussiana.

Primer es considera la integral

$$I_1 = \int_{-1}^1 (-x^2 + 1)dx.$$

El càlcul analític d'aquesta integral és immediat,

$$I_1 = \int_{-1}^1 (-x^2 + 1)dx = \left[\frac{-x^2}{2} + x \right]_{-1}^1 = \frac{4}{3}.$$

També es pot aproximar a partir de la fórmula gaussiana de Gauss-Legendre usant el pes $w(x) = 1$. Com que $f(x)$ és un polinomi de grau 2, calculem els zeros del polinomi de Legendre de grau 2. Usant la recurrència dels polinomis de Legendre sabem que

$$p_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1).$$

Els zeros de $p_2(x)$ són $t_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$ i $t_1 = +\frac{\sqrt{3}}{3}$. Per tant,

$$I_1 = W_0 f(t_0) + W_1 f(t_1).$$

Aplicant la fórmula gaussiana a $\{1, x\}$ i usant la observació 1.1.1, obtenim el següent sistema d'equacions:

$$\begin{cases} 2 &= W_0 + W_1 \\ 0 &= W_0 f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + W_1 f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) \end{cases}$$

Per tant, $W_0 = W_1 = 1$, i amb això tenim la fórmula gaussiana

$$I_1 = \int_{-1}^1 (-x^2 + 1)dx = f(t_0) + f(t_1) = \left(-\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + 1 \right) + \left(-\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + 1 \right) = \frac{4}{3},$$

que efectivament ens dona el resultat esperat.

Com que la funció `intnumgauss` de Pari/GP [2] implementa la fórmula de Gauss-Legendre, escrivint

$$\text{intnumgauss}(x = -1, 1, -x^2 + 1, 3)$$

estem calculant la integral I_1 usant Gauss-Legendre amb tres abscesses.

En aquest nou exemple, que ha estat extret del llibre [1], es vol trobar la fórmula que sigui exacta per qualsevol polinomi de grau menor o igual a 5 per calcular

$$I_2 = \int_{-1}^1 (1 + x^4)f(x)dx$$

i donar l'expressió de l'error suposant que $f \in C^6([-1, 1])$.

Avaluarem la fórmula gaussiana en tres abscesses, ja que sabent que les fórmules gaussianes són exactes per a polinomis de grau menor o igual a $2m + 1$, imposant que $2m + 1 = 5$

tenim $m = 2$. Per a calcular els polinomis ortogonals $\psi_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3$ usarem el producte escalar

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 (1+x^4)f(x)g(x)dx.$$

Usant la fórmula de recurrència (1.3.2) obtenim:

$$\begin{aligned}\psi_{-1}(x) &= 0, \\ \psi_0(x) &= 1, \\ \psi_1(x) &= (x - \delta_1)p_0 - \gamma_1^2 p_{-1}(x) = (x - 0) \cdot 1 - 0 = x, \\ \psi_2(x) &= (x - \delta_2)p_1 - \gamma_2^2 p_0(x) = (x - 0) \cdot x - \frac{25}{63} \cdot 1 = x^2 - \frac{25}{63}, \\ \psi_3(x) &= (x - \delta_3)p_2 - \gamma_3^2 p_1(x) = (x - 0) \cdot \left(x^2 - \frac{25}{63}\right) - \frac{404}{1575} \cdot x = x^3 - \frac{49}{75}x.\end{aligned}$$

Per obtenir les tres abscisses on avaluar la fórmula gaussiana calculem els zeros de $\psi_3(x)$:

$$\psi_3(x) = 0 \iff x^3 - \frac{49}{75}x = 0 \iff x_0 = -\sqrt{\frac{49}{75}}, x_1 = 0, x_2 = +\sqrt{\frac{49}{75}}.$$

Per tant, usant (1.3.4) tenim

$$\int_{-1}^1 (1+x^4)f(x)dx = W_0 f\left(-\sqrt{\frac{49}{75}}\right) + W_1 f(0) + W_2 f\left(+\sqrt{\frac{49}{75}}\right) + \frac{f^{(6)}(\xi)}{6!} \langle \psi_3, \psi_3 \rangle, \quad (1.3.5)$$

on $\xi \in (-1, 1)$.

Per trobar W_0, W_1, W_2 usarem $\{1, x, x^2\}$ perquè sabem que la fórmula (1.3.5) és exacta per a polinomis de grau menor a 5, per tant resolent el sistema

$$\begin{cases} \frac{12}{5} &= W_0 + W_1 + W_2 \\ 0 &= -\sqrt{\frac{49}{75}}W_0 + 0 + \sqrt{\frac{49}{75}}W_2 \\ \frac{20}{21} &= \frac{49}{75}W_0 + 0 + \frac{49}{75}W_2 \end{cases}$$

obtenim que $W_0 = W_2 = \frac{250}{343}$ i $W_1 = \frac{1616}{1715}$ i, per tant, la fórmula gaussiana que aproximarà I_2 és,

$$\int_{-1}^1 (1+x^4)f(x)dx \approx \frac{250}{343}f\left(-\sqrt{\frac{49}{75}}\right) + \frac{1616}{1715}f(0) + \frac{250}{343}f\left(+\sqrt{\frac{49}{75}}\right).$$

Aquests exemples ens han permès familiaritzar-nos amb la integració gaussiana. Com s'ha vist, les fórmules gaussianes de $m + 1$ abscisses són exactes per a polinomis de grau fins a $2m + 1$. Recordem que no hi ha fórmules de quadratura exactes per a polinomis de grau fins a $2m + 2$.

Un inconvenient que tenen les fórmules gaussianes és que la tria del pes s'ha de fer d'acord amb un estudi previ de l'integrand. A més, les fórmules gaussianes compostes han de considerar canvis de variable per obtenir les abscisses. Aconseguir resultats amb precisió elevada pot ser costós i algunes integrals difícils d'integrar. Per aquest motiu, en el següent capítol es procedeix a considerar un altre tipus de fórmules de quadratura.

Capítol 2

Integració doble-exponencial (Integració DE)

Es poden aconseguir fórmules d'integració alternatives aplicant un canvi de variable per aconseguir un integrant amb unes certes propietats que permetin aproximar millor la integral. Això és propi de les integrals impròpies perquè s'han d'acotar les cues, o per integrals que tinguin alguna singularitat. En el cas de la integració DE es busca aplicar un canvi de variable que transformi l'integrant de manera que decaigui de forma doble-exponencial.

El mètode doble-exponencial es proposa, per primer cop, el 1974 pels japonesos Hidetosi Takahasi i Masatake Mori per calcular de manera eficient integrals de funcions analítiques que presenten singularitats als extrems de l'interval d'integració. Aquest mètode consisteix a aplicar un cert canvi de variable, de la forma que s'explicarà més endavant, amb l'objectiu de transformar la integral que es vol calcular a un altre tipus d'integral. L'interval d'integració del nou tipus d'integral es vol que sigui $(-\infty, \infty)$ i que l'integrant es comporti de manera doble-exponencial a l'infinit, per després aplicar la regla dels trapezis, obtenint així la fórmula doble-exponencial.

En aquest capítol es veurà la diferència entre l'error de discretització de la fórmula DE i l'error de truncament, quina relació tenen i quina importància tenen a l'hora d'implementar numèricament la fórmula DE. També es farà menció en quina manera la fórmula DE és òptima, es llistaran diversos canvis de variable útils per aplicar la fórmula DE i, per últim, veurem com s'implementa aquesta fórmula al sistema Pari/GP.

2.1 El mètode doble-exponencial

La història darrere el descobriment de la fórmula d'integració doble-exponencial és curiosa i en farà un breu resum per introduir aquesta secció. A la publicació [9] es pot trobar més informació.

Mori era un investigador associat de la Facultat d'Enginyeria de la Universitat de Tokio el 1969. Pertanyia al departament de física aplicada, treballant en la teoria de la col·lisió atòmica i avaluava integrals moleculars per ordinador. A través del seu amic Toshiyasu Kunii a l'agost del mateix any va conèixer al director del centre de computació de la universitat, Hidetosi Takahasi, que també era el president de la Information Processing

Society of Japan. Takahasi va ser qui va convèncer Mori perquè treballés en l'anàlisi de l'error en integració numèrica de funcions analítiques, fet que a Mori li va agradar perquè treballava amb aquest tipus d'integrals en el seu dia a dia. Va ser a partir d'aquesta relació que va sorgir la idea de la funció característica de l'error, clau en l'estudi de l'error de la fórmula doble-exponencial que s'explicarà més endavant.

El mètode d'integració doble-exponencial consisteix a considerar una integral

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

on l'interval $[a, b]$ pot ser finit, infinit de tipus $(0, \infty)$ o de tipus infinit $(-\infty, \infty)$ i la funció $f(x)$ ha de ser analítica en $[a, b]$, de manera que

$$a = \phi(-\infty), \quad b = \phi(\infty)$$

on $\phi(t)$ sigui una funció analítica en $(-\infty, \infty)$, i s'obté

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi(t))\phi'(t)dt. \quad (2.1.1)$$

Observació 2.1.1. També es pot considerar el cas en què $f(x)$ presenti alguna singularitat a l'extrem (o als extrems) de l'interval d'integració. Aleshores, s'ha de considerar $f(x)$ analítica en l'interval obert (a, b) .

El punt clau és escollir una funció de canvi de variable $\phi(t)$ tal que

$$|f(\phi(t))\phi'(t)| \approx e^{-c \cdot e^{|t|}} \text{ quan } |t| \rightarrow \infty \quad (2.1.2)$$

és a dir, que l'integrand transformat decaigui de manera doble exponencial a l'infinit. Aquesta és la raó per la qual el mètode s'anomena mètode d'integració doble-exponencial.

S'observa que ara es té la integral (2.1.1) preparada per aplicar la regla dels trapezis 1.2.2 amb una xarxa h -equiespaiada, és a dir, es pot escriure

$$I_h = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\phi(kh))\phi'(kh). \quad (2.1.3)$$

A l'hora de fer el càlcul numèric, s'ha de truncar el sumatori infinit, és a dir,

$$I_h^{(N)} = h \sum_{k=-N_-}^{N_+} f(\phi(kh))\phi'(kh), \text{ per } N = N_+ + N_- + 1. \quad (2.1.4)$$

on N és el nombre de vegades que avaluem la funció f .

Aquesta última fórmula (2.1.4) és la que s'anomena la *fórmula d'integració doble-exponencial* o *DE-formula*, i està dissenyada de tal manera que dona el resultat més precís amb un mínim d'avaluacions sempre que suposem que l'integrand transformat tingui un decaïment com en (2.1.2). Aplicar la regla de trapezis en aquest context fa que aquesta fórmula sigui òptima, com es pot veure en l'apartat 3.3 i en [9].

2.2 Errors

Hi ha dos tipus diferents d'errors: l'error de discretització, que és produïx quan s'aproxima el valor de l'integral (2.1.1) pel valor que ens dona la regla dels trapezis en (2.1.3), i l'error de truncament, que es dona perquè hem d'escollir una N que faci finit el sumatori (2.1.3), és a dir, és l'error que es comet a l'hora d'aproximar (2.1.3) per (2.1.4).

També s'ha de tenir en compte els errors d'arrodoniment degut a l'ús d'una aritmètica de punt flotant amb precisió finita. En aquest cas, se suposarà que la precisió en els càlculs és exacta i, de fet, a les implementacions numèriques es farà servir multiprecisió, ja que es treballarà amb Pari/GP. Aquest sistema usa la llibreria GMP ¹, la qual no és compatible amb els estàndards IEEE² perquè no usa l'arrodoniment en la representació de la mantissa, i això fa que l'aritmètica sigui més ràpida (comparant-ho amb altres llibreries de multiprecisió com MPFR ³, que està basada en GMP però afegint arrodoniment als càlculs). Tot i això, com que a Pari/GP es pot usar un nombre arbitrari de dígitos i el nombre d'operacions que farem és petit, es pot assumir que l'error d'arrodoniment és gairebé nul i ignorar-ho en l'estudi del mètode.

2.2.1 Error de discretització de la fórmula d'integració DE

L'error de discretització de la fórmula d'integració doble-exponencial és

$$|\Delta I_h| = \frac{1}{2\pi i} \int_{\hat{C}} \hat{\phi}_h(z) g(z) dz \quad \text{on} \quad \hat{\phi}_h(z) = \begin{cases} \frac{-2\pi i}{1 - \exp(-\frac{2\pi i}{h} z)} & \text{si } \text{Im}(z) > 0 \\ \frac{+2\pi i}{1 - \exp(+\frac{2\pi i}{h} z)} & \text{si } \text{Im}(z) < 0 \end{cases} \quad (2.2.1)$$

on \hat{C} és el representat en la figura 2.1 i $\hat{\phi}_h(z)$ s'anomena funció característica de l'error perquè caracteritza l'error de la fórmula independentment de l'integrand $g(z)$.

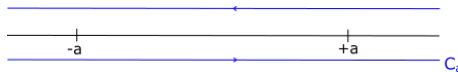


Figura 2.1: Camí \hat{C}

En particular,

$$|\hat{\phi}_h(z)| = 2\pi \left| \frac{1}{1 - \exp(\pm \frac{2\pi i}{h} z)} \right| \approx 2\pi \frac{1}{\exp(\frac{2\pi}{h} |\text{Im}(z)|)} = 2\pi \exp\left(-\frac{2\pi}{h} |\text{Im}(z)|\right).$$

Això vol dir que si la h és prou petita, $|\hat{\phi}_h(z)|$ decau exponencialment amb un exponent que creix quan $|\text{Im}(z)|$ creix. Per tant, es pot dir que si $g(z)$, és a dir $f(\phi(z))\phi'(z)$, té una singularitat tal que $|\text{Im}(z)| < \alpha$, aleshores

$$\Delta I_h = O\left(\exp\left(-\frac{2\pi}{h} \alpha\right)\right). \quad (2.2.2)$$

¹<https://gmplib.org/>

²<https://www.ieee.org/>

³<https://www.mpfr.org/>

Anem a veure d'on surt l'expressió de l'error $|\Delta I_h|$, [15, 9]. Per una banda tenim

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi(t))\phi'(t)dt = \int_{-\infty}^{\infty} g(t)dt = \lim_{a \rightarrow +\infty} \int_{-a}^a g(t)dt$$

Sigui C_a un camí tancat envoltant $[-a, a]$ tal que $g(t)$ no té singularitats al seu interior, com es pot veure a la figura 2.2.

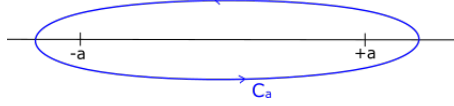


Figura 2.2: Camí C_a

Usant la Fórmula Integral de Cauchy, que està enunciat a l'apèndix A.4, obtenim

$$\lim_{a \rightarrow +\infty} \int_{-a}^a g(t)dt = \frac{1}{2\pi i} \lim_{a \rightarrow +\infty} \int_{C_a} \log\left(\frac{z+a}{z-a}\right)g(z)dz.$$

D'altra banda, tenim l'aproximació de la integral per la regla dels trapezis,

$$I_h = h \sum_{k=-\infty}^{+\infty} g(kh) = h \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{k=-N}^N g(kh) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \sum_{k=-N}^N h g(kh).$$

Tenint en compte que els pesos de la fórmula són les h , els nodes són kh i usant el Teorema dels Residus, enunciat a l'apèndix A.3, obtenim

$$I_h = \frac{1}{2\pi i} \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{C_{Nh}} \sum_{k=-N}^N \frac{h}{z - kh} g(z)dz.$$

Aleshores, posant $a = Nh$ tenim

$$\begin{aligned} \Delta I_h &= I - I_h = \frac{1}{2\pi i} \lim_{N \rightarrow +\infty} \int_{C_{Nh}} \left(\log\left(\frac{z + Nh}{z - Nh}\right) - \sum_{k=-N}^N \frac{h}{z - kh} \right) g(z)dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\hat{C}} \hat{\phi}_h(z) g(z)dz. \end{aligned}$$

Estudiem què és exactament $\hat{\phi}_h(z)$. Sabem

$$\log\left(\frac{z + Nh}{z - Nh}\right) = \log\left(\frac{\frac{z}{Nh} + 1}{\frac{z}{Nh} - 1}\right)$$

que quan $Nh \rightarrow \infty$ aleshores $\log\left(\frac{\frac{z}{Nh} + 1}{\frac{z}{Nh} - 1}\right) \rightarrow \log(-1) = \pm\pi i$. Per tant, el terme $\hat{\phi}_h(z)$ es pot reescriure

$$\hat{\phi}_h(z) = \begin{cases} -\pi i - \sum_{k=-N}^N \frac{h}{z - kh} & \text{si } \text{Im}(z) > 0 \\ +\pi i - \sum_{k=-N}^N \frac{h}{z - kh} & \text{si } \text{Im}(z) < 0. \end{cases}$$

Per estudiar què val el sumatori quan $Nh \rightarrow \infty$ usarem la representació del sinus com a infinits productes. Com que el producte infinit convergeix donat que el podem

expressar com el sumatori dels logaritmes, i aquest sumatori convergeix perquè $\sum_{k=1}^{\infty} 1/k^2$ convergeix, podem concloure que

$$\begin{aligned}
\sin(\pi z) &= \pi z \prod_{k=1}^{+\infty} \left(1 - \frac{z^2}{k^2}\right), \\
\log(\sin(\pi z)) &= \log(\pi z) + \sum_{k=1}^{+\infty} \log\left(1 - \frac{z^2}{k^2}\right), \\
\frac{\cos(\pi z)}{\sin(\pi z)} \pi &= \frac{\pi}{\pi z} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(\frac{1}{1 - \frac{z^2}{k^2}}\right) \left(\frac{-2z}{k^2}\right), \\
\pi \cot(\pi z) &= \frac{1}{z} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(\frac{-2z}{k^2 - z^2}\right), \\
\pi \cot(\pi z) &= \frac{1}{z} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(\frac{1}{z - k} + \frac{1}{z + k}\right).
\end{aligned} \tag{2.2.3}$$

Fixem-nos que $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{h}{z - kh}$ es pot escriure com $\frac{1}{w} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(\frac{1}{w - k} + \frac{1}{w + k}\right)$ si traiem h com a factor comú i fem el canvi $w = \frac{z}{h}$, per tant,

$$\pi \cot\left(\frac{\pi}{h} z\right) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{h}{z - kh}.$$

Amb això veiem que

$$\hat{\phi}_h(z) = \pm \pi i - \pi \cot\left(\frac{\pi}{h} z\right).$$

Usant la propietat dels nombres complexos $1 = w\bar{w}$ juntament amb la propietat fonamental de la trigonometria, les fórmules de l'angle doble i la definició de l'exponencial, podem reescriure-ho de la següent manera:

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}_h(z) &= \pm \pi i - \pi \cot\left(\frac{\pi}{h} z\right) = \pi \left[\pm i - \frac{1}{\tan\left(\frac{\pi}{h} z\right)}\right] = \pi \left[\pm i - \frac{\cos\left(\frac{\pi}{h} z\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right)}\right] \\
&= \pi \left[\frac{\pm i \sin\left(\frac{\pi}{h} z\right) - \cos\left(\frac{\pi}{h} z\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right)}\right] = \pm \pi i \left[\frac{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right) \pm i \cos\left(\frac{\pi}{h} z\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right)}\right] \\
&= \frac{\pm \pi i}{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right)} = \frac{\pm \pi i}{\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right) \left[\sin\left(\frac{\pi}{h} z\right) \mp i \cos\left(\frac{\pi}{h} z\right)\right]} = \frac{\pm \pi i}{\sin^2\left(\frac{\pi}{h} z\right) \mp i \sin\left(\frac{\pi}{h} z\right) \cos\left(\frac{\pi}{h} z\right)} \\
&= \frac{\pm \pi i}{\frac{1}{2} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi z}{h}\right)\right) \mp i \frac{1}{2} \sin\left(\frac{2\pi z}{h}\right)} = \frac{\pm 2\pi i}{1 - \exp\left(\frac{\pm 2\pi i}{h} z\right)}.
\end{aligned} \tag{2.2.4}$$

Queda vist la fórmula de l'error de discretització de la fórmula DE.

2.2.2 Error de truncament de la fórmula d'integració DE

L'error de truncament es produeix quan es vol avaluar numèricament el sumatori infinit de la fórmula d'integració doble-exponencial (2.1.3) a l'hora de triar una N . Aquest error el denotem per ϵ_t i és

$$\epsilon_t = h \sum_{k=-\infty}^{-N_-} f(\phi(kh))\phi'(kh) + h \sum_{k=N_+}^{+\infty} f(\phi(kh))\phi'(kh).$$

A diferència de l'error de discretització, l'error de truncament sí que depèn del canvi de variable $x = \phi(t)$ usat.

2.2.3 Relació entre l'error de discretització i l'error de truncament

Usant la mateixa notació que en (2.1.3) i (2.1.4), es té que afegint l'error d'arrodoniment la fórmula queda

$$I_h = I_h^{(N)} + \epsilon_t.$$

Per simplicitat, podem suposar que $N_- = N_+ = n$ així que el nombre total d'avaluacions és $N = 2n + 1$ (aquesta és la notació que s'usarà en els exemples següents i als codis de l'apèndix B). Per tal que el truncament sigui rellevant hem de truncar el sumatori infinit de manera que l'error de discretització sigui igual a l'error de truncament, és a dir,

$$\Delta I_h = \epsilon_t. \tag{2.2.5}$$

Si escrivim $\Delta I_h^{(N)}$ com a l'error total del càlcul de l'integral I , es té que

$$I = I_h^{(N)} + \Delta I_h^{(N)} = I_h^{(N)} + \Delta I_h + \epsilon_t = I_h^{(N)} + 2\Delta I_h = I_h^{(N)} + 2\epsilon_t.$$

2.3 Optimalitat de la fórmula DE

Tot i que l'objectiu d'aquest treball no és demostrar l'optimalitat de la fórmula doble-exponencial, s'explicarà en quin sentit ho és i es farà un resum de la història que hi ha darrere d'aquesta. En les publicacions [15, 9] es pot trobar informació de manera més extensa.

Els investigadors Takahasi i Mori, un cop van definir la funció característica, van generalitzar-la per a fórmules d'integració numèrica sobre l'interval $(-\infty, \infty)$, amb l'objectiu de trobar quina propietat ha de satisfer aquesta funció per tal de buscar una fórmula que si compleix la propietat farà que sigui òptima. En [9] es comprova que aquesta fórmula és la regla dels trapezis. Concretament, es demostra que la variació de l'error d'integració sobre les línies $\text{Im}(z) = ctant$ és més ràpida per la regla dels trapezis que per qualsevol altra fórmula de quadratura, garantint que l'error és el més petit possible si la banda d'analicitat és prou gran, vegis la fórmula (2.2.1). Els detalls de la demostració són complexos, motiu pel qual ens referim als articles originals que s'expliquen en [9].

Quan Takahasi i Mori van demostrar l'optimalitat de la regla dels trapezis, van començar a investigar quins canvis de variable havien d'aplicar a l'integrand per tal que l'integrand de després del canvi decaigués d'una certa manera [10]. Si l'integrand transformat decau

massa ràpid, aleshores l'error de truncament disminueix però l'error de discretització augmenta degut al creixement de la h ; altrament, si l'integrand transformat decau massa lent, l'error de discretització es fa petit però l'error de truncament creix. Per tant, els investigadors van suposar que havia d'existir un decaïment òptim entre aquests dos casos. Per fer-ho van prendre l'integral de la forma

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx,$$

i van estudiar canvis de variable que fessin que l'error de convergència tendís a 0 ràpidament segons anés augmentant el nombre total d'avaluacions de f , que fins ara hem anomenat $N = 2n + 1$. Després de fer diverses proves per diferents canvis de variable, van concloure que el canvi de variable òptim per aquest cas d'integral és $x = \tanh(\frac{\pi}{2} \sinh(t))$ i que el decaïment buscat havia de ser doble-exponencial.

2.4 Canvis de variable útils per a la fórmula DE

En aquesta secció es detallen alguns canvis de variable que fan que

$$|f(\phi(t))\phi'(t)| = |g(t)| \approx M \exp(-\exp |t|)$$

quan $t \rightarrow \infty$. Aquests canvis de variable han estat extrets de les diapositives del Pascal Molin [8]:

1. El canvi $x = \phi(t) = \exp(t - \exp(t))$ és útil per a integrals de la forma

$$\int_0^\infty f(x) dx, \quad \text{on } |f(x)| \leq M \exp(-x).$$

En aquest cas la funció $g(t)$ compleix

$$\begin{aligned} |g(t)| &= |f(\exp(t - \exp(t)))| |\exp(t - \exp(t))| |1 - \exp(t)| \\ &\leq M \exp(-(\exp(t - \exp(t)))) (\exp(t - \exp(t))) |1 - \exp(t)| \\ &\leq M \exp(-\exp(t)), \end{aligned}$$

ja que

- $\exp(-(\exp(t - \exp(t))))$ quan $t \rightarrow +\infty$ es comporta com $\exp(-\exp(-\exp(t)))$, i quan $t \rightarrow -\infty$ es comporta com $\exp(-\exp(t))$,
- $\exp(t - \exp(t))$ quan $t \rightarrow +\infty$ es comporta com $\exp(-\exp(t))$, i quan $t \rightarrow -\infty$ es comporta com $\exp(t)$,
- $|1 - \exp(t)|$ quan $t \rightarrow +\infty$ es comporta com $\exp(t)$, i quan $t \rightarrow -\infty$ es comporta com 1.

2. S'usa el canvi $x = \phi(t) = \sinh(t)$ per a integrals del tipus

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx, \quad \text{on } |f(x)| \leq M \exp(-|x|).$$

En aquest cas es té que la funció $g(t)$ compleix

$$\begin{aligned} |g(t)| &= |f(\sinh(t))| |\cosh(t)| \leq M e^{-|\sinh(t)|} |\cosh(t)| \\ &= M \exp\left(-\left|\frac{\exp(t) - \exp(-t)}{2}\right|\right) \left|\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2}\right| \\ &= M \exp\left(-\left|\frac{\exp(t) - \exp(-t)}{2}\right|\right) \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2}\right) \\ &\leq M \exp(-\exp|t|) \end{aligned}$$

perquè

- $(\exp(t) - \exp(-t))/2 > 0$ si, i només si, $\exp(t) > \exp(-t)$. Això només és compleix quan $t \rightarrow +\infty$. Per tant, en aquest cas es té

$$|g(t)| \leq M \exp\left(-\left(\frac{\exp(t) - \exp(-t)}{2}\right)\right) \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2}\right),$$

que quan $t \rightarrow +\infty$ es comporta com $\exp(-\exp(t)/2)$.

- $(\exp(t) - \exp(-t))/2 < 0$ si, i només si, $\exp(t) < \exp(-t)$. Això només és compleix quan $t \rightarrow -\infty$. Per tant, en aquest cas es té

$$|g(t)| \leq M \exp\left(-\left(\frac{\exp(-t) - \exp(t)}{2}\right)\right) \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2}\right),$$

que quan $t \rightarrow -\infty$ es comporta com $\exp(-\exp(-t)/2)$.

3. Usant $x = \phi(t) = \tanh(t)$ per a integrals

$$\int_{-1}^1 f(x) dx, \quad \text{on } |f(x)| \leq M,$$

s'obté una funció acotada com la del canvi del segon ítem. Veiem-ho aplicant primer el canvi $x = \tanh(t)$ i a continuació $y = 2t$:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\tanh(y/2))}{\cosh^2(y/2)} dy$$

i, per tant,

$$\begin{aligned} |g(y)| &= \frac{1}{2} |f(\tanh(y/2))| \left|\frac{1}{\cosh^2(y/2)}\right| \leq M \left(\frac{1}{\cosh^2(y/2)}\right) \\ &= \frac{4M}{\exp(y) + \exp(-y) + 2} \leq M \exp(-|y|), \end{aligned}$$

ja que quan $y \rightarrow +\infty$ tenim $|g(y)| \leq M \exp(-y)$ i quan $y \rightarrow -\infty$ tenim $|g(y)| \leq M \exp(y)$.

4. Usant $x = \phi(t) = \sinh(t)$ per a integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx, \quad \text{on } |f(x)| \leq M(1 + |x|)^{-\alpha},$$

s'obté una funció acotada com la del segon ítem. En aquest cas la funció $g(t)$ compleix

$$\begin{aligned} |g(t)| &= |f(\sinh(t))| |\cosh(t)| \leq M(1 + |\sinh(t)|)^{-\alpha} |\cosh(t)| \\ &= M \left(1 + \left| \frac{\exp(t) - \exp(-t)}{2} \right| \right)^{-\alpha} \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2} \right) \\ &\leq M \exp(-|t|), \end{aligned}$$

ja que

- $(\exp(t) - \exp(-t))/2 > 0$ si, i només si, $\exp(t) > \exp(-t)$. Això només és compleix quan estudiem $t \rightarrow +\infty$. Per tant, en aquest cas tenim

$$|g(t)| \leq M \left(\frac{\exp(t) - \exp(-t)}{2} \right)^{-\alpha} \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2} \right),$$

que quan $t \rightarrow +\infty$ es comporta com $M \exp((\alpha - 1)(-t))$.

- $(\exp(t) - \exp(-t))/2 < 0$ si, i només si, $\exp(t) < \exp(-t)$, que és cert quan $t \rightarrow -\infty$. Per tant, en aquest cas tenim

$$|g(t)| \leq M \left(\frac{\exp(-t) - \exp(t)}{2} \right)^{-\alpha} \left(\frac{\exp(t) + \exp(-t)}{2} \right),$$

que quan $t \rightarrow -\infty$ es comporta com $M \exp((\alpha - 1)t)$.

2.5 Exemple d'aplicació del mètode DE

L'objectiu d'aquesta secció és calcular

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{\cos \pi x}{\sqrt{1-x}} dx \quad (2.5.1)$$

usant el mètode d'integració doble-exponencial. S'ha implementat el mètode DE per aquest exemple amb l'objectiu de comprovar que la funció `intnum` de Pari/GP ens dona el mateix resultat.

Observem que $f(x)$ té una singularitat en $x = 1$. Sabem que en aquesta situació el canvi òptim és $x = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(t)\right)$ com hem vist a l'apartat 2.3. El programa inclòs a l'apèndix B.1 usa aquest canvi per calcular (2.5.1), prenent $\alpha = 1$.

El punt clau en implementar el mètode DE numèricament és saber quina amplada h escollir a l'hora d'aplicar la regla dels trapezoides. Per triar-la, usem (2.2.5). Fixem-nos que l'error de discretització és independent al canvi de variable escollit, ja que és sempre $\Delta I_h = O(\exp(-\frac{2\pi}{h}\alpha))$ com s'ha vist en (2.2.2). Per tant, hem de calcular l'error de truncament segons el canvi de variable que usem. En el cas que estem considerant, $x = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(t)\right)$, l'error de truncament és

$$\exp\left(-\frac{\pi}{2} \exp(nh)\right),$$

on n és tal que $N = 2n + 1$ i N és el nombre total d'avaluacions de la funció f . Aleshores, igualant l'error de discretització amb l'error de truncament obtenim

$$h = \frac{1}{n} \log\left(\frac{4\alpha}{h}\right). \quad (2.5.2)$$

Per resoldre aquesta equació hem d'aplicar el Teorema del Punt Fix de Banach, enunciat en l'apèndix A.2, per saber que existeix una única h que la compleix. Per comprovar que la funció $\frac{1}{n} \log\left(\frac{4\alpha}{h}\right)$ és contractiva veiem que la seva derivada és més petita que 1 en valor absolut per $h \in \left[\frac{1}{n}, \infty\right)$ per qualsevol n . Aquest fet el podem veure a la figura 2.3 per $n = 10$, i s'ha comprovat també explorant les gràfiques per diferents n .

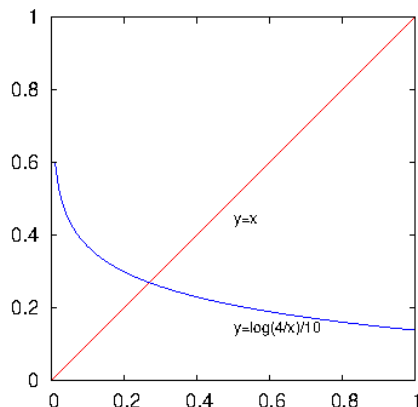


Figura 2.3: Representació gràfica de l'equació $h = \frac{1}{n} \log\left(\frac{4\alpha}{h}\right)$ per $\alpha = 1$ i $n = 10$.

El Teorema del Punt Fix de Banach (o en la seva versió més simple, el Lema de Contracció), vegis l'apèndix A.2, ens permet aleshores assegurar l'existència d'una única h que satisfà l'equació 2.5.2, i que la iteració simple $h_0 = 0$, $h_{k+1} = h_k + \frac{1}{n} \log(4\alpha n)$, convergeix a la solució. Així s'obté,

$$\begin{aligned} h_0 &= \frac{1}{n}, \\ h_1 &= \frac{1}{n} \log(4\alpha n), \\ h_2 &= \frac{1}{n} \log\left(\frac{4\alpha n}{\log(4\alpha n)}\right) = \frac{1}{n} [\log(4\alpha n) - \log(\log(4\alpha n))]. \end{aligned}$$

Com que $\log(\log(4\alpha n))$ és molt més petit en comparació a $\log(4\alpha n)$, obtenim

$$h \approx \frac{1}{n} \log(4\alpha n).$$

En concordança amb aquesta estimació prèvia, a la línia 11 del codi del programa B.1 usem

$$h \approx \frac{2}{N} \log(2\alpha N),$$

on $N = 2n + 1$ és el nombre total d'avaluacions de la funció f , usant la notació de l'apartat 2.2.3.

En el programa B.1 calculem la integral 2.5.1 de dues maneres diferents per cada n . La primera manera és la fórmula DE, que en aquest exemple és

$$I = \frac{\pi h}{2} \sum_{k=-n}^{+n} f\left(\tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)\right) \frac{\cosh(kh)}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh(kh)\right)}$$

on $f(x) = \frac{\cos(\pi x)}{\sqrt{1-x}}$. Això està programat amb un bucle *for* en les línies 10-14 del codi i al resultat el guardem en la variable *suma*. La segona manera és guardant en la variable

I_{pari} el valor de la funció `intnum` de Pari/GP a la línia 15. Com ja hem dit, l'objectiu del programa és veure que les dues maneres ens donen el mateix resultat. Fent la gràfica de l'error entre I_{pari} i $suma$ veiem que aquest error decau de manera $\exp(-n)$, com hem pogut comprovar fent un ajustament lineal amb la comanda `fit` amb el programa de Gnuplot⁴ i com podem veure a la figura 2.4.

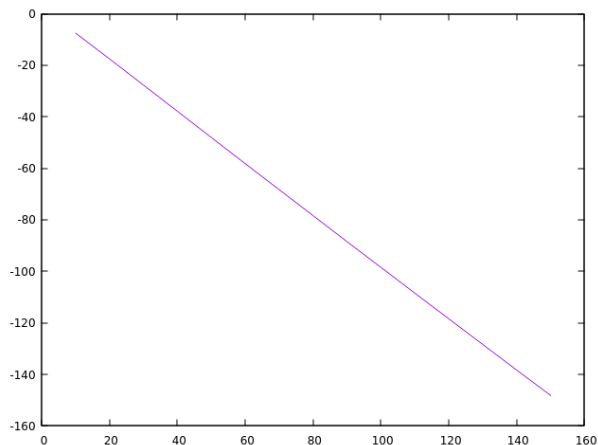


Figura 2.4: Representació de l'error $|I_{pari} - suma|$ en escala logarítmica neperiana en funció de n . Vegis el codi B.1 pels detalls del càlcul de I_{pari} i $suma$.

⁴<http://www.gnuplot.info/>

Capítol 3

Integrals oscil·latòries i exemples

Les integrals oscil·latòries són un tipus d'integral que costen de calcular numèricament, en general. Les fórmules d'integració interpolatòria o gaussiana acostumen a donar un error relativament gran pel fet que només s'avaluen en una sèrie d'abscisses triades sense tenir en compte el caràcter oscil·latori de l'integrand.

En aquest capítol s'explora la possibilitat d'usar el mètode DE per aquest tipus d'integrals oscil·latòries. Si el decaïment oscil·latori és lent, aleshores no es pot usar el mètode doble-exponencial tal com s'ha explicat en el capítol anterior, sinó que s'ha de fer un altre tipus de canvi de variable per tal de poder aplicar la regla dels trapezis. Aquest fet es veurà al primer apartat d'aquest capítol. El mètode DE sí que es pot aplicar a les integrals oscil·latòries en què el decaïment oscil·latori sigui ràpid, almenys exponencial, com es veurà en el segon apartat del capítol.

3.1 Integrals oscil·latòries amb decaïment lent

Tot i que el mètode d'integració doble-exponencial és útil per diferents tipus d'integrals, aquest no funciona bé per integrals de tipus Fourier amb un decaïment oscil·latori lent, com

$$\begin{aligned} I_s &= \int_0^{\infty} f_1(x) \sin(\omega x) dx, \\ I_c &= \int_0^{\infty} f_1(x) \cos(\omega x) dx. \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Com s'explica en [9], va ser gràcies a un estudiant de segon any de grau, en Takuya Ooura, que va proposar un tipus de transformació que permetia avaluar aquest tipus d'integrals oscil·latòries amb decaïment lent de manera eficient. Ooura va enviar-li una carta a Mori informant del seu descobriment i, en Mori, va comprovar que el que deia l'estudiant era correcte usant diferents tipus d'integracions numèriques. Mori i Ooura van escriure una publicació el 1991 on explicaven aquest canvi que s'explica a continuació i que apareix en les publicacions [11, 12]. El canvi en qüestió compleix:

$$\begin{aligned} \phi(-\infty) &= 0, \quad \phi(+\infty) = \infty, \\ \phi'(t) &\rightarrow 0 \text{ de manera doble-exponencial quan } t \rightarrow -\infty, \\ \phi(t) &\rightarrow t \text{ de manera doble-exponencial quan } t \rightarrow +\infty, \end{aligned} \tag{3.1.2}$$

i es transformen les integrals (3.1.1) usant

$$\begin{aligned} I_s : x &= \frac{M\phi(t)}{\omega}, \\ I_c : x &= \frac{M\phi\left(t - \frac{\pi}{2M}\right)}{\omega}, \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

on M és una constant. Aquestes propietats del canvi s'exigeixen per tal que quan la x tendeix a infinit, les abscisses de la regla dels trapezis s'apropen de forma doble-exponencial als zeros de $\sin(\omega x)$ o $\cos(\omega x)$. Això justifica que la fórmula d'integració usant aquest canvi podria comportar-se millor per a integrals oscil·latòries, tal com es veu en [11, 9, 12].

El primer canvi que van proposar Ooura i Mori i que compleix (3.1.2) i (3.1.3) va ser

$$\phi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-k \sinh(t))}. \quad (3.1.4)$$

Més tard, Ooura va proposar el següent canvi [12], que resulta ser més eficient,

$$\begin{aligned} \phi(t) &= \frac{t}{1 - \exp(-2t - \alpha(1 - \exp(-t)) - \beta(\exp(t) - 1))}, \\ \beta &= 1/4, \\ \alpha &= \frac{\beta}{\sqrt{1 + M \log(1 + M)/4\pi}}. \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Efectuant el canvi (3.1.3) que compleix les condicions (3.1.2) obtenim,

$$\begin{aligned} I_s &= M \int_{-\infty}^{\infty} f_1\left(\frac{M\phi(t)}{\omega}\right) \sin(M\phi(t)) \frac{1}{\omega} \phi'(t) dt, \\ I_c &= M \int_{-\infty}^{\infty} f_1\left(\frac{M\phi\left(t - \frac{\pi}{2M}\right)}{\omega}\right) \cos\left(M\left(t - \frac{\pi}{2M}\right)\right) \frac{1}{\omega} \phi'\left(t - \frac{\pi}{2M}\right) dt. \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

I podem aplicar la regla dels trapezis truncant el sumatori infinit, obtenint

$$I_{s,h}^{(N)} = Mh \sum_{k=-N_-}^{N_+} f_1\left(\frac{M\phi(kh)}{\omega}\right) \sin(M\phi(kh)) \frac{1}{\omega} \phi'(kh), \quad (3.1.7)$$

i

$$I_{c,h}^{(N)} = Mh \sum_{k=-N_-}^{N_+} f_1\left(\frac{M\phi\left(kh - \frac{\pi}{2M}\right)}{\omega}\right) \cos\left(M\left(kh - \frac{\pi}{2M}\right)\right) \frac{1}{\omega} \phi'\left(kh - \frac{\pi}{2M}\right), \quad (3.1.8)$$

on $N = N_- + N_+ + 1$ és el nombre d'avaluacions de la funció f_1 i $Mh = \pi$.

Es veu que per quan k es fa gran,

$$\begin{aligned} \sin(M\phi(kh)) &\approx \sin(Mkh) = \sin(k\pi) = 0, \\ \cos\left(M\phi\left(kh - \frac{\pi}{2M}\right)\right) &\approx \cos\left(Mkh - \frac{\pi}{2}\right) = \cos\left(kh - \frac{\pi}{2}\right) = 0, \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

és a dir, que efectivament es compleix que els punts s'apropen als zeros de $\sin(\omega x)$ o $\cos(\omega x)$ de manera doble exponencial.

Fixem-nos que podem escriure (3.1.7) com

$$I_{s,h}^{(N)} = Mh \sum_{k=-N_-}^{N_+} f_1 \left(\frac{A_k}{\omega} \right) \frac{B_k}{\omega}, \quad (3.1.10)$$

$$A_k = M\phi(kh),$$

$$B_k = \sin(A_k)\phi'(kh),$$

i (3.1.8) com

$$I_{c,h}^{(N)} = Mh \sum_{k=-N_-}^{N_+} f_1 \left(\frac{A_k}{\omega} \right) \frac{B_k}{\omega}, \quad (3.1.11)$$

$$A_k = M\phi\left(kh - \frac{\pi}{2M}\right),$$

$$B_k = \cos(A_k)\phi' \left(kh - \frac{\pi}{2M} \right).$$

A l'hora de calcular aquestes integrals numèricament amb el canvi (3.1.5), s'ha de tenir en compte que no hem d'efectuar directament $\sin(A_n)$ ni $\cos(A_n)$ per n grans, perquè si avaluem aquestes funcions per arguments grans normalment ens donen errors grans. Aquest fet el vam poder comprovar, ja que en una primera implementació de l'exemple 3.1.1 que farem a continuació, no vam usar les següents identitats que es recomanen en [12]:

$$\sin \left(\frac{\pi k}{1 - d_k} \right) = (-1)^{-1} \sin \left(\frac{\pi k d_k}{1 - d_k} \right), \quad (3.1.12)$$

i pel cosinus

$$\cos \left(\frac{\pi k - \pi/2}{1 - d_k} \right) = (-1)^{-1} \sin \left(\frac{(\pi k - \pi/2)d_k}{1 - d_k} \right), \quad (3.1.13)$$

per $d_k \neq 1$, on

$$d_k = \exp(-2t - \alpha(1 - \exp(-t)) - \beta(e^t - 1)), \quad (3.1.14)$$

$$t = \begin{cases} kh & \text{per 3.1.12} \\ kh - \frac{\pi}{2M} & \text{per 3.1.13.} \end{cases}$$

Quan d_k és prou petit es pot avaluar la part de les identitats 3.1.12 i 3.1.13 amb alta precisió. Aleshores, per a valors grans de k escrivim els B_k de 3.1.7 i 3.1.8 com

$$B_k = \begin{cases} (-1)^k \phi'(kh) \sin(d_k A_k) & \text{en 3.1.10} \\ (-1)^k \phi' \left(kh - \frac{\pi}{2M} \right) \sin(d_k A_k) & \text{en 3.1.11.} \end{cases} \quad (3.1.15)$$

3.1.1 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment lent

En aquesta secció es treballa l'exemple d'integral oscil·latòria que apareix tant en [11, 12] com en l'ajuda de la funció `intnum` de Pari/GP,

$$\int_0^\infty \frac{\sin(x)}{x} dx = \frac{\pi}{2}. \quad (3.1.16)$$

L'objectiu d'aquesta secció és veure que la funció `intnum` de Pari/GP, per al cas d'una integral de tipus Fourier I_s , usa el mètode doble-exponencial amb els canvis (3.1.10) explicats a la secció anterior.

A l'ajuda de la funció `intnum` de Pari/GP [2] es diu que hem d'escriure

$$\text{intnum}(x = 0, [oo, -k * I], f(x)),$$

on $f(x) = \sin(kx)g(x)$, per integrands de la forma $\sin(kx)g(x)$ tals que $k > 0$ i $g(x)$ tendeix a 0 de manera decreixent lentament, com x^{-n} , i sense oscil·lar. En el nostre cas, $k = 1$ i $g(x)$ és $1/x$, com podem veure a la figura 3.1.

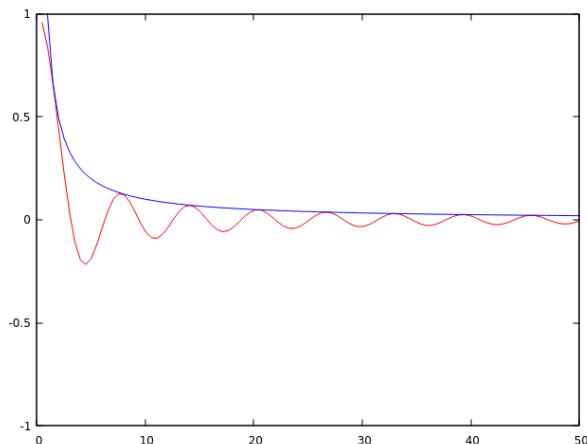


Figura 3.1: Comparació de la gràfica de la funció $\sin(x)/x$, representada en color vermell, amb la funció $1/x$, en color blau.

Efectivament, escrivint

$$\text{intnum}(x = 0, [oo, -1 * I], \sin(x)/x)$$

ens dona $\pi/2$ amb error nul.

Hem creat un programa que calcula de dues maneres diferents el valor de (3.1.16) per una n que fixarem a 50, 75, 100 i 106. A la línia 9 del codi del programa B.2 es veu que fixem $n = 50$, però per obtenir els diferents valors de la integral el que hem fet ha sigut anar canviant manualment aquest valor per obtenir fitxers de sortida per cada n . En aquest programa, provem per diferents M (recordem que M és una constant que ha de complir $Mh = \pi$) que el valor calculat usant el canvi (3.1.10) amb les indicacions (3.1.12) (entre les línies 12 i 22 del codi guardem el valor de la integral a la variable *suma*) és el mateix que usant la funció `intnum` de Pari/GP a la línia 24.

A la figura 3.2 es pot observar que per $n = 100$ i $M = 40$ ja s'aconsegueix una precisió de 10^{-30} . Es conclou dels resultats que la funció `intnum` es comporta com es detalla en [12] i com s'ha explicat a l'apartat anterior 3.1.

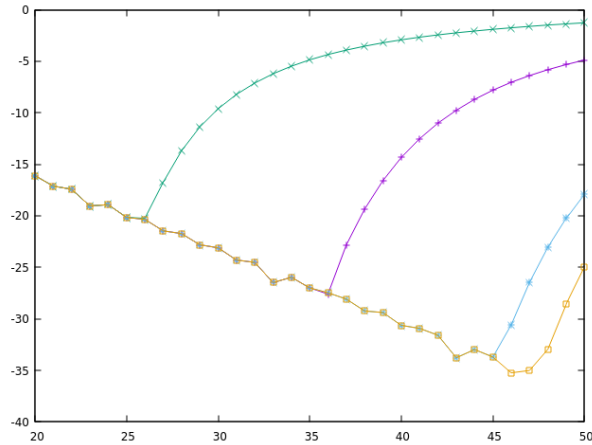


Figura 3.2: En l'eix horitzontal es representa M i en l'eix vertical el logaritme decimal de l'error del càlcul de la integral (3.1.16). Cada corba representada correspon a un valor de n fixat: en color turquesa $n = 50$, en lila $n = 75$, en blau per a $n = 100$ i en groc per a $n = 106$.

3.2 Integrals oscil·latòries amb decaïment ràpid

A diferència de les integrals oscil·latòries amb decaïment lent, les integrals oscil·latòries que decauen almenys exponencialment sí que es poden calcular usant el mètode DE.

3.2.1 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment ràpid

El següent exemple d'integral ha estat extret del capítol 1.3 de [7],

$$\kappa(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i\omega t}{\epsilon}\right) \frac{1}{\cosh^2(t)} dt. \quad (3.2.1)$$

on ω és la freqüència de la part oscil·latòria i ϵ és un petit paràmetre. A la referència [7] es proposa aquesta integral com a prototipus d'integrals que apareixen en problemes d'escissió de separatrius en sistemes dinàmics, com veurem en el capítol 4.

Resolució analítica (per residus). Aquesta integral es pot resoldre usant el Teorema dels Residus, enunciat en A.3, de la següent manera.

Considerem la corba tancada C que correspongui a la vora orientada del rectangle de vèrtexs $(-R, 0)$, $(R, 0)$, (R, π) i $(-R, \pi)$, com es pot veure a la figura 4.2. La funció

$$f(z) = \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}z)}{\cosh^2(z)}$$

és analítica en C excepte en el punt $z_0 = i\frac{\pi}{2}$, que és un pol d'ordre 2. Aleshores, pel Teorema dels Residus,

$$\int_C f(z)dz = 2\pi i \operatorname{Res}(f(z), z_0) = 2\pi i \left(-i \left(\frac{\omega}{\epsilon}\right) \exp\left(-\frac{\omega\pi}{2\epsilon}\right)\right). \quad (3.2.2)$$

D'altra banda, també podem escriure

$$\begin{aligned}
\int_C g(z) dz &= \int_{-R}^R \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x)}{\cosh^2(x)} dx \\
&+ \int_0^\pi \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}(R+iy))}{\cosh^2(R+iy)} i dy \\
&+ \int_R^{-R} \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}(x+i\pi))}{\cosh^2(x+i\pi)} dx \\
&+ \int_\pi^0 \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}(-R+iy))}{\cosh^2(-R+iy)} i dy \\
&= I_1 + I_2 + I_3 + I_4.
\end{aligned} \tag{3.2.3}$$

Quan $R \rightarrow \infty$, $I_2 \rightarrow 0$ i $I_4 \rightarrow 0$. Veiem-ho per I_2 (per I_4 és equivalent):

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^\pi \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}(R+iy))}{\cosh^2(R+iy)} i dy \right| &\leq \int_0^\pi \frac{\exp(-\frac{\omega}{\epsilon}y)}{\sinh^2(R)} dy = \frac{1}{\sinh^2(R)} \int_0^\pi \exp(-\frac{\omega}{\epsilon}y) dy \\
&= \frac{\epsilon}{\omega \sinh^2(R)} \left(1 - \exp\left(-\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right) \right) \rightarrow 0,
\end{aligned} \tag{3.2.4}$$

on hem usat que

$$\begin{aligned}
\left| i \exp\left(i\frac{\omega}{\epsilon}(R+iy)\right) \right| &= \exp\left(-\frac{\omega}{\epsilon}y\right), \\
|\cosh(R+iy)| &\geq \frac{|\exp(R+iy)| - |\exp(-(R+iy))|}{2} = \sinh(R).
\end{aligned}$$

Com que $\cosh(x+\pi i) = -\cosh(x)$,

$$\begin{aligned}
I_1 + I_3 &= \int_{-R}^R \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x)}{\cosh^2(x)} dx - \int_{-R}^R \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x) \exp(\frac{-\pi\omega}{\epsilon})}{\cosh^2(x)} dx \\
&= \left(1 - \exp\left(-\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right) \right) \int_{-R}^R \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x)}{\cosh^2(x)} dx.
\end{aligned}$$

Per tant, fent $R \rightarrow \infty$,

$$2\pi i \left(-i \left(\frac{\omega}{\epsilon} \right) \exp\left(-\frac{\omega\pi}{2\epsilon}\right) \right) = \int_C f(z) dz = \left(1 - \exp\left(-\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right) \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x)}{\cosh^2(x)} dx.$$

Aleshores,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\frac{\omega}{\epsilon}x)}{\cosh^2(x)} dx = \frac{\pi\omega}{\epsilon} \frac{2 \exp\left(-\frac{\omega\pi}{2\epsilon}\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right) \right)} = \frac{\pi\omega}{\epsilon} \frac{1}{\sinh\left(\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right)}. \tag{3.2.5}$$

Hem obtingut que la integral 3.2.1 és

$$\kappa(\epsilon) = \frac{\pi\omega}{\epsilon \sinh\left(\frac{\omega\pi}{\epsilon}\right)}, \tag{3.2.6}$$

i quan $\epsilon \rightarrow 0$ es comporta com

$$\frac{2\pi\omega}{\epsilon} \exp\left(-\frac{\omega\pi}{2\epsilon}\right). \tag{3.2.7}$$

Resolució numèrica (usant DE). L'objectiu d'aquest apartat és comprovar que la funció `intnum` de Pari/GP ens dona el mateix resultat que el que hem calculat per residus si triem adequadament els paràmetres per indicar el canvi adient de DE. Això ho farem comparant les solucions per diferents ϵ petites amb el comportament (3.2.7).

A l'ajuda de la funció `intnum` de Pari/GP es diu que hem d'explicitar el comportament de l'integrand a l'infinit escrivint $[\pm oo, \alpha]$, on $\alpha > 0$ és la manera en la qual decau ràpidament l'integrand, és a dir, de forma $\exp(-\alpha x)$, per tant, inclou les integrals oscil·latòries que tinguin un decaïment exponencial. En la figura 3.3 podem veure que la part real de l'integral (la part imaginària és 0 perquè l'integrand és senar) decau com $\exp(-2x)$, per tant, usarem la funció `intnum` de la següent manera per calcular el valor de la nostra integral:

$$\text{intnum}(x = [-oo, 2], [oo, 2], f(x, w, eps))$$

$$\text{on } f(x, w, eps) = \exp\left(\frac{i\omega x}{\epsilon}\right) \frac{1}{\cosh^2(x)}.$$

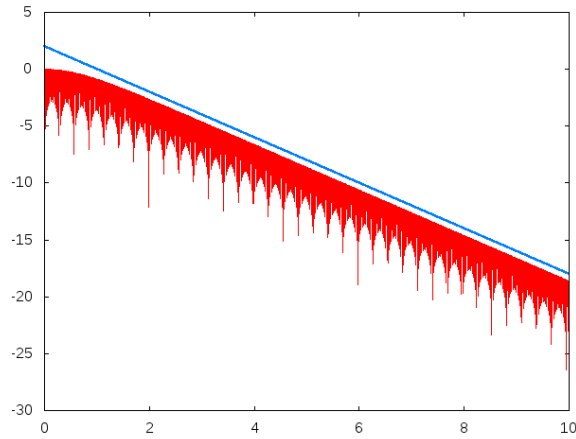


Figura 3.3: Comparació del decaïment de la funció $\cos(x\omega/\epsilon)/\cosh^2(x)$, per quan $\omega = 1$ i $\epsilon = 0.001$, en color vermell, amb $\exp(-2x)$, en color blau.

En el programa inclòs a l'apèndix B.3 calculem el valor de l'integral (3.2.1) usant la funció `intnum` per a diferents ϵ petits, des de 0.1 fins a 0.001 per poder comprovar que efectivament el valor de la integral es comporta com (3.2.7) prop del 0. A la línia 9 del codi fixem el paràmetre $\omega = 1$. En el bucle `forstep` de les línies 11 a la 17, per a cada ϵ entre 0.1 i 0.001, disminuint 0.001 a cada pas del bucle, el programa guarda a la variable `suma` el valor de la part real del càlcul de la integral (3.2.1) usant el mètode DE, és a dir, usant la funció `intnum` de Pari/GP i a la variable `teoric` guarda el valor (3.2.6) calculat usant el Teorema dels Residus. El programa també guarda a la variable `comportament` el comportament de la integral (3.2.1) que ha de tenir per cada epsilon segons (3.2.7).

A la figura 3.4 esquerra veiem que entre 0.04 i 0.1 el resultat obtingut aplicant la fórmula DE s'adequa exactament al comportament teòric (3.2.7). Suposant que el valor correcte de la integral és el calculat en (3.2.6), és a dir el valor que guardem en `teoric`, comparem l'error de càlcul entre `suma` i `teoric` a la figura 3.4 dreta. Observem que l'error del càlcul augmenta a mesura que ϵ s'apropa a 0, ja que la integral és exponencialment petita en ϵ i treballem amb una precisió finita.

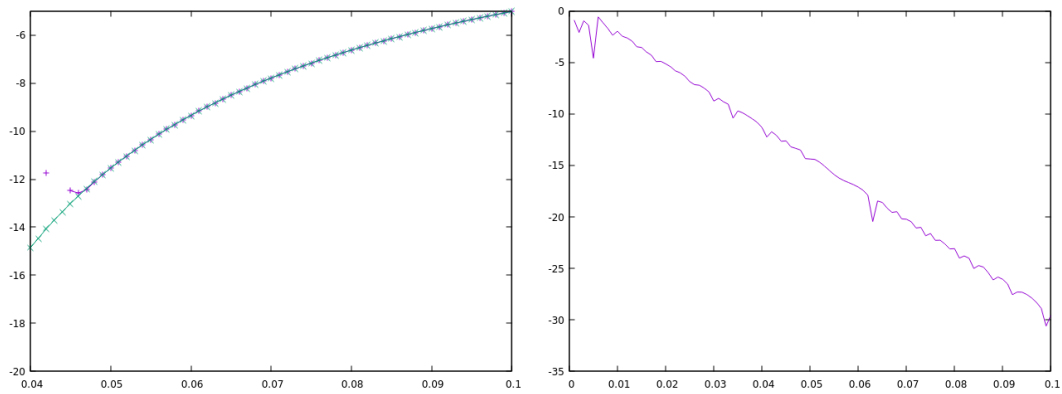


Figura 3.4: Esquerra: es representa el valor numèric de la integral 3.2.1 en escala decimal en funció d' ϵ . En blau es mostra el comportament teòric (3.2.7) de la integral (3.2.1) i en lila el resultat del càlcul de (3.2.1) usant el mètode DE. Dreta: es representa l'error del càlcul de la integral (3.2.1) usant el mètode DE, en escala logarítmica decimal, en funció d' ϵ .

Observació 3.2.1. Al document de Pari/GP¹ s'explica que la funció **intnum** està implementada de manera que quan la funció a integrar és oscil·latòria amb un decaïment ràpid, l'usuari la pot tractar com una funció (no oscil·latòria) que decau de manera exponencial $\exp(-\alpha x)$, indicant la α , com s'explica a l'apartat 3.2.1. En cas que la funció a integrar sigui oscil·latòria i tingui un decaïment lent, l'usuari pot explicitar-ho de la manera que s'ha explicat en l'apartat 3.1.1.

¹https://pari.math.u-bordeaux.fr/dochtml/html/Sums__products__integrals_and_similar_functions.html

Capítol 4

Escissió de separatrius: la integral de Melnikov

En aquest capítol es tracta un exemple provinent de l'estudi d'un sistema dinàmic. Concretament, s'aplicarà el mètode DE per estimar una integral de Melnikov. Aquesta proporciona una mesura de l'escissió de les separatrius quan es pertorba un sistema integrable. Primer, es presenta el problema d'escissió de separatrius que ens portarà a considerar la integral de Melnikov. A la següent secció es considera el sistema de Duffing i es calcularà la integral de Melnikov corresponent, comparant el càlcul analític amb l'aproximació numèrica.

4.1 La integral de Melnikov

En aquesta secció es presenta la teoria bàsica sobre l'escissió de separatrius que es pot trobar a [5]. També s'ha consultat el treball d'en Sergi Juncosa [6] que inclou en particular una discussió semblant sobre aquest tema.

Considerem un sistema autònom pertorbat, on la pertorbació sí que depèn del temps, és a dir,

$$x' = f(x) + \epsilon g(t; x) = \begin{pmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \end{pmatrix} + \epsilon \begin{pmatrix} g_1(t; x) \\ g_2(t; x) \end{pmatrix}, \quad x = (u, v)^T \in \mathbb{R}^2 \quad (4.1.1)$$

on f i g són de classe C^r , $r \geq 2$, estan acotades, i g és una funció T -periòdica respecte t . Sigui f un camp vectorial hamiltonià definit en \mathbb{R}^2 o en un obert $U \subset \mathbb{R}^2$. Ens interessa estudiar casos en els quals les solucions no pertorbades, és a dir, per $\epsilon = 0$, es puguin parametritzar globalment.

Definim l'aplicació de Poincaré $P_\epsilon^{t_0} : \Sigma^{t_0} \rightarrow \Sigma^{t_0}$, $P_\epsilon^{t_0} = \varphi(t_0 + T; t_0, x_0, \epsilon)$, $(t_0, x_0) \in \Sigma^{t_0}$, on $\Sigma^{t_0} = \{(t, x) : t = t_0 \in [0, T]\} \subset S^1 \times \mathbb{R}^2$ és la secció global de Poincaré en t_0 del flux associat a (4.1.1).

Suposem que el sistema (4.1.1) per $\epsilon = 0$ té una òrbita homoclínica $q_0(t)$ que va a parar a un punt de sella hiperbòlic p_0 . Es té que $P_0^{t_0}(p_0) = p_0$ per a qualsevol $t_0 \in [0, T]$, és a dir, p_0 és un punt fix de $P_0^{t_0}$, i és de tipus sella hiperbòlic perquè l'aplicació de Poincaré preserva l'estabilitat del punt. Siguin $W_\Sigma^{u/s}$ les varietats invariants del punt fix de l'aplicació de

Poincaré $P_0^{t_0}$. Observem que $\Gamma^0 := \{q_0(t) : t \in \mathbb{R}\} \cup \{p_0\} = W_\Sigma^u(p_0) \cap W_\Sigma^s(p_0)$ conté punts homoclíncics no transversals per $P_0^{t_0}$.

Sota aquestes condicions és fàcil veure, pel Teorema de la Funció Implícita enunciat a l'apèndix A.6, que per un $\epsilon > 0$ prou petit, el sistema (4.1.1) té una única òrbita periòdica $\gamma_\epsilon^{t_0} = p_0 + O(\epsilon)$ i, per tant, l'aplicació de Poincaré $P_\epsilon^{t_0}$ té un únic punt de sella hiperbòlic $p_\epsilon^{t_0} = p_0 + O(\epsilon)$.

Usant el Lema de Gronwall, enunciat a l'apèndix A.5, podem veure quin és el comportament de les varietats locals invariants estables i inestables $W_{loc}^s(\gamma_\epsilon)$, $W_{loc}^u(\gamma_\epsilon)$, de l'òrbita periòdica pertorbada. Aquestes varietats són properes, en norma $\|\cdot\|_{C^r}$, a les varietats invariants de l'òrbita periòdica no pertorbada $p_0 \times S^1$. Les òrbites $q_\epsilon^s(t; t_0)$, $q_\epsilon^u(t; t_0)$ contingudes en $W_{loc}^s(\gamma_\epsilon)$ i $W_{loc}^u(\gamma_\epsilon)$, respectivament, amb condicions inicials $x_0^s(\epsilon)$, $x_0^u(\epsilon) \in \Sigma^{t_0}$, properes a $x_0 \in \Gamma^0$, són

$$\begin{aligned} q_\epsilon^s(t; t_0) &:= \varphi(t; t_0, x_0^s(\epsilon), \epsilon) = \varphi(t; t_0, x_0^s(0), 0) + \epsilon_1^s(t; t_0) + O(\epsilon^2), \quad t \in [t_0, \infty) \\ q_\epsilon^u(t; t_0) &:= \varphi(t; t_0, x_0^u(\epsilon), \epsilon) = \varphi(t; t_0, x_0^u(0), 0) + \epsilon_1^u(t; t_0) + O(\epsilon^2), \quad t \in (-\infty, t_0]. \end{aligned} \quad (4.1.2)$$

Definició 4.1.1. Donat un sistema com (4.1.1), anomenem *separació de les varietats* $W^u(p_\epsilon^{t_0})$ i $W^s(p_\epsilon^{t_0})$ en $(t_0, x_0) \in \Sigma^{t_0}$ a la diferència

$$d(t_0) = q_\epsilon^u(t_0; t_0) - q_\epsilon^s(t_0; t_0)$$

on $q_\epsilon^u(t_0; t_0)$, respectivament $q_\epsilon^s(t_0; t_0)$, és el primer tall amb $f^\perp(x_0) = (-f_2(x_0), f_1(x_0))$ per temps positius, respectivament per temps negatius, de la solució pertorbada amb condició inicial un punt de la varietat invariant local W_Σ^u inestable, respectivament W_Σ^s estable, de l'aplicació de Poincaré.

L'aplicació $d : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ defineix una funció que mesura la distància entre les dues varietats invariants. Fent la projecció de $q_1^u - q_1^s$ sobre f^\perp , perquè les aproximacions de primer ordre sobre ϵ de $q_\epsilon^u(t_0; t_0)$ i $q_\epsilon^s(t_0; t_0)$ no necessàriament estan sobre $f^\perp(x_0)$, tenim

$$d(t_0) = \epsilon \frac{\langle f^\perp(x_0), q_1^u(t_0; t_0) - q_1^s(t_0; t_0) \rangle}{|f^0(x_0)|} + O(\epsilon^2). \quad (4.1.3)$$

Definició 4.1.2. Donat un sistema com 4.1.1, i sota les condicions considerades fins ara, definim la *integral de Melnikov* com

$$M(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle dt.$$

Observem que fent el canvi de variable $t \rightarrow t + t_0$ podem reescriure la integral de Melnikov de la manera següent,

$$M(t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle f^\perp(\varphi(t; 0, x_0, 0)), g(t + t_0, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle dt. \quad (4.1.4)$$

Veiem que la funció de Melnikov no és res més que el primer terme de l'expansió de Taylor de $d(t_0)$ respecte ϵ , llevat constants de normalització.

Escrivint

$$\Delta(t; t_0) := \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), q_1^u(t; t_0) - q_1^s(t; t_0) \rangle =: \Delta^u(t; t_0) - \Delta^s(t; t_0),$$

tenim que $d(t_0) = \epsilon \frac{\Delta(t_0; t_0)}{|f(x_0)|} + O(\epsilon^2)$.

Anem a calcular la diferencial de $\Delta^s(t; t_0)$ respecte t :

$$D_t \Delta^s(t; t_0) = \langle Df(\varphi(t; t_0, x_0, 0))\varphi'(t; t_0, x_0, 0), q_1^s(t; t_0) \rangle + \langle f(\varphi(t; t_0, x_0, 0), D_t q_1^s(t; t_0)) \rangle.$$

Com que sabem que la solució q_1^s de la primera equació variacional respecte t aproxima uniformement les solucions que estan en la varietat invariant estable per $t \geq t_0$,

$$D_t q_1^s(t; t_0) = Df(\varphi(t; t_0, x_0, 0))q_1^s(t; t_0) + g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0))$$

i també sabem que $\frac{d}{dt}\varphi(t; t_0, x_0, 0) = f(\varphi(t; t_0, x_0, 0))$, aleshores podem reescriure

$$\begin{aligned} D_t \Delta^s(t; t_0) &= \langle Df(\varphi(t; t_0, x_0, 0))f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), q_1^s(t; t_0) \rangle + \\ &\langle f(\varphi(t; t_0, x_0, 0), Df(\varphi(t; t_0, x_0, 0))q_1^s(t; t_0) + g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0))) \rangle \\ &= \text{Tr}(Df(\varphi(t; t_0, x_0, 0)))\Delta^s(t; t_0) + \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

Com que hem considerat que f és Hamiltonià, aleshores $\text{Tr} Df = \text{div} f \equiv 0$ i, per tant,

$$D_t \Delta^s(t; t_0) = \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle.$$

Integrant-ho des de t_0 fins a ∞ ,

$$\Delta^s(\infty; t_0) - \Delta^s(t_0; t_0) = \int_{t_0}^{\infty} \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle dt.$$

Tenim que $\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t; t_0, x_0, 0) = p_0$ i p_0 és un punt crític de f de classe C^r , per tant, $\lim_{t \rightarrow \infty} f(\varphi(t; t_0, x_0, 0)) = 0$. Sabem que $q_1^s(t; t_0)$ està acotat, aleshores

$$- \Delta^s(t_0; t_0) = \int_{t_0}^{\infty} \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle dt. \quad (4.1.6)$$

Repetint el mateix argument per $\Delta^u(t; t_0)$, obtenim

$$\Delta^u(t_0; t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} \langle f^\perp(\varphi(t; t_0, x_0, 0)), g(t, \varphi(t; t_0, x_0, 0)) \rangle dt. \quad (4.1.7)$$

Aleshores sumant 4.1.7 i 4.1.6 tenim que $\Delta(t_0; t_0) = \Delta^u(t_0; t_0) - \Delta^s(t_0; t_0) = M(t_0)$, que substituint-ho en 4.1.3 queda

$$d(t_0) = \epsilon \frac{M(t_0)}{|f(x_0)|} + O(\epsilon^2).$$

Aquesta és la relació que hi ha entre la integral de Melnikov i la separació de les varietats estable i inestable.

4.2 Exemple d'aplicació d'integral de Melnikov

El següent exemple es troba a la secció 4.5 de [5]. També s'ha consultat el treball de l'Enric Ribera [13] que en particular inclou aquest exemple. Es tracta d'estudiar l'escissió de separatrius en el sistema de Duffing quan està sotmès a un forçament periòdic $\gamma \cos(\omega t)$ i un fregament δv :

$$\begin{cases} u' &= v, \\ v' &= u - u^3 + \epsilon(\gamma \cos(\omega t) - \delta v) \end{cases} \quad (4.2.1)$$

on l'amplitud del forçament periòdic γ , la freqüència ω i l'amortidor δ són paràmetres i ϵ és un paràmetre petit.

Amb la notació de l'apartat anterior,

$$\begin{aligned} f(x) = f(u, v) &= \begin{pmatrix} f_1(u, v) \\ f_2(u, v) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ u - u^3 \end{pmatrix} \\ g(t; x) = g(t; (u, v)) &= \begin{pmatrix} g_1(t; (u, v)) \\ g_2(t; (u, v)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \gamma \cos(\omega t) - \delta v \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Primer, estudiem el sistema sense pertorbar, és a dir, per $\epsilon = 0$. Imposant $f_1(u, v) = 0$, $f_2(u, v) = 0$, és a dir,

$$\begin{cases} v &= 0 \\ u(1 - u^2) &= 0 \end{cases} \quad (4.2.3)$$

obtenim que el sistema té tres punts fixos: $(0, 0)^T$, $(1, 0)^T$ i $(-1, 0)^T$. Si denotem per X el camp vectorial corresponent a 4.2.1, aleshores

$$DX(u, v) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 - 3u^2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Avaluant aquesta matriu en els punts fixos veiem que $DX(1, 0)$ i $DX(-1, 0)$ tenen valors propis $\lambda_{1,2} = \pm\sqrt{2}$ i, per tant, són punts fixos de tipus centre lineal, i pel punt $(0, 0)$ la matriu té valors propis $\lambda_{1,2} = \pm 1$, és a dir, $(0, 0)$ és un punt fix de tipus sella hiperbòlic.

Per $\epsilon = 0$ tenim un camp conservatiu, que admet la integral primera

$$E(u, v) = \frac{v^2}{2} - \frac{u^2}{2} + \frac{u^4}{4}.$$

El nivell $E(u, v) = 0$ està format per dues òrbites homoclíniques, que formen una figura vuit, i el punt de sella $(0, 0)^T$, que li direm p_0 , com es representa en la figura 4.2 creada usant el programa PPlane¹.

Volem trobar les òrbites que estan al mateix nivell d'energia que el punt de sella, és a dir, aquelles que compleixin $H(x, y) = 0$. A partir d'aquesta equació tenim que

$$v = \pm \sqrt{u^2 + \frac{u^4}{2}} = \pm u \sqrt{1 + \frac{u^2}{2}} = \dot{u},$$

¹<https://www.cs.unm.edu/~joel/dfield/>

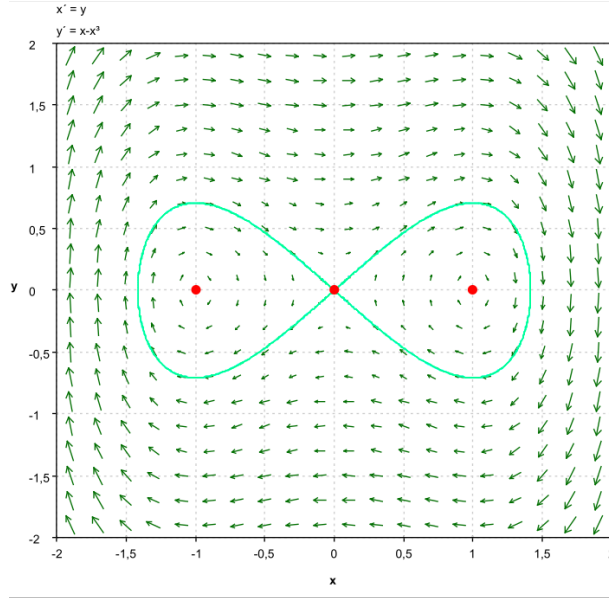


Figura 4.1: Representació de les dues òrbites homoclíniques (en blau) i els punts fixos (en vermell) del sistema 4.2.1 sense pertorbar.

i usant variables separades podem resoldre la següent equació diferencial

$$\begin{aligned}
\pm t + D &= \int \frac{du}{u\sqrt{1 + \frac{u^2}{2}}} = \int \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}y\sqrt{1 - y^2}} dy = \int \frac{-\sin x}{\cos x \sqrt{\sin^2 x}} dx \\
&= - \int \frac{\cos x}{1 - \sin^2(x)} dx = - \int \frac{dt}{1 - t^2} = -\frac{1}{2} \int \frac{1}{1 - t} dt - \frac{1}{2} \int \frac{1}{1 + t} dt \\
&= \frac{1}{2} \ln |1 - t| - \frac{1}{2} \ln |1 + t| = \frac{1}{2} \ln \left| \frac{1 - t}{1 + t} \right| \\
&= \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 - \sin \left(\arccos \frac{u}{\sqrt{2}} \right)}{1 + \sin \left(\arccos \frac{u}{\sqrt{2}} \right)} \right) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{u^2}{2}}}{\frac{u}{\sqrt{2}}} \right) = \operatorname{arcsech} \left(\frac{u}{\sqrt{2}} \right),
\end{aligned} \tag{4.2.4}$$

on D és una constant. Aleshores,

$$u = \pm \sqrt{2} \operatorname{sech}(t + D) \tag{4.2.5}$$

i podem prendre $D = 0$ imposant $u = 0$ per $t = 0$. A partir de $u = \pm \sqrt{2} \operatorname{sech}(t)$, tenim que $v = \dot{u} = \mp \sqrt{2} \tanh(t) \operatorname{sech}(t)$.

Per tant, les dues solucions homoclíniques $q_0^+(t)$, $q_0^-(t)$ amb condició inicial $q_0^+(0) = (\sqrt{2}, 0)$ i $q_0^-(0) = (-\sqrt{2}, 0)$, respectivament, són

$$\begin{aligned}
q_0^+(t) &= \varphi(t; 0, (\sqrt{2}, 0), 0) = \left(\sqrt{2} \operatorname{sech}(t), -\sqrt{2} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \right)^T =: (u_0^+(t), v_0^+(t))^T \\
q_0^-(t) &= \varphi(t; 0, (-\sqrt{2}, 0), 0) = \left(-\sqrt{2} \operatorname{sech}(t), \sqrt{2} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \right)^T =: (u_0^-(t), v_0^-(t))^T.
\end{aligned} \tag{4.2.6}$$

Calculem la integral de Melnikov corresponent a l'òrbita q_0^+ en t_0 (l'escissió de q_0^- és semblant degut a la simetria del sistema),

$$\begin{aligned}
M(t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle f^\perp(u_0^+(t), v_0^+(t)), g(t+t_0, (u_0^+(t), v_0^+(t))) \rangle dt \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \langle (-u_0^+(t) + (u_0^+(t))^3, v_0^+(t)), (0, \gamma \cos(\omega(t+t_0)) - \delta v_0^+(t)) \rangle dt \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} (-\sqrt{2} \operatorname{sech}(t) \tanh(t)) \gamma \cos(\omega(t+t_0)) dt - \int_{-\infty}^{\infty} \delta (-\sqrt{2} \operatorname{sech}(t) \tanh(t))^2 dt \\
&= -\sqrt{2} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \cos(\omega(t+t_0)) dt - 2\delta \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t)^2 \tanh(t)^2 dt \\
&= -\sqrt{2} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \cos(\omega(t+t_0)) dt - \frac{4\delta}{3}.
\end{aligned} \tag{4.2.7}$$

Usant la relació trigonomètrica del cosinus de la suma de dos angles, és a dir,

$$\cos(a+b) = \cos(a)\cos(b) - \sin(a)\sin(b)$$

obtenim

$$\begin{aligned}
M(t_0) &= -\sqrt{2} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \cos(\omega t) \cos(\omega t_0) \\
&\quad + \sqrt{2} \gamma \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \sin(\omega t) \sin(\omega t_0) dt - \frac{4\delta}{3}.
\end{aligned} \tag{4.2.8}$$

Com que el terme $\operatorname{sech}(t) \tanh(t) \cos(\omega t)$ és senar, aleshores l'integral s'anul·la i queda,

$$M(t_0) = \sqrt{2} \gamma \sin(\omega t_0) \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \sin(\omega t) dt - \frac{4\delta}{3}. \tag{4.2.9}$$

Resolució analítica (per residus). Per calcular $I = \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \sin(\omega t) dt$, notem que

$$I = \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \exp(i\omega t) dt \right)$$

i aquesta integral la podem calcular usant el Teorema dels Residus.

Considerem la corba tancada C que correspongui a la vora orientada del rectangle de vèrtexs $(-R, 0)$, $(R, 0)$, (R, π) i $(-R, \pi)$, com representem a la figura 4.2.

La funció

$$g(z) = \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \exp(i\omega t) = \frac{\sinh(z)}{\cosh^2(z)} \exp(i\omega t)$$

és analítica en C excepte en el punt $z_0 = i\frac{\pi}{2}$, on té una singularitat de tipus pol. Pel Teorema dels Residus,

$$\int_C g(z) dz = 2\pi i \operatorname{Res}(g(z), z_0) = 2\pi i \omega \exp(-\omega \frac{\pi}{2}). \tag{4.2.10}$$

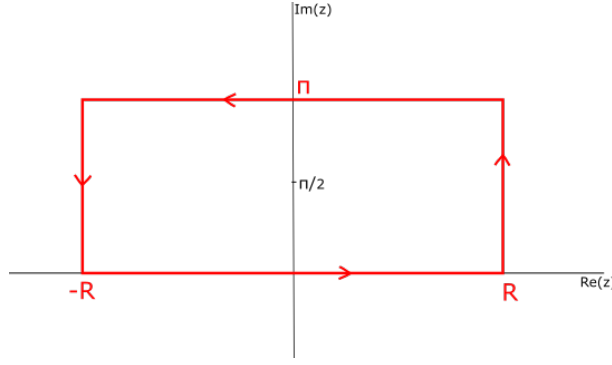


Figura 4.2: Corba tancada C

D'altra banda, també podem escriure

$$\begin{aligned}
\int_C g(z) dz &= \int_{-R}^R \frac{\sinh(x)}{\cosh^2(x)} \exp(i\omega x) dx \\
&+ \int_0^\pi \frac{\sinh(R + iy)}{\cosh^2(R + iy)} \exp(i\omega(R + iy)) i dy \\
&+ \int_R^{-R} \frac{\sinh(x + \pi i)}{\cosh^2(x + \pi i)} \exp(i\omega(x + \pi i)) dx \\
&+ \int_\pi^0 \frac{\sinh(-R + iy)}{\cosh^2(-R + iy)} \exp(i\omega(-R + iy)) i dy \\
&= I_1 + I_2 + I_3 + I_4.
\end{aligned} \tag{4.2.11}$$

Quan $R \rightarrow \infty$, $I_2 \rightarrow 0$ i $I_4 \rightarrow 0$. Veiem-ho per I_2 (per I_4 és equivalent):

$$\begin{aligned}
\left| \int_0^\pi \frac{\sinh(R + iy)}{\cosh^2(R + iy)} \exp(i\omega(R + iy)) i dy \right| &= \left| \int_0^\pi \frac{\tanh(R + iy)}{\cosh(R + iy)} \exp(i\omega(R + iy)) i dy \right| \\
&\leq \int_0^\pi \frac{\exp(-\omega y)}{\sinh(R)} dy = \frac{1}{\sinh(R)} \int_0^\pi \exp(-\omega y) dy \\
&= \frac{1}{\sinh(R)} \frac{(1 - \exp(-\omega\pi))}{\omega} \rightarrow 0,
\end{aligned} \tag{4.2.12}$$

on hem usat que

$$\begin{aligned}
|i \exp(i\omega(R + iy))| &= \exp(-\omega y), \\
|\cosh(R + iy)| &\geq \frac{|\exp(R + iy)| - |\exp(-(R + iy))|}{2} = \sinh(R),
\end{aligned}$$

i que $|\tanh(R + iy)| \leq 1$.

Com que $\cosh(x + \pi i) = -\cosh(x)$ i $\sinh(x + \pi i) = -\sinh(x)$,

$$\begin{aligned}
I_1 + I_3 &= \int_{-R}^R \frac{\sinh(x)}{\cosh^2(x)} \exp(i\omega x) dx - \int_{-R}^R \frac{-\sinh(x)}{(-\cosh(x))^2} \exp(i\omega x) \exp(-\omega\pi) dx \\
&= (1 + \exp(-\omega\pi)) \int_{-R}^R \frac{\sinh(x)}{\cosh^2(x)} \exp(i\omega x) dx.
\end{aligned}$$

Per tant, fent $R \rightarrow \infty$

$$2\pi i \omega \exp(-\omega \frac{\pi}{2}) = \int_C g(z) dz = (1 + \exp(-\omega\pi)) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(x)}{\cosh^2(x)} \exp(i\omega x) dx.$$

Aleshores,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \sin(\omega t) dt &= \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \exp(i\omega t) dt \right) \\ &= \operatorname{Im} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh(x)}{\cosh^2(x)} \exp(i\omega x) dx \right) \\ &= \operatorname{Im} \left(\frac{2\pi i \omega \exp(-\omega \frac{\pi}{2})}{1 + \exp(-\omega\pi)} \right) \\ &= \pi\omega \frac{2 \exp(-\omega \frac{\pi}{2})}{1 + \exp(-\omega\pi)} \\ &= \pi\omega \operatorname{sech}(\omega \frac{\pi}{2}). \end{aligned} \tag{4.2.13}$$

Per tant, la integral de Melnikov que ens cal calcular és

$$M(t_0) = \sqrt{2}\gamma \sin(\omega t_0) \pi\omega \operatorname{sech}(\omega \frac{\pi}{2}) - \frac{4\delta}{3}. \tag{4.2.14}$$

Resolució numèrica (usant DE). El resultat d'aquesta integral es pot calcular també numèricament usant el mètode d'integració doble-exponencial com hem fet en el programa de l'apèndix B.4.

L'integrand de 4.2.7 és una funció oscil·latòria que decau de manera ràpida, de forma $\exp(-x)$, com es representa a la figura 4.3.

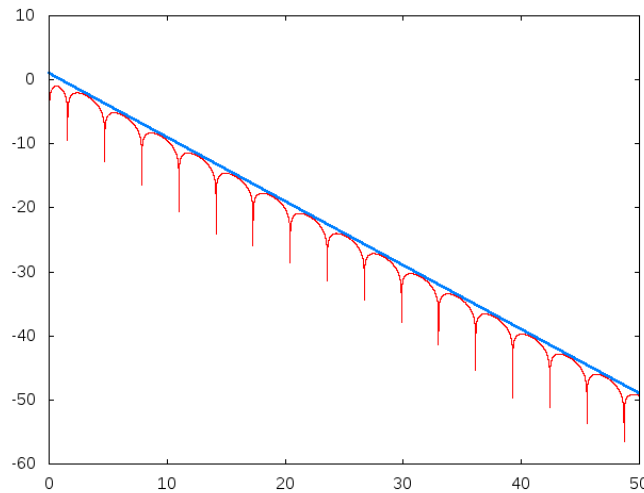


Figura 4.3: Representació del decaïment de la funció $\sinh(x) \cos(\omega(x + t_0)) / \cosh^2(x)$, per $\omega = 1$ i $t_0 = 1$, en vermell, i la funció $\exp(-x)$ representada en blau.

De mateixa manera que en l'apartat 3.2, usarem la funció `intnum` de la següent manera

$$\text{intnum}(x = [-oo, 1], [oo, 1], funcio(x, w, t0)),$$

on

$$funcio(x, w, t_0) = \frac{\sinh(x) \cos(w(x + t_0))}{\cosh^2(x)}$$

per calcular la part

$$\int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}(t) \tanh(t) \cos(\omega(t + t_0)) dt$$

de la integral de Melnikov $M(t_0)$.

A les línies 9 i 10 del programa de l'apèndix B.4 hem fixat les variables $\omega = 1$, $\gamma = 1$, i hem considerat el cas en què $\delta = 0$ perquè hem suprimit la part $-\frac{4\delta}{3}$ de la integral, és a dir, no considerem el fregament. Hem calculat $M(t_0)$ per diferents t_0 , que van des de 0 fins a $\pi/4$, usant la funció `intnum` com hem descrit anteriorment. Hem considerat la variable *teoric* de les línies 13 i 20 del codi com a valor exacte de la integral que estem calculant, que és l'obtingut en 4.2.14 usant el Teorema dels Residus. A la figura 4.4 podem veure com els resultats de $M(t_0)$ usant el mètode DE s'adeqüen perfectament als resultats de $M(t_0)$ calculada usant el Teorema dels Residus, per cada t_0 .

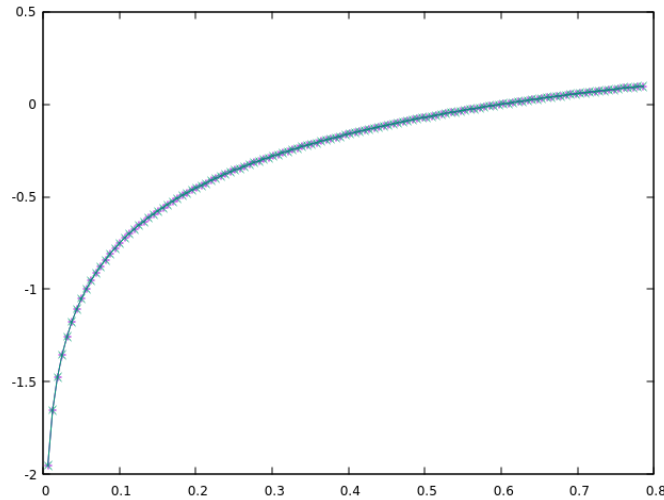


Figura 4.4: En lila es representa el valor de $M(t_0)$ per cada t_0 de l'eix d'abscisses usant el mètode DE, i en blau el valor de $M(t_0)$ calculat en 4.2.13.

Aquest exemple il·lustra que el mètode DE amb un canvi adequat dona fórmules d'integració per calcular integrals oscil·latòries quan el decaïment és exponencial. Com s'ha vist, aquestes apareixen en sistemes dinàmics en considerar la integral de Melnikov al llarg d'una òrbita homoclínica (o heteroclínica). És important notar que en molts exemples no es té una expressió explícita de la parametrització de l'òrbita homoclínica o que aquesta pot ser molt complicada. El càlcul numèric de la integral de Melnikov és essencial en aquests contextos.

Conclusions

Com a conclusió es fa un resum de tot el que s'ha vist en aquest treball.

S'ha començat el treball recordant les fórmules d'integració interpolatòries i s'ha estudiat les fórmules gaussianes. La quadratura gaussiana també permet que la funció a integrar tingui alguna singularitat, ja que la part que causa aquesta singularitat es pot pensar com el pes de la fórmula gaussiana i així s'evita l'avaluació de la funció en aquesta singularitat.

Des del punt de vista numèric, per poder aconseguir una bona precisió de l'error a l'hora d'aproximar una integral usant fórmules interpolatòries o gaussianes cal, en general, fer moltes avaluacions de la funció a integrar. A més, en el cas de la quadratura gaussiana s'han de calcular els zeros dels polinomis ortogonals i els pesos de les fórmules. Per aquest motiu s'ha considerat un altre mètode, el doble-exponencial, que té unes propietats analítiques d'optimalitat que suggereixen un bon comportament numèric. Aquest mètode permet integrar funcions analítiques en intervals finits o infinits i considerar singularitats als extrems de l'interval. El mètode DE també permet aproximar integrals oscil·latòries de manera precisa, tot i que per aquelles integrals que decauen lentament s'ha de fer un canvi diferent, com s'ha explicat en el treball.

S'ha dedicat un capítol a estudiar l'escissió de separatrius, la qual es pot mesurar usant la integral de Melnikov, un tipus d'integrals que apareixen quan es vol mesurar la distància entre les varietats estable i inestable d'un sistema autònom pertorbat periòdicament. En el context considerat, s'obtenen integrals oscil·latòries que decauen de manera exponencial, per tant, es pot aplicar el mètode DE per calcular-les, com hem vist en l'exemple de l'equació de Duffing.

Durant tot el treball s'ha intentat descriure com es pot implementar el mètode DE per diferents tipus d'integrals i s'ha anat comprovant que la funció `intnum` de Pari/GP implementa aquest mètode de manera molt semblant a la que hem estudiat. Així doncs, cal distingir diferents situacions segons el decaïment als extrems de l'interval d'integració, en cas que l'integrand tingui una singularitat a l'extrem de l'interval, o quan algun dels extrems de l'interval és infinit, i també es té en compte si l'integrand oscil·la i decau de manera lenta.

Com a cloenda del treball, m'agradaria mencionar alguns dels aspectes que han quedat pendents i podrien ser motiu d'ampliació de l'estudi.

- Fer una explicació més detallada sobre l'optimalitat de la fórmula doble-exponencial.
- Entendre els detalls analítics del canvi de variable usat per aplicar el mètode doble-exponencial a integrals oscil·latòries amb decaïment lent.
- Aprofundir en el fenomen de l'escissió de separatrius.

- Fer una comparativa més exhaustiva del mètode doble-exponencial amb altres mètodes en diferents contextos, com per exemple, les fórmules gaussianes, el mètode de Romberg, i també altres mètodes específics per a aproximar integrals oscil·latòries, com el mètode de la fase estacionària.
- Treballar algun exemple de sistemes dinàmics en què no tinguem l'òrbita heteroclínica de manera explícita.

Tot i això, considero que ha estat un treball molt complet on s'han cobert aspectes teòrics, analítics i computacionals de diversos àmbits de la matemàtica. A més, m'ha permès reforçar els conceptes que he après durant el grau de matemàtiques. Per últim, també he de dir que he obtingut coneixements que no hagués adquirit si no hagués fet aquest treball final de grau en particular.

Bibliografia

- [1] A. Aubanell, A. Benseny i A. Delshams. *Útiles básicos de cálculo numérico*. Editorial Labor, S.A., 1993. ISBN: 84-335-5156-6.
- [2] C. Batut et al. *Users' guide to PARI/GP*. <http://pari.math.u-bordeaux.fr/>.
- [3] Henri Cohen. *Numerical Algorithms in Pari/GP*. Slides of a presentation at the Université de Bordeaux. Available at: <https://scripts.mit.edu/~kedlaya/wiki/images/9/91/Cohen.pdf>. Nov. de 2015.
- [4] Gene H. Golub i John H. Welsch. *Calculation of Gauss quadrature rules*. Vol. 23. 106, loose microfiche suppl. 1969, A1- A10. DOI: 10.2307/2004418. URL: <https://doi.org/10.2307/2004418>.
- [5] John Guckenheimer i Philip Holmes. *Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields*. Vol. 42. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 1983, pàg. xvi+453. ISBN: 0-387-90819-6. DOI: 10.1007/978-1-4612-1140-2. URL: <https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1140-2>.
- [6] Sergi Juncosa. *Tipus d'òrbites en sistemes de Filippov i persistència d'òrbites homoclíniques*. Treball de final de grau. Director: A. Veirol, UB, 2020.
- [7] Eric Lombardi. *Oscillatory integrals and phenomena beyond all algebraic orders*. Vol. 1741. Lecture Notes in Mathematics. With applications to homoclinic orbits in reversible systems. Springer-Verlag, Berlin, 2000, pàg. xvi+413. ISBN: 3-540-67785-2. DOI: 10.1007/BFb0104102. URL: <https://doi.org/10.1007/BFb0104102>.
- [8] Pascal Molin. *Numerical Integration with the double exponential method*. Colloquium à Oldenburg. Available at: <https://webusers.imj-prg.fr/~pascal.molin/pdf/1612oldenburg.pdf>. Des. de 2016.
- [9] Masatake Mori. *Discovery of the double exponential transformation and its developments*. Vol. 41. 4. 2005, pàg. 897-935. URL: <http://projecteuclid.org/euclid.prims/1145474600>.
- [10] Masatake Mori. *Quadrature formulas obtained by variable transformation and the DE-rule*. Vol. 12/13. 1985, pàg. 119-130. DOI: 10.1016/0377-0427(85)90011-1. URL: [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(85\)90011-1](https://doi.org/10.1016/0377-0427(85)90011-1).
- [11] Masatake Mori i Masaaki Sugihara. *The double-exponential transformation in numerical analysis*. Vol. 127. 1-2. Numerical analysis 2000, Vol. V, Quadrature and orthogonal polynomials. 2001, pàg. 287-296. DOI: 10.1016/S0377-0427(00)00501-X. URL: [https://doi.org/10.1016/S0377-0427\(00\)00501-X](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(00)00501-X).
- [12] Takuya Ooura i Masatake Mori. *A robust double exponential formula for Fourier-type integrals*. Vol. 112. 1-2. Numerical evaluation of integrals. 1999, pàg. 229-241. DOI: 10.1016/S0377-0427(99)00223-X. URL: [https://doi.org/10.1016/S0377-0427\(99\)00223-X](https://doi.org/10.1016/S0377-0427(99)00223-X).

- [13] Enric Ribera. *Perturbed invariant manifolds and chaos*. Treball de final de grau. Director: E. Fontich, UB, 2015.
- [14] J. Stoer i R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*. Translated from the German by R. Bartels, W. Gautschi and C. Witzgall. Springer-Verlag, New York-Heidelberg, 1980, pàg. ix+609. ISBN: 0-387-90420-4.
- [15] Hidetosi Takahasi i Masatake Mori. *Double exponential formulas for numerical integration*. Vol. 9. 1973, pàg. 721 - 741. DOI: 10.2977/prims/1195192451. URL: <https://doi.org/10.2977/prims/1195192451>.

Apèndix A

Resultats preliminars

En aquest apèndix es llisten alguns resultats preliminars que són necessaris per entendre certes parts del treball. Tots els resultats que es recullen en aquest apèndix s'han vist en diverses assignatures del grau de matemàtiques i s'han extret dels apunts de classe.

A.1 Teorema del Valor Mig per a Integrals

Teorema A.1.1. *(Teorema del Valor Mig per a Integrals) Siguin g_1 i g_2 funcions reals definides en $[0, 1]$, tals que g_1 és contínua i g_2 no canvia de signe. Aleshores, existeix algun $\tau \in [0, 1]$ de manera que es compleix*

$$\int_0^1 g_1(t)g_2(t)dt = g_1(\tau) \int_0^1 g_2(t)dt.$$

A.2 Teorema del Punt Fix de Banach

Teorema A.2.1. *(Teorema del Punt Fix de Banach) Sigui (X, d) un espai mètric complet i sigui $f : X \rightarrow X$ una aplicació contractiva en X . Aleshores f té un únic punt fix.*

A.3 Teorema dels Residus

Teorema A.3.1. *(Teorema dels Residus) Sigui A una regió i siguin $\{z_1, \dots, z_n\} \in A$ n punts d' A . Sigui f una funció analítica en $A \setminus \{z_1, \dots, z_n\}$, és a dir, z_1, \dots, z_n són singularitats aïllades de f . Sigui C una corba tancada d' A homòtopa a un punt d' A . Suposant que z_i no pertany a la corba C , aleshores*

$$\int_C = 2\pi i \sum_{i=1}^n \text{Res}(f(z); z_i) \text{Ind}(C; z_i)$$

on $\text{Res}(f(z); z_i)$ és el residu de f en z_i i $\text{Ind}(C; z_i)$ és l'índex de la corba C respecte z_i .

A.4 Fórmula Integral de Cauchy

Teorema A.4.1. (Fórmula Integral de Cauchy) Sigui B una regió simplement connexa al pla complex. Suposem que $f(z)$ és una funció analítica en B . Sigui z_0 un punt de B . Suposem que C és un camí tancat que pertany a B i envolta z_0 en sentit positiu; aleshores

$$f^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \int_C \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz.$$

A.5 Lema de Gronwall

Teorema A.5.1. (Lema de Gronwall) Sigui $I = [a, b]$, $u, v : I \rightarrow \mathbb{R}_+$ contínues. Si

$$u(t) \leq \alpha + \int_a^t u(s)v(s)ds, \quad \forall t \in [a, b], \alpha \geq 0.$$

Aleshores, $u(t) \leq \alpha \exp(\int_a^t v(s)ds)$.

A.6 Teorema de la Funció implícita

Teorema A.6.1. (Teorema de la Funció Implícita) Siguin $A \subset \mathbb{R}^n$ i $B \subset \mathbb{R}^m$. Donada $f : A \times B \rightarrow \mathbb{R}^m$ considerem el sistema d'equacions

$$f(x, y) = 0.$$

Si

- existeix $(a, b) \in A \times B$ tal que $f(a, b) = 0$;
- $f \in \mathcal{C}^r(A \times B)$ amb $r \geq 1$;
- $\det(D_y f(a, b)) \neq 0$.

Aleshores,

1. existeixen entorns oberts $U \subset A$ i $V \subset B$ d'a i b, respectivament, i una funció $g : U \rightarrow V$ tal que, per a tot $(x, y) \in U \times V$,

$$y = g(x) \iff f(x, y) = 0;$$

2. $g \in \mathcal{C}^r(U)$;
3. per a tot $x \in U$ es té

$$Dg(x) = - (D_y f(x, g(x)))^{-1} D_x f(x, g(x)).$$

Apèndix B

Codi

Aquest apèndix és un recull de tots els programes usats en els apartats on s'ha volgut comprovar numèricament el mètode doble-exponencial.

En els programes B.3 i B.4 hem treballat amb 50 dígits de precisió. En el B.2 amb 150 i en el B.1 amb 400 dígits de precisió. Fem notar que hem triat les precisions que ens han permès realitzar els càlculs sense haver-nos de preocupar de la propagació de l'error en les operacions aritmètiques per tal de veure l'efecte dels errors de truncament i discretització, errors dels quals parlem en 2.2.

B.1 Exemple d'aplicació del mètode DE

```
1 main()={
2 local(k,n,h,suma,presuma,er,Ipari);
3
4 filename="tansin.out";
5 system("rm"filename);
6
7 write(filename,"#nI_hI_pariI_pari-I_h|");
8
9 forstep(n=10,150,10,
10     suma=0;
11     for(k=-n,n, h=(2./(2*n+1))*log(2*(2*n+1)));
12     suma=suma+funcio(tanh(Pi*sinh(k*h)/2))*cosh(k*h)/((cosh(Pi*sinh(k*h)/2))*(cosh(
13         Pi*sinh(k*h)/2)));
14     );
15     suma=(Pi*h/2)*suma;
16     Ipari = intnum(x=-1,1,funcio(x));
17     er = abs(Ipari-suma);
18     write(filename,"n"suma"Ipari"er);
19 );
20 system("sed-i's/E/e/g'filename");
21 }
22
23 funcio(x)={
24 local(val);
25 val=cos(Pi*x)/sqrt(1-x);
26 return(val);
27 }
```

B.2 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment lent

```
1 main()={
2 local(k,n,h,suma,er,M,w,dn,sgn);
3
4 filename="oscilatoriasin_50.out";
5 system("rm"filename);
6
7 write(filename,"#M░░I_h░|I_pari░-░I_h|");
8
9 n = 50; /*discretitzacio*/
10
11 for(M=20,50,
12     h=Pi/M; bet = 1/4; alph = bet/sqrt(1+M*log(1+M)/(4*Pi)); /*constants del canvi
13     */
14     /*sumo trapezis*/
15     suma=0;
16     for(k=-n,n, t=k*h;
17         Ak=M*canvi(t,M); dk=exp(-2*t-alpha*(1-exp(-t))-bet*(exp(t)-1));
18         sgn=(-1)^k; Bk=derivadaCanvi(t,M)*sin(dk*Ak)*sgn;
19         suma=suma+funcio(Ak)*Bk;
20     );
21
22     suma=(M*h)*suma;
23
24     er = abs(intnum(x=0,[oo,-I],funcio(x)*sin(x))-suma);
25     write(filename,"░"M"░"suma"░"er);
26 );
27
28 system("sed-ι' s/░E/e/g'░"filename);
29
30 }
31
32 funcio(x)={
33 local(val);
34 val=1/x;
35 return(val);
36 }
37
38 canvi(x,M)={
39 local(res,pE);
40 pE=-exp(-2*x-alpha*(1-exp(-x))-bet*(exp(x)-1));
41 if(abs(x)<1.e-20, pE=-exp(-2*xx-alpha*(1-exp(-xx))-bet*(exp(xx)-1)); val = xx/(1+pE)
42     ; val=truncate(val); val=subst(val,xx,x); return(val););
43 val = x/(1+pE);
44 return(val);
45 }
46
47 derivadaCanvi(x,M)={
48 local(val,pE);
49 pE=-exp(-2*x-alpha*(1-exp(-x))-bet*(exp(x)-1));
50 if(abs(x)<1.e-20, pE=-exp(-2*xx-alpha*(1-exp(-xx))-bet*(exp(xx)-1)); val= 1+pE-xx*pE
51     *(-2-alpha*exp(-xx)-bet*exp(xx));
52     val=polrecip(truncate(taylor(polrecip(truncate(val)),xx,ps-1)))*
53     xx^2; /*així puc treure el zero màquina de l'ordre 1 de la
54     serie*/
55     val=val/((1+pE)^2); val=truncate(val); val=subst(val,xx,x);
56     return(val););
57 val= 1+pE-x*pE*(-2-alpha*exp(-x)-bet*exp(x)); val=val/((1+pE)^2);
58 return(val);
59 }
```

B.3 Exemple d'integral oscil·latòria amb decaïment ràpid

```
1 main()={
2 local(N,suma,er,w,eps,teoric);
3
4 filename="lombardi.out";
5 system("rm"filename);
6
7 write(filename,"#eps_░resultat_░real-░pari_░comportament");
8
9 w = 1;
10
11 forstep(eps=0.1,0.001,-0.001,
12     suma = real(intnum(x=[-oo,2],[oo,2],funcio(x,w,eps)));
13     teoric = Pi*w/(eps*sinh(w*Pi/(2*eps)));
14     er = abs(teoric-suma);
15     comportament = 2*Pi*w*exp(-w*Pi/(2*eps))/eps;
16     write(filename,"_eps"_"suma"_"er"_"comportament");
17 );
18 system("sed-ι' s/░E/e/g'░"filename);
19
20 }
21
22 funcio(x,w,eps)={
23 local(val);
24 val=exp(I*w*x/eps)/(cosh(x))^2;
25 return(val);
26 }
```

B.4 Exemple d'aplicació d'integral de Melnikov

```
1 main()={
2 local(N,suma,er,teoric,t0,w,gam);
3
4 filename="melnikov.out";
5 system("rm"filename);
6
7 write(filename,"#t0_░I_pari_░teoric-░I_pari_░teoric");
8
9 w = 1;
10 gam = 1;
11 t0 = 0.;
12 suma = (-1)*gam*sqrt(2)*intnum(x=[-oo,1],[oo,1],funcio(x,w,t0));
13 teoric = sqrt(2)*gam*Pi*w*sin(w*t0)/cosh(w*Pi/2);
14 er = abs(teoric-suma);
15 write(filename,"_t0"_"suma"_"er"_"teoric");
16
17 t0 = Pi/500;
18 for(i=1,125,
19     suma = (-1)*sqrt(2)*gam*intnum(x=[-oo,1],[oo,1],funcio(x,w,i*t0));
20     teoric = sqrt(2)*gam*Pi*w*sin(w*i*t0)/cosh(w*Pi/2);
21     er = abs(teoric-suma);
22     write(filename,"_i*t0"_"suma"_"er"_"teoric");
23 );
24 system("sed-ι' s/░E/e/g'░"filename);
25
26 }
27
28 funcio(x,w,t0)={
29 local(val);
30 val=sinh(x)*cos(w*(x+t0))/(cosh(x))^2;
31 return(val);
32 }
```