Calcolo Numerico - Appunti

260236

marzo 2024

Prefazione

Ogni sezione di teoria presente in questi appunti, è stata ricavata dalle seguenti risorse:

- Calcolo Scientifico: Esercizi e problemi risolti con MATLAB e Octave. [1]

Altro:

GitHub repository

Indice

1 Equazioni non lineari

1.1 Introduzione

Il **calcolo degli zeri di una funzione** f reale di variabile reale o delle **radici dell'equazione** $f(x) = 0$, è un problema assai ricorrente nel Calcolo Scientifico.

In generale, *non è possibile* approntare metodi numerici che calcolino gli zeri di una generica funzione in un numero finito di passi. I metodi numerici per la risoluzione di questo problema sono pertanto necessariamente *iterativi*. A partire da uno o più dati iniziali, scelti convenientemente, essi generano una successione di valori $x^{(k)}$ che, sotto opportune ipotesi, convergerà ad uno zero α della funzione f studiata.

1.2 Il metodo di bisezione (o iterativo)

Sia f una funzione continua in $[a, b]$ tale che $f(a) f(b) < 0$. Per cui, vale il teorema degli zeri di una funzione continua, ossia f ammette almeno uno zero in (a, b).

Si supponga che ci sia un solo zero, indicato con α e nel caso in cui ce ne sia più di uno, individuare un intervallo tale che ne contenga solo uno.

Il **metodo di bisezione** (o **iterativo**) è una strategia che si suddivide nei seguenti passaggi:

1. **Dimezzare l'intervallo di partenza**;
2. **Selezionare tra i due sotto-intervalli ottenuti quello nel quale f cambia di segno agli estremi**;
3. **Applicare ricorsivamente questa procedura all'ultimo intervallo selezionato**.

Matematicamente parlando, dato $I^{(0)} = (a, b)$, e più in generale, $I^{(k)}$ il sotto-intervallo selezionato al passo k-esimo, si sceglie come $I^{(k+1)}$ il semi-intervallo di $I^{(k)}$ ai cui estremi f cambia di segno.

Questa procedura garantisce che ogni sotto-intervallo selezionato $I^{(k)}$ conterrà α. Questo poiché la successione $\left\{x^{(k)}\right\}$ dei punti medi dei sotto-intervalli $I^{(k)}$ dovrà ineluttabilmente convergere a α, in quanto la **lunghezza dei sotto-intervalli tende a** 0 per k che **tende all'infinito**.

Formalizziamo questa idea con un piccolo algoritmo. Ponendo:

$$a^{(0)} = a, \quad b^{(0)} = b, \quad I^{(0)} = \left(a^{(0)}, b^{(0)}\right), \quad x^{(0)} = \frac{a^{(0)} + b^{(0)}}{2}$$

Al passo $k \geq 1$ il metodo di bisezione calcolerà il semi-intervallo $I^{(k)} = \left(a^{(k)}, b^{(k)}\right)$ dell'intervallo $I^{(k-1)} = \left(a^{(k-1)}, b^{(k-1)}\right)$, nel seguente modo (si ricorda che α è lo zero che si sta cercando):

1. Calcolo $x^{(k-1)} = \dfrac{a^{(k-1)} + b^{(k-1)}}{2}$
2. Se $f\left(x^{(k-1)}\right) = 0$:
   (a) Allora $\alpha = x^{(k-1)}$ e l'algoritmo termina.
3. Altrimenti, se $f\left(a^{(k-1)}\right) \cdot f\left(x^{(k-1)}\right) < 0$:
   (a) Si pone $a^{(k)} = a^{(k-1)}$
   (b) Si pone $b^{(k)} = x^{(k-1)}$
   (c) Si incrementa $k+1$ e si ripete ricorsivamente.
4. Altrimenti, se $f\left(x^{(k-1)}\right) \cdot f\left(b^{(k-1)}\right) < 0$:
   (a) Si pone $a^{(k)} = x^{(k-1)}$
   (b) Si pone $b^{(k)} = b^{(k-1)}$
   (c) Si incrementa $k+1$ e si ripete ricorsivamente.

Example 1

Data la funzione $f(x) = x^2 - 1$, si parta da $a^{(0)} = -0.25$ e $b^{(0)} = 1.25$, e si applichi il metodo di bisezione:

1. Con $a^{(0)} = -0.25$ e $b^{(0)} = 1.25$:
   (a) Si calcola il punto medio:
   $$x^{(0)} = \frac{a^{(0)} + b^{(0)}}{2} = \frac{-0.25 + 1.25}{2} = 0.5$$
   (b) Si calcola la funzione con il punto medio come parametro:
   $$f(0.5) = 0.5^2 - 1 = -0.75$$
   (c) Dato che la funzione nel punto medio non è uguale a zero, l'algoritmo deve continuare. Per farlo, bisogna sostituire il punto medio con uno dei due estremi. Per decidere quale dei due sostituire, è necessario capire in quale cambia valore la funzione. Si verifica inizialmente con $a^{(0)}$:
   $$\begin{aligned} f\left(a^{(0)}\right) f\left(x^{(0)}\right) < 0 &= f(-0.25)\, f(0.5) < 0 \\ &= (-0.9375 \cdot -0.75) < 0 \\ &= 0.703125 \text{ ✗} \end{aligned}$$

(d) Si procede con l'algoritmo, provando adesso la $b^{(0)}$:

$$\begin{aligned} f\left(x^{(0)}\right) f\left(b^{(0)}\right) < 0 &= f(0.5)\, f(1.25) < 0 \\ &= (-0.75 \cdot 0.5625) < 0 \\ &= -0.421875 \checkmark \end{aligned}$$

(e) Si pone $a^{(1)} = x^{(0)} = 0.5$

(f) Si pone $b^{(1)} = b^{(0)} = 1.25$

(g) Si incrementa k, $k = k + 1 = 0 + 1 = 1$

2. Con $a^{(1)} = 0.5$ e $b^{(1)} = 1.25$:

(a) Si calcola il punto medio:

$$x^{(1)} = \frac{a^{(1)} + b^{(1)}}{2} = \frac{0.5 + 1.25}{2} = 0.875$$

(b) Si calcola la funzione con il punto medio come parametro:

$$f(0.875) = 0.875^2 - 1 = -0.234375$$

(c) Dato che la funzione nel punto medio non è uguale a zero, l'algoritmo deve continuare:

$$\begin{aligned} f\left(a^{(1)}\right) f\left(x^{(1)}\right) < 0 &= f(0.5)\, f(-0.234375) < 0 \\ &= (-0.75 \cdot -0.945068359375) < 0 \\ &= 0.70880126953125 \text{ ✗} \end{aligned}$$

(d) Si procede con l'algoritmo:

$$\begin{aligned} f\left(x^{(1)}\right) f\left(b^{(1)}\right) < 0 &= f(-0.234375)\, f(1.25) < 0 \\ &= (-0.945068359375 \cdot 0.5625) < 0 \\ &= -0.5316009521484375 \checkmark \end{aligned}$$

(e) Si pone $a^{(2)} = x^{(1)} = 0.875$

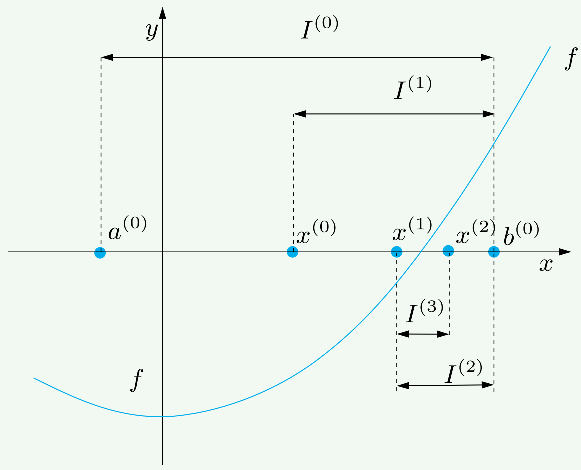
(f) Si pone $b^{(2)} = b^{(1)} = 1.25$

(g) Si incrementa k, $k = k + 1 = 1 + 1 = 2$

Si omettono i restanti calcoli per $k = 2, k = 3$, ma si lasciano qua di seguito i risultati:

- $I^{(2)} = (0.875, 1.25)$ e $x^{(2)} = 1.0625$
- $I^{(3)} = (0.875, 1.0625)$ e $x^{(2)} = 0.96875$

Nella seguente figura si possono vedere le iterazioni effettuate:



Iterazioni effettuate. [1]

Si noti che ogni intervallo $I^{(k)}$ contiene lo zero α. Inoltre, la successione $\left\{x^{(k)}\right\}$ converge necessariamente allo zero α in quanto ad ogni passo l'ampiezza $\left|I^{(k)}\right| = b^{(k)} - a^{(k)}$ dell'intervallo $I^{(k)}$ si dimezza.

Il valore $I^{(k)}$ può essere riassunto come:

$$\left|I^{(k)}\right| = \left(\frac{1}{2}\right)^k \cdot \left|I^{(0)}\right|$$

E di conseguenza l'**errore al passo k** può essere calcolato come:

$$\left|e^{(k)}\right| = \left|x^{(k)} - \alpha\right| < \frac{1}{2} \cdot \left|I^{(k)}\right| = \left(\frac{1}{2}\right)^{k+1} \cdot (b - a)$$

Inoltre, data una certa **tolleranza** ε, per **garantire che l'errore al passo** k **sia minore della tolleranza data** (ovvero, $\left|e^{(k)}\right| < \varepsilon$), basta applicare la seguente formula:

$$k_{\min} > \log_2\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right) - 1 \tag{1}$$

Dove $k_{\min}$ rappresenta il **numero <u>minimo</u> di iterazioni prima di trovare un intero che soddisfi la disuguaglianza**.

⚠ Possibile svantaggio

Il metodo di bisezione **non garantisce una riduzione monotona dell'errore**, ma solo il dimezzamento dell'ampiezza dell'intervallo all'interno del quale si cerca lo zero. Infatti, **non viene tenuto conto del reale andamento di** f e questo può provocare il mancato coinvolgimento di approssimazioni di α accurate.

1.3 Il metodo di Newton

Il **metodo di Newton** sfrutta la funzione f maggiormente rispetto al metodo di bisezione, usando i suoi valori e la sua derivata.

Si ricorda che la retta tangente alla curva $(x, f(x))$ nel punto $x^{(k)}$ è:

$$y(x) = f\left(x^{(k)}\right) + f'\left(x^{(k)}\right)\left(x - x^{(k)}\right)$$

Cercando un $x^{(k+1)}$ tale che la **retta tangente in quel punto sia uguale a zero** $y\left(x^{(k+1)}\right) = 0$, allora si trova:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f'\left(x^{(k)}\right)} \qquad k \geq 0 \tag{2}$$

Purché la derivata prima nel punto $x^{(k)}$ sia diversa da zero, cioè $f'\left(x^{k}\right) \neq 0$.

Questa equazione consente di calcolare una successione di valori $x^{(k)}$ a partire da un dato iniziale $x^{(0)}$. In altre parole, il **metodo di Newton calcola lo zero di f sostituendo localmente a f la sua retta tangente**.

A differenza del metodo di bisezione, tale **metodo converge allo zero in un solo passo quando la funzione f è lineare**, ovvero nella forma $f(x) = a_1 x + a_0$.

Limitazione

La **convergenza** del metodo di Newton <u>non</u> è garantita **per ogni scelta** di $x^{(0)}$, ma **soltanto** per valori di $x^{(0)}$ **sufficientemente vicini** ad α, ovvero **appartenenti ad un intorno** $I(\alpha)$ sufficientemente piccolo di α.

Alcune osservazioni a seguito anche di questa limitazione:

- A seguito di questa limitazione, risulta evidente che se $x^{(0)}$ è stato scelto opportunamente e se lo zero α è semplice ($f'(\alpha) \neq 0$), allora il metodo converge.

- Nel caso in cui f è derivabile con continuità pari a due, allora si ottiene la seguente convergenza:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x^{(k+1)-\alpha}}{\left(x^{(k)} - \alpha\right)^2} = \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)} \tag{3}$$

  Il significato è: se $f'(\alpha) \neq 0$ il metodo di Newton converge almeno quadraticamente o con ordine 2.

  In parole povere, **per k sufficientemente grande, l'errore al passo $(k+1)$-esimo si comporta come il quadrato dell'errore al passo k-esimo, moltiplicato per una costante indipendente da k.**

- Se lo zero α ha molteplicità m maggiore di 1, ovverosia:

$$f'(\alpha) = 0, \ldots, f^{(m-1)}(\alpha) = 0$$

Allora il metodo di Newton è ancora convergente, purché $x^{(0)}$ sia scelto opportunamente e $f'(x) \neq 0 \; \forall x \in I(\alpha) \setminus \{\alpha\}$. Tuttavia in questo caso l'ordine di convergenza è pari a 1. In tal caso, l'ordine 2 può essere ancora recuperato usando la seguente relazione al posto dell'equazione 2 ufficiale:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - m \cdot \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{f'\left(x^{(k)}\right)} \qquad k \geq 0 \tag{4}$$

Purché $f'\left(x^{(k)}\right) \neq 0$. Naturalmente, questo **metodo di Newton modificato** richiede una conoscenza a priori di m.

1.3.1 Come arrestare il metodo di Newton

Data una tolleranza fissa ε, esistono due tecniche applicabili per capire quando è necessario fermarsi ed evitare di continuare ad iterare:

- La **differenza fra due iterate consecutive**, il quale si arresta in corrispondenza del più piccolo intero k_{min} per il quale:

$$\left| x^{(k_{\text{min}})} - x^{(k_{\text{min}}-1)} \right| < \varepsilon \tag{5}$$

  (test sull'incremento).

- Un'altra tecnica applicata anche per altri metodi iterativi è il **residuo** al passo k, il quale è definito come:

$$r^{(k)} = f\left(x^{(k)}\right)$$

  Che è nullo quando $x^{(k)}$ è uno zero di f. In questo modo, il metodo viene arrestato alla prima iterata k_{min}:

$$\left| r^{(k_{\text{min}})} \right| = \left| f\left(x^{(k_{\text{min}})}\right) \right| < \varepsilon \tag{6}$$

  Da notare che tale tecnica fornisce una **stima accurata dell'errore** solo quando $|f'(x)|$ è circa pari a 1 in un intorno di I_α dello zero α cercato.

  Attenzione! Se la derivata non è circa pari a 1 in un intorno dello zero cercato, la tecnica porterà:

  - Ad una **sovrastima** dell'errore se $|f'(x)| \gg 1$ per $x \in I_\alpha$
  - Ad una **sottostima** dell'errore se $|f'(x)| \ll 1$ per $x \in I_\alpha$

1.4 Il metodo delle secanti

Nel caso in cui la funzione f non sia nota, il metodo di Newton non può essere applicato. Per fortuna, arriva in soccorso il **metodo delle secanti**, il quale esegue una valutazione di $f'\left(x^{(k)}\right)$ andando a sostituire quest'ultima con un **rapporto incrementale calcolato su valori di f già noti**.

Più formalmente, assegnati due punti $x^{(0)}$ e $x^{(1)}$, per $k \geq 1$ si calcola:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \left(\frac{f\left(x^{(k)}\right) - f\left(x^{(k-1)}\right)}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}\right)^{-1} \cdot f\left(x^{(k)}\right) \tag{7}$$

Quando converge?

Il metodo delle secanti converge a seguito di certe condizioni:

- **Converge ad $\boldsymbol{\alpha}$**, se:
  - α radice semplice[1];
  - $I(\alpha)$ è un opportuno intorno di α;
  - $x^{(0)}$ e $x^{(1)}$ sono sufficientemente vicini ad α
  - $f'(x) \neq 0 \; \forall x \in I(\alpha) \setminus \{\alpha\}$
- **Converge con ordine p super-lineare**, se:
  - $f \in \mathcal{C}^2(I(\alpha))$
  - $f'(\alpha) \neq 0$

  Ovvero, esiste una costante $c > 0$ tale che:

$$\left|x^{(k+1)} - \alpha\right| \leq c\left|x^{(k)} - \alpha\right|^p \qquad p = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618\ldots \tag{8}$$

- **Convergenza lineare**, se:
  - Radice α è multipla.

  Come succederebbe usando il metodo di Newton.

[1] $f'(\alpha) \neq 0$

Riferimenti bibliografici

[1] A. Quarteroni, F. Saleri, and P. Gervasio. *Calcolo Scientifico: Esercizi e problemi risolti con MATLAB e Octave*. UNITEXT. Springer Milan, 2017.

Index