

Indice

1	L'insieme dei numeri macchina	3
1.1	Introduzione al Calcolo Numerico	3
1.2	Rappresentazione in base di un numero reale	3
1.3	L'insieme dei numeri macchina	6
1.4	Errore Assoluto ed Errore Relativo	12
1.4.1	Operazioni Macchina	14
2	Equazioni non Lineari	19
2.1	Introduzione	19
2.2	Localizzazione delle radici	19
2.3	Il Metodo di Bisezione	21
2.3.1	Il metodo della falsa posizione	23
2.4	Metodi di Iterazione Funzionale	24
2.4.1	Ordine di Convergenza	28
2.4.2	Metodo di Newton-Raphson	31
2.4.3	Il metodo della direzione costante	36
2.4.4	Il Metodo della Secante	37
2.5	Sistemi di Equazioni non Lineari	38
2.5.1	Il Metodo di Newton per Sistemi non Lineari	40
3	Metodi numerici per sistemi lineari	43
3.1	Introduzione	43
3.2	Risoluzione di sistemi triangolari	46
3.3	Metodo di Eliminazione di Gauss	48
3.3.1	Costo Computazionale del Metodo di Eliminazione di Gauss	59
3.3.2	Strategie di Pivoting per il metodo di Gauss	61
3.4	La Fattorizzazione LU	67

3.5	Condizionamento di sistemi lineari	73
4	Interpolazione di dati e Funzioni	76
4.1	Introduzione	76
4.2	Il Polinomio Interpolante di Lagrange	78
4.2.1	Errore nell'interpolazione polinomiale	81
4.2.2	Convergenza del polinomio interpolante	84
4.3	Minimizzazione del Resto nel Problema di Interpolazione . . .	86
4.3.1	Polinomi di Chebyshev	86
4.4	Interpolazione con Funzioni Polinomiali a Tratti	92
4.4.1	Interpolazione con Funzioni Spline	92
4.5	Approssimazione ai minimi quadrati	93
4.5.1	La Retta di Regressione	94
5	Quadratura e Derivazione Numerica	98
5.1	Formule di Quadratura di Tipo Interpolatorio	98
5.2	Formule di Newton-Cotes	100
5.2.1	Formula dei Trapezi	101
5.2.2	Formula di Simpson	103
5.3	Formule di Quadratura Composte	105
5.3.1	Formula dei Trapezi Composta	105
5.3.2	Formula di Simpson Composta	108
5.4	La formula del punto di mezzo	109
5.4.1	Formula del punto di mezzo composta	110
5.5	Derivazione numerica	112
6	Metodi numerici per equazioni differenziali ordinarie	117
6.1	Introduzione	117
6.2	Classificazione dei metodi numerici	121
6.3	Il metodo di Eulero Esplicito	124
6.3.1	Studio della convergenza	126

Capitolo 1

L'insieme dei numeri macchina

1.1 Introduzione al Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è una disciplina che fa parte di un ampio settore della Matematica Applicata che prende il nome di Analisi Numerica. Si tratta di una materia che è al confine tra la Matematica e l'Informatica poichè cerca di risolvere i consueti problemi matematici utilizzando però una via algoritmica. In pratica i problemi vengono risolti indicando un processo che, in un numero finito di passi, fornisca una soluzione numerica e soprattutto che sia implementabile su un elaboratore. I problemi matematici che saranno affrontati nelle pagine seguenti sono problemi di base: risoluzione di sistemi lineari, approssimazione delle radici di funzioni non lineari, approssimazione di funzioni e dati sperimentali, calcolo di integrali definiti. Tali algoritmi di base molto spesso non sono altro se non un piccolo ingranaggio nella risoluzione di problemi ben più complessi.

1.2 Rappresentazione in base di un numero reale

Dovendo considerare problemi in cui l'elaboratore effettua computazioni esclusivamente su dati di tipo numerico risulta decisivo iniziare la trattazione degli argomenti partendo dalla rappresentazione di numeri. Innanzitutto è opportuno precisare che esistono due modi per rappresentare i numeri: la cosiddetta **notazione posizionale**, in cui il valore di una cifra dipende dalla posizione

in cui si trova all'interno del numero, da quella **notazione non posizionale**, in cui ogni numero è rappresentato da uno, o da un insieme di simboli (si pensi come esempio alla numerazione usata dai Romani). La motivazione che spinge a considerare come primo problema quello della rappresentazione di numeri reali è che ovviamente si deve sapere il livello di affidabilità dei risultati forniti dall'elaboratore. Infatti bisogna osservare che i numeri reali sono infiniti mentre la memoria di un calcolatore ha una capacità finita che ne rende impossibile la rappresentazione esatta. Una seconda osservazione consiste nel fatto che un numero reale ammette molteplici modi di rappresentazione. Per esempio scrivere

$$x = 123.47$$

è la rappresentazione, in forma convenzionale, dell'espressione

$$x = 123.47 = 1 \times 10^2 + 2 \times 10^1 + 3 \times 10^0 + 4 \times 10^{-1} + 7 \times 10^{-2},$$

da cui, mettendo in evidenza 10^2 :

$$x = 10^2 \times (1 \times 10^0 + 2 \times 10^{-1} + 3 \times 10^{-2} + 4 \times 10^{-3} + 7 \times 10^{-4})$$

mentre, mettendo in evidenza 10^3 lo stesso numero viene scritto come

$$x = 10^3 \times (1 \times 10^{-1} + 2 \times 10^{-2} + 3 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-4} + 7 \times 10^{-5})$$

deducendo che ogni numero, senza una necessaria rappresentazione convenzionale, può essere scritto in infiniti modi. Il seguente teorema è fondamentale proprio per definire la rappresentazione dei numeri reali in una determinata base β .

Teorema 1.2.1 *Sia $\beta \in \mathbb{N}$, $\beta \geq 2$, allora ogni numero reale x , $x \neq 0$, può essere rappresentato univocamente in base β nel seguente modo*

$$x = \pm \beta^p \sum_{i=1}^{\infty} d_i \beta^{-i}$$

dove $p \in \mathbb{Z}$, e i valori $d_i \in \mathbb{N}$ (detti **cifre**), verificano le seguenti proprietà:

1. $d_i \in \{0, 1, 2, 3, \dots, \beta - 1\}$;
2. $d_1 \neq 0$;
3. le cifre d_i non sono definitivamente uguali a $\beta - 1$.

Evitiamo la dimostrazione del Teorema 1.2.1 ma osserviamo che la terza ipotesi è essenziale per l'unicità della rappresentazione. Consideriamo infatti il seguente esempio (in base $\beta = 10$).

$$\begin{aligned}
 x &= 0.999999999 \dots \\
 &= 9 \times 10^{-1} + 9 \times 10^{-2} + 9 \times 10^{-3} + \dots \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} 9 \cdot 10^{-i} = 9 \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{10}\right)^i \\
 &= 9 \left(\frac{1}{10}\right) \left(1 - \frac{1}{10}\right)^{-1} \\
 &= 9 \left(\frac{1}{10}\right) \left(\frac{10}{9}\right) = 1.
 \end{aligned}$$

L'ultima uguaglianza deriva dalla convergenza della serie geometrica

$$\sum_{i=0}^{\infty} q^i = \frac{1}{1-q}$$

quando $0 < q < 1$, da cui segue

$$1 + \sum_{i=1}^{\infty} q^i = \frac{1}{1-q}$$

e

$$\sum_{i=1}^{\infty} q^i = \frac{1}{1-q} - 1 = \frac{q}{1-q}.$$

In conclusione, senza la terza ipotesi del Teorema 1.2.1, al numero 1 corrisponderebbero due differenti rappresentazioni in base.

Considerato un numero reale $x \in \mathbb{R}$, $x \neq 0$, l'espressione

$$x = \pm \beta^p \times 0.d_1d_2\dots d_k\dots$$

prende il nome di **rappresentazione in base β di x** . Il numero p viene detto **esponente** (o **caratteristica**), i valori d_i sono le **cifre della rappresentazione**, mentre il numero decimale $0.d_1d_2\dots d_k\dots$ si dice **mantissa**. Il numero

x viene normalmente rappresentato con la cosiddetta **notazione posizionale** $x = \text{segno}(x)(.d_1d_2d_3\dots) \times \beta^p$, che viene detta **normalizzata**. In alcuni casi è ammessa una rappresentazione in notazione posizionale tale che $d_1 = 0$, che viene detta **denormalizzata**. Le basi più utilizzate sono $\beta = 10$ (**sistema decimale**), $\beta = 2$ (**sistema binario**, che, per la sua semplicità, è quello utilizzato dagli elaboratori elettronici), e $\beta = 16$ (**sistema esadecimale**) e comunque la base è sempre un numero pari. Nel sistema esadecimale le cifre appartengono all'insieme

$$\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, A, B, C, D, E, F\}.$$

Bisogna tenere presente che un qualunque numero reale $x \neq 0$ può essere rappresentato con **infinite cifre** nella mantissa e inoltre l'insieme dei numeri reali ha cardinalità infinita. Poichè un elaboratore è dotato di **memoria finita** non è possibile memorizzare:

- a) gli infiniti numeri reali
- b) le infinite (in generale) cifre di un numero reale.

1.3 L'insieme dei numeri macchina

Assegnati i numeri $\beta, t, m, M \in \mathbb{N}$ si definisce **insieme dei numeri di macchina con rappresentazione normalizzata in base β con t cifre significative**

$$\mathbb{F}(\beta, t, m, M) = \left\{ x \in \mathbb{R} : x = \pm \beta^p \sum_{i=1}^t d_i \beta^{-i} \right\} \cup \{0\}$$

dove

1. $t \geq 1, \beta \geq 2, m, M > 0$;
2. $d_i \in \{0, 1, \dots, \beta - 1\}$;
3. $d_1 \neq 0$;
4. $p \in \mathbb{Z}, -m \leq p \leq M$.

È stato necessario aggiungere il numero zero all'insieme in quanto non ammette rappresentazione in base normalizzata.

Osserviamo che un elaboratore la cui memoria abbia le seguenti caratteristiche (riportate anche in Figura 1.1):

- t campi di memoria per la mantissa, ciascuno dei quali può assumere β differenti configurazioni (e perciò può memorizzare una cifra d_i),

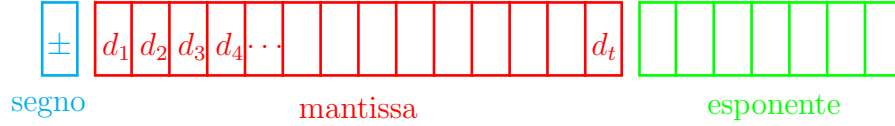


Figura 1.1: Locazione di memoria.

- un campo di memoria che può assumere $m + M + 1$ differenti configurazioni (e perciò può memorizzare i differenti valori p dell'esponente),
- un campo che può assumere due differenti configurazioni (e perciò può memorizzare il segno $+$ o $-$),

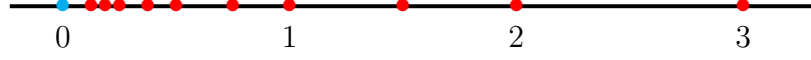
è in grado di rappresentare tutti gli elementi dell'insieme $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$. In realtà poichè se $\beta = 2$ risulta sicuramente $d_1 = 1$, allora in alcuni standard non viene memorizzata la prima cifra della mantissa. Il più piccolo numero positivo appartenente all'insieme $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ si ottiene prendendo la più piccola mantissa (ovvero 0.1) ed il più piccolo esponente

$$x = 0.1 \times \beta^{-m}$$

mentre il più grande ha tutte le cifre della mantissa uguali alla cifra più grande (ovvero $\beta - 1$) ed il massimo esponente

$$x = 0.\underbrace{dd \dots dd}_t \beta^M, \quad d = \beta - 1.$$

Un'ultima osservazione riguarda il fatto che non è necessario rappresentare il segno dell'esponente poichè questo viene memorizzato utilizzando un'opportuna traslazione, detta **offset**, che lo rende sempre positivo. Consideriamo ora come esempio l'insieme $\mathbb{F}(2, 2, 2, 2)$, cioè i numeri binari con mantissa di due cifre ed esponente compreso tra -2 e 2. Enumeriamo gli elementi di questo insieme. Poichè il numero zero non appartiene all'insieme dei numeri macchina viene rappresentato solitamente con mantissa nulla ed esponente

Figura 1.2: Elementi dell'insieme $\mathbb{F}(2, 2, 2, 2)$.

$-m$.

$$\begin{aligned} p = -2 \quad x &= 0.10 \times 2^{-2} = 2^{-1} \times 2^{-2} = 2^{-3} = 0.125; \\ x &= 0.11 \times 2^{-2} = (2^{-1} + 2^{-2}) \times 2^{-2} = 3/16 = 0.1875; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p = -1 \quad x &= 0.10 \times 2^{-1} = 2^{-1} \times 2^{-1} = 2^{-2} = 0.25; \\ x &= 0.11 \times 2^{-1} = (2^{-1} + 2^{-2}) \times 2^{-1} = 3/8 = 0.375; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p = 0 \quad x &= 0.10 \times 2^0 = 2^{-1} \times 2^0 = 2^{-1} = 0.5; \\ x &= 0.11 \times 2^0 = (2^{-1} + 2^{-2}) \times 2^0 = 3/4 = 0.75; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p = 1 \quad x &= 0.10 \times 2^1 = 2^{-1} \times 2^1 = 1; \\ x &= 0.11 \times 2^1 = (2^{-1} + 2^{-2}) \times 2^1 = 3/2 = 1.5; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p = 2 \quad x &= 0.10 \times 2^2 = 2^{-1} \times 2^2 = 2; \\ x &= 0.11 \times 2^2 = (2^{-1} + 2^{-2}) \times 2^2 = 3. \end{aligned}$$

Nella Figura 1.2 è rappresentato l'insieme dei numeri macchina positivi appartenenti a $\mathbb{F}(2, 2, 2, 2)$ (i numeri negativi sono esattamente simmetrici rispetto allo zero). Dalla rappresentazione dell'insieme dei numeri macchina si evincono le seguenti considerazioni:

1. L'insieme è discreto;
2. I numeri rappresentabili sono solo una piccola parte dell'insieme $\mathbb{R}$;
3. La distanza tra due numeri macchina consecutivi è β^{p-t} , infatti, considerando per semplicità numeri positivi, sia

$$x = +\beta^p \times (0.d_1d_2 \dots d_{t-1}d_t)$$

il successivo numero macchina è

$$y = +\beta^p \times (0.d_1d_2 \dots d_{t-1}\tilde{d}_t)$$

dove

$$\tilde{d}_t = d_t + 1.$$

La differenza è pertanto

$$y - x = +\beta^p(0.\underbrace{00 \dots 00}_{t-1}1) = \beta^{p-t}.$$

Nello standard IEEE (Institute of Electric and Electronic Engineers) singola precisione una voce di memoria ha 32 bit, dei quali 1 riservato al segno, 8 all'esponente e 23 alla mantissa. Allora $\beta = 2$, $t = 23$, $m = 127$ e $M = 128$. In questo caso il valore dell'offset è 127 quindi per esempio l'esponente -30 viene rappresentato come il numero 97 ($= -30 + 127$). Nella realtà spesso non tutte le rappresentazioni dell'esponente sono ammesse (per esempio gli esponenti 0 e 255 sono riservati ad alcune situazioni particolari, ma su questo non è opportuno soffermarsi ulteriormente).

Per la doppia precisione si utilizzano 64 bit, di cui 1 per il segno, 11 per l'esponente e 52 per la mantissa. Dunque $\beta = 2$, $t = 52$, $m = 1023$ e $M = 1024$. Dopo aver compreso la struttura dell'insieme $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ resta da capire come, assegnato un numero reale x sia possibile rappresentarlo nell'insieme dei numeri macchina, ovvero quale elemento $\tilde{x} \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ possa essergli associato in modo da commettere il più piccolo errore di rappresentazione possibile. Supponiamo ora che la base β sia un numero pari. Possono presentarsi diversi casi:

- Sia

$$x = \pm \beta^p \sum_{i=1}^n d_i \beta^{-i}$$

con $d_1 \neq 0$, $n \leq t$, e $-m \leq p \leq M$. Allora è evidente che $x \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ e pertanto verrà rappresentato esattamente su un qualunque elaboratore che utilizzi $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ come insieme dei numeri di macchina.

- Sia

$$x = \pm \beta^p \sum_{i=1}^n d_i \beta^{-i}$$

con $n \leq t$ ma supponiamo che $p \notin [-m, M]$. Se $p < -m$ allora x è più piccolo del più piccolo numero di macchina: in questo caso si dice che si è verificato un **underflow** (l'elaboratore interrompe la sequenza di calcoli e segnala con un messaggio l'underflow). Se $p > M$ allora vuol dire che x è più grande del più grande numero di macchina e in questo caso si dice che si è verificato un **overflow** (anche in questo caso l'elaboratore si ferma e segnala l'overflow, anche se tale eccezione può anche essere gestita via software in modo tale che l'elaborazione continui).

- Sia

$$x = \pm \beta^p \sum_{i=1}^n d_i \beta^{-i}$$

con l'esponente $-m \leq p \leq M$ ma $n > t$ ed inoltre esiste un indice k , $t < k \leq n$, tale che $d_k \neq 0$. In questo caso, poichè la mantissa di x ha più di t cifre decimali, $x \notin \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$. È però possibile rappresentare x mediante un numero in $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ con un'opportuna operazione di taglio delle cifre decimali che seguono la t -esima. Per questo si possono utilizzare due diverse tecniche di approssimazione:

1. **troncamento di x alla t -esima cifra significativa**

$$\tilde{x} = \text{tr}(x) = \beta^p \times 0.d_1 d_2 \dots d_t$$

2. **arrotondamento di x alla t -esima cifra significativa**

$$\tilde{x} = \text{arr}(x) = \beta^p \times 0.d_1 d_2 \dots \tilde{d}_t$$

dove

$$\tilde{d}_t = \begin{cases} d_t + 1 & \text{se } d_{t+1} \geq \beta/2 \\ d_t & \text{se } d_{t+1} < \beta/2. \end{cases}$$

In sostanza il troncamento si ottiene tagliando tutte le cifre della mantissa del numero x a partire da quella di posto $t + 1$.

Per l'arrotondamento invece si controlla la cifra di posto $t + 1$ se risulta essere sufficientemente grande (ovvero maggiore o uguale a $\beta/2$) allora vengono tagliate tutte le cifre dalla $(t + 1)$ -esima in poi ma quella di posto t viene incrementata di un'unità (con eventuale riporto de uguale a $\beta - 1$). Se invece la cifra di posto $t + 1$ è piccola (ovvero inferiore a $\beta/2$) allora si procede come



Figura 1.3: Stima dell'errore di rappresentazione nel caso di troncamento.

per il troncamento tagliando tutte le cifre da quella di posto $t + 1$ in poi. Per esempio se $\beta = 10$, $t = 5$ e $x = 0.654669235$ allora

$$tr(x) = 0.65466, \quad arr(x) = 0.65467$$

In pratica quando il numero reale x non appartiene all'insieme $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ esistono sicuramente due numeri $a, b \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$, tali che

$$a < x < b. \quad (1.1)$$

come riportato nella Figura 1.3. Supponendo per semplicità $x > 0$ si ha che

$$tr(x) = a$$

mentre se $x \geq (a + b)/2$ allora

$$arr(x) = b$$

altrimenti

$$arr(x) = a.$$

L'arrotondamento è un'operazione che fornisce sicuramente un risultato più preciso (come risulterà evidente nel prossimo paragrafo), ma può dar luogo ad overflow. Infatti se

$$x = 0.\underbrace{dddd\dots d}_{t+1} \times \beta^M$$

con $d = \beta - 1$, allora

$$arr(x) = 1.0\beta^M = 0.1\beta^{M+1} \notin \mathbb{F}(\beta, t, m, M).$$

La rappresentazione di $x \in \mathbb{R}$ attraverso $\tilde{x} \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ si dice **rappresen-
tazione in virgola mobile di x** o **rappresentazione floating point**, con tronca-
mento se $\tilde{x} = tr(x)$, con arrotondamento se $\tilde{x} = arr(x)$. Talvolta il numero
macchina che rappresenta $x \in \mathbb{R}$ viene indicato con $fl(x)$.

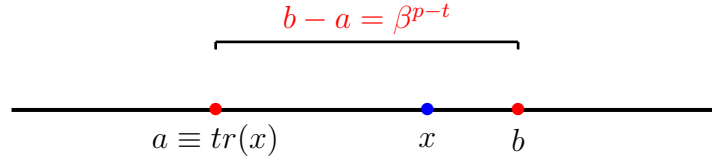


Figura 1.4: Stima dell'errore di rappresentazione nel caso di troncamento.

1.4 Errore Assoluto ed Errore Relativo

Una volta definite le modalità per associare ad un numero reale x la sua rappresentazione macchina $\tilde{x}$ si tratta di stabilire l'errore che si commette in questa operazione di approssimazione. Si possono definire due tipi di errori, l'errore assoluto e l'errore relativo.

Se $x \in \mathbb{R}$ ed $\tilde{x}$ è una sua approssimazione allora si definisce **errore assoluto** la quantità

$$E_a = |\tilde{x} - x|$$

mentre se $x \neq 0$ si definisce **errore relativo** la quantità

$$E_r = \frac{|\tilde{x} - x|}{|x|}.$$

Se $E_r \leq \beta^{-q}$ allora si dice che $\tilde{x}$ ha almeno q cifre significative corrette. Nel seguito assumeremo $x > 0$ e supporremo anche che la rappresentazione di x in $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ non dia luogo ad underflow o overflow. Calcoliamo ora una maggiorazione per tali errori nel caso in cui $\tilde{x}$ sia il troncamento di $x > 0$. Nella Figura 1.4 a e b rappresentano i due numeri macchina tali che sia vera la relazione (1.1). È evidente che risulta

$$|tr(x) - x| < b - a = \beta^{p-t}.$$

Per maggiore l'errore relativo osserviamo che

$$|x| = +\beta^p \times 0.d_1d_2d_3 \cdots \geq \beta^p \times 0.1 = \beta^{p-1}.$$

da cui

$$\frac{1}{|x|} \leq \beta^{1-p}$$

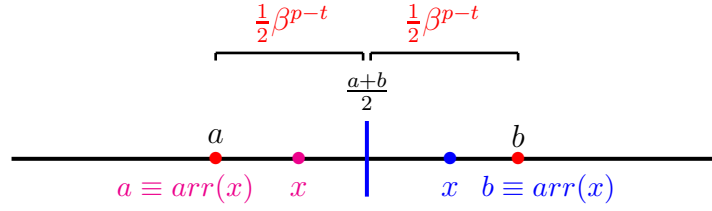


Figura 1.5: Stima dell'errore di rappresentazione nel caso di arrotondamento.

e quindi

$$\frac{|tr(x) - x|}{|x|} \leq \beta^{p-t} \times \beta^{1-p} = \beta^{1-t}. \quad (1.2)$$

Passiamo ora alla valutazione degli errori quando

$$\tilde{x} = arr(x).$$

Nella Figura 1.5 a e b rappresentano i due numeri macchina tali che sia vera la relazione (1.1). Se $x > 0$ si trova a sinistra del punto medio $(a + b)/2$ allora l'arrotondamento coincide con il valore a , se si trova nel punto medio oppure alla sua destra allora coincide con b . È evidente che il massimo errore si ottiene quando x coincide con il punto medio tra a e b risulta

$$|arr(x) - x| \leq \frac{1}{2}(b - a) = \frac{1}{2}\beta^{p-t}.$$

Per aumentare l'errore relativo procediamo come nel caso del troncamento di x :

$$\frac{|arr(x) - x|}{|x|} \leq \frac{1}{2}\beta^{p-t} \times \beta^{1-p} = \frac{1}{2}\beta^{1-t}. \quad (1.3)$$

Le quantità che compaiono a destra delle maggiorazioni (1.2) e (1.3), ovvero

$$u = \beta^{1-t}$$

oppure

$$u = \frac{1}{2}\beta^{1-t}$$

sono dette **precisione di macchina** o **zero macchina** per il troncamento (o per l'arrotondamento, in base alla tecnica in uso).

Posto

$$\varepsilon_x = \frac{\tilde{x} - x}{x}, \quad |\varepsilon_x| \leq u$$

risulta

$$\tilde{x} = x(1 + \varepsilon_x) \quad (1.4)$$

che fornisce la relazione tra un numero $x \in \mathbb{R}$ e la sua rappresentazione macchina.

1.4.1 Operazioni Macchina

Se $x, y \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ non è detto che il risultato di un'operazione aritmetica tra x e y sia un numero macchina. Per esempio se $x, y \in \mathbb{F}(2, 2, m, M)$ e $x = 0.11 \cdot 2^0$ e $y = 0.11 \cdot 2^{-2}$, allora

$$x + y = 0.1111 \notin \mathbb{F}(2, 2, m, M).$$

Si pone il problema di definire le operazioni aritmetiche in modo tale che ciò non accada. Se $\cdot$ è una delle quattro operazioni aritmetiche di base allora il risultato è un numero macchina se

$$x \cdot y = fl(x \cdot y). \quad (1.5)$$

L'operazione definita dalla relazione (1.5) è detta **operazione macchina**. L'operazione macchina associata a $\cdot$ viene indicata con $\odot$ e deve soddisfare anch'essa la relazione (1.4), ovvero dev'essere:

$$x \odot y = (x \cdot y)(1 + \varepsilon), \quad |\varepsilon| < u \quad (1.6)$$

per ogni $x, y \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ tali che $x \odot y$ non dia luogo ad overflow o underflow. Si può dimostrare che

$$x \odot y = tr(x \cdot y)$$

e

$$x \odot y = arr(x \cdot y)$$

soddisfano la (1.6) e dunque danno luogo ad operazioni di macchina. Le quattro operazioni così definite danno luogo alla **aritmetica di macchina** o **aritmetica finita**. La **somma algebrica macchina** (addizione e sottrazione) tra due numeri $x, y \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ richiede le seguenti fasi:

1. Si scala la mantissa del numero con l'esponente minore in modo tale che i due addendi abbiano lo stesso esponente (ovvero quello dell'esponente maggiore);
2. Si esegue la somma tra le mantisse;
3. Si normalizza il risultato aggiustando l'esponente in modo tale che la mantissa sia un numero minore di 1.
4. Si arrotonda (o si tronca) la mantissa alle prime t cifre;

Consideriamo per esempio i numeri $x, y \in \mathbb{F}(10, 5, m, M)$

$$x = 0.78546 \times 10^2, \quad y = 0.61332 \times 10^{-1}$$

e calcoliamo il numero macchina $x \oplus y$.

1. Scaliamo il numero y fino ad ottenere esponente 2 (quindi si deve spostare il punto decimale di 3 posizioni), $y = 0.00061332 \times 10^2$;
2. Sommiamo le mantisse $0.78546 + 0.00061332 = 0.78607332$;
3. Questa fase non è necessaria perchè la mantissa è già minore di 1;
4. Si arrotonda alla quinta cifra decimale ottenendo

$$x \oplus y = 0.78607 \times 10^2.$$

Un fenomeno particolare, detto **cancellazione di cifre significative**, si verifica quando si effettua la sottrazione tra due numeri reali all'incirca uguali. Consideriamo per esempio la differenza tra i due numeri

$$x = 0.75868531 \times 10^2, \quad y = 0.75868100 \times 10^2$$

nell'insieme $\mathbb{F}(10, 5, m, M)$. Risulta

$$fl(x) = 0.75869 \times 10^2, \quad fl(y) = 0.75868 \times 10^2$$

e quindi

$$fl(fl(x) - fl(y)) = 0.1 \times 10^{-2}$$

mentre

$$x - y = 0.431 \times 10^{-3}$$

Calcolando l'errore relativo sul risultato dell'operazione si trova

$$E_r = \frac{fl(fl(x) - fl(y)) - (x - y)}{x - y} \simeq 1.32019$$

che è un valore piuttosto alto.

Per esemplificare il fenomeno appena descritto consideriamo il problema di calcolare (per esempio in MatLab) le radici dell'equazione di secondo grado

$$p(x) = ax^2 + bx + c$$

applicando la consueta formula

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (1.7)$$

In alternativa si potrebbe calcolare la radice più grande in modulo

$$r_1 = \frac{-b - \text{segno}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (1.8)$$

e poi, sfruttando la proprietà che il prodotto tra le radici è pari a c/a , ottenere la seconda radice ponendo

$$r_2 = \frac{c}{ar_1}. \quad (1.9)$$

Considerando il polinomio

$$p(x) = x^2 - (10^7 + 10^{-7})x + 1$$

che ammette come radici 10^7 e 10^{-7} , applicando le formule (1.7), si ottiene

$$x_1 = 10^7, \quad x_2 = 9.9652e - 008$$

mentre utilizzando le formule (1.8) e (1.9) i risultati sono esatti

$$r_1 = 10^7, \quad r_2 = 10^{-7}.$$

Nel primo caso il calcolo della radice x_1 avviene effettuando la differenza tra due numeri (ovvero $-b$ e $\sqrt{b^2 - 4ac}$) che sono molto vicini tra loro e pertanto generano il suddetto fenomeno. Nel secondo caso non viene effettuata alcuna differenza e pertanto il risultato è corretto.

Il **prodotto macchina** tra due numeri $x, y \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ richiede le seguenti fasi:

1. Si esegue il prodotto tra le mantisse;
2. Si esegue l'arrotondamento (o il troncamento) alle prime t cifre normalizzando, se necessario, la mantissa;

3. Si sommano gli esponenti.

Consideriamo per esempio il prodotto tra i due numeri

$$x = 0.11111 \times 10^3, \quad y = 0.52521 \times 10^2$$

nell'insieme $\mathbb{F}(10, 5, m, M)$.

1. Il prodotto delle mantisse produce 0.05835608;
2. L'arrotondamento a 5 cifre produce 0.58356×10^{-1} ;
3. La somma degli esponenti fornisce come risultato

$$x * y = 0.58356 \times 10^{3+2-1} = 0.58356 \times 10^4.$$

La **divisione macchina** tra due numeri $x, y \in \mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ richiede le seguenti fasi:

1. Si scala il dividendo x finchè la sua mantissa risulti minore di quella del divisore y ;
2. Si esegue la divisione tra le mantisse;
3. Si esegue l'arrotondamento (o il troncamento) alle prime t cifre;
4. Si sottraggono gli esponenti.

Consideriamo la divisione tra i due numeri

$$x = 0.12100 \times 10^5, \quad y = 0.11000 \times 10^2$$

nell'insieme $\mathbb{F}(10, 5, m, M)$.

1. Scaliamo il dividendo di una cifra decimale 0.012100; l'esponente diventa 6;
2. Dividiamo le mantisse $0.012100/0.11000 = 0.11000$;
3. Il troncamento fornisce lo stesso numero 0.11000;
4. Si sottraggono gli esponenti ottenendo il risultato

$$x \oslash y = 0.11000 \times 10^4.$$

Si può dimostrare che valgono le seguenti proprietà:

1. L'insieme $\mathbb{F}(\beta, t, m, M)$ non è chiuso rispetto alle operazioni macchina;

2. L'elemento neutro per la somma non è unico: infatti consideriamo i due numeri macchina

$$x = 0.15678 \times 10^3, \quad y = 0.25441 \times 10^{-2},$$

appartenenti all'insieme $\mathbb{F}(10, 5, m, M)$, innanzitutto si scala y

$$y = 0.0000025441 \times 10^3,$$

sommando le mantisse si ottiene 0.1567825441 mentre l'arrotondamento fornisce il risultato finale

$$x \oplus y = 0.15678 \times 10^3 = x.$$

3. L'elemento neutro per il prodotto non è unico;
4. Non vale la proprietà associativa di somma e prodotto;
5. Non vale la proprietà distributiva della somma rispetto al prodotto.

Capitolo 2

Equazioni non Lineari

2.1 Introduzione

Le radici di un'equazione non lineare $f(x) = 0$ non possono, in generale, essere espresse esplicitamente e anche se ciò è possibile spesso l'espressione si presenta in forma talmente complicata da essere praticamente inutilizzabile. Di conseguenza per poter risolvere equazioni di questo tipo siamo obbligati ad utilizzare metodi numerici che sono, in generale, di tipo iterativo, cioè partendo da una (o in alcuni casi più) approssimazioni della radice, producono una successione $x_0, x_1, x_2, \dots$, convergente alla radice. Per alcuni di questi metodi per ottenere la convergenza è sufficiente la conoscenza di un intervallo $[a, b]$ che contiene la soluzione, altri metodi richiedono invece la conoscenza di una buona approssimazione iniziale. Talvolta è opportuno utilizzare in maniera combinata due metodi, uno del primo tipo e uno del secondo.

2.2 Localizzazione delle radici

Nei successivi paragrafi saranno descritti alcuni metodi numerici per il calcolo approssimato delle radici di un'equazione non lineare. Tali metodi numerici sono di tipo iterativo, ovvero consistono nel definire una successione (o più successioni), che, a partire da un'assegnata approssimazione iniziale (nota), converga alla radice α in un processo al limite. Infatti poichè non esistono tecniche generali che consentano di trovare l'espressione esplicita di α in un numero finito di operazioni, allora questa può essere calcolata in modo

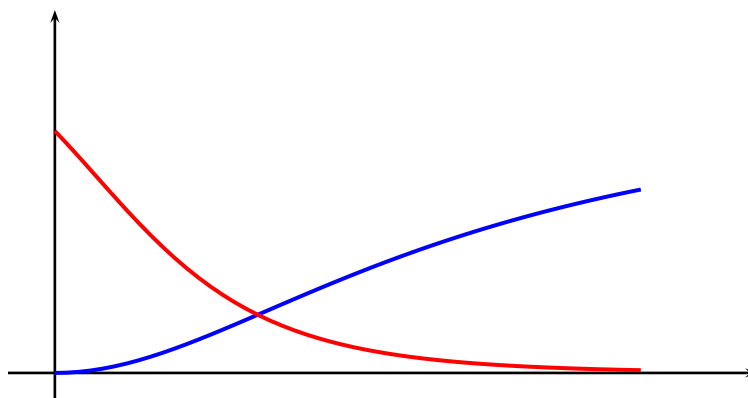
approssimato solo in modo iterativo. Questa peculiarità tuttavia richiede che sia nota appunto un'approssimazione iniziale o, almeno, un intervallo di appartenenza. Il problema preliminare è quello di localizzare la radice di una funzione, problema che viene affrontato in modo grafico. Per esempio considerando la funzione

$$f(x) = \sin(\log(x^2 + 1)) - \frac{e^{-x}}{x^2 + 1}$$

risulta immediato verificare che il valore dell'ascissa in cui si annulla è quello in cui si intersecano i grafici delle funzioni

$$g(x) = \sin(\log(x^2 + 1)) \qquad h(x) = \frac{e^{-x}}{x^2 + 1}.$$

Un modo semplice per stimare tale valore è quello di tracciare i grafici delle due funzioni, come riportato nella seguente figura in cui il grafico di $h(x)$ è in rosso, mentre quello di $g(x)$ è blu, e l'intervallo di variabilità di x è $[0, 2.5]$.



Calcolando le funzioni in valori compresi in tale intervallo di variabilità si può restringere lo stesso intervallo, infatti risulta

$$g(0.5) = 0.2213 < h(0.5) = 0.48522$$

e

$$g(1) = 0.63896 > h(1) = 0.18394,$$

da cui si deduce che $\alpha \in]0.5, 1[$.

2.3 Il Metodo di Bisezione

Sia $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in \mathcal{C}([a, b])$, e sia $f(a)f(b) < 0$. Sotto tali ipotesi esiste sicuramente almeno un punto nell'intervallo $[a, b]$ in cui la funzione si annulla. L'idea alla base del **Metodo di Bisezione** (o metodo delle bisezioni) consiste nel costruire una successione di intervalli $\{I_k\}_{k=0}^{\infty}$, con $I_0 = [a_0, b_0] \equiv [a, b]$, tali che:

1. $I_{k+1} \subset I_k$;
2. $\alpha \in I_k, \forall k \geq 0$;
3. l'ampiezza di I_k tende a zero per $k \rightarrow +\infty$.

La successione degli I_k viene costruita nel seguente modo. Innanzitutto si pone

$$I_0 = [a_0, b_0] = [a, b]$$

e si calcola il punto medio

$$c_1 = \frac{a_0 + b_0}{2}.$$

Se $f(c_1) = 0$ allora $\alpha = c_1$, altrimenti si pone:

$$I_1 = [a_1, b_1] \equiv \begin{cases} a_1 = a_0 & b_1 = c_1 & \text{se } f(a_0)f(c_1) < 0 \\ a_1 = c_1 & b_1 = b_0 & \text{se } f(a_0)f(c_1) > 0. \end{cases}$$

Ora, a partire da $I_1 = [a_1, b_1]$, si ripete la stessa procedura. In generale al passo k si calcola

$$c_{k+1} = \frac{a_k + b_k}{2}.$$

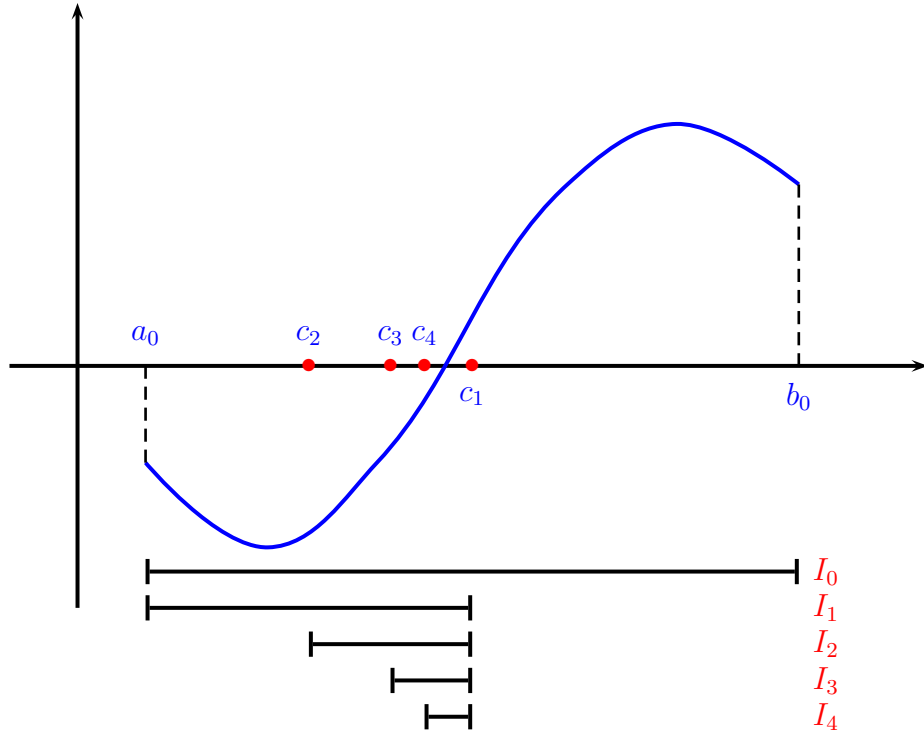
Se $f(c_{k+1}) = 0$ allora $\alpha = c_{k+1}$, altrimenti si pone:

$$I_{k+1} = [a_{k+1}, b_{k+1}] \equiv \begin{cases} a_{k+1} = a_k & b_{k+1} = c_{k+1} & \text{se } f(a_k)f(c_{k+1}) < 0 \\ a_{k+1} = c_{k+1} & b_{k+1} = b_k & \text{se } f(a_k)f(c_{k+1}) > 0. \end{cases}$$

La successione di intervalli I_k così costruita soddisfa automaticamente le condizioni 1) e 2). Per quanto riguarda la 3) abbiamo:

$$b_k - a_k = \frac{b_{k-1} - a_{k-1}}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^k}$$

e dunque l'ampiezza di I_k tende a zero quando $k \rightarrow +\infty$.



Generalmente costruendo le successioni $\{a_k\}$ e $\{b_k\}$ accade che la condizione $f(c_k) = 0$, per un certo valore k , non si verifica mai a causa degli errori di arrotondamento. Quindi è necessario stabilire un opportuno criterio di stop che ci permetta di fermare la procedura quando riteniamo di aver raggiunto una precisione soddisfacente. Per esempio si può imporre:

$$b_k - a_k \leq \varepsilon \quad (2.1)$$

dove ε è una prefissata tolleranza. La (2.1) determina anche un limite per il numero di iterate infatti:

$$\frac{b_0 - a_0}{2^k} \leq \varepsilon \quad \Rightarrow \quad k > \log_2 \left(\frac{b_0 - a_0}{\varepsilon} \right).$$

Poichè $b_k - \alpha \leq b_k - a_k$, il criterio (2.1) garantisce che α è approssimata da c_{k+1} con un errore assoluto minore di ε . Se $0 \notin [a, b]$ si può usare come criterio di stop

$$\frac{b_k - a_k}{\min(|a_k|, |b_k|)} \leq \varepsilon \quad (2.2)$$

che garantisce che α è approssimata da c_{k+1} con un errore relativo minore di ε . Un ulteriore criterio di stop è fornito dal test:

$$|f(c_k)| \leq \varepsilon. \quad (2.3)$$

È comunque buona norma utilizzare due criteri di stop insieme, per esempio (2.1) e (2.3) oppure (2.2) e (2.3).

2.3.1 Il metodo della falsa posizione

Una variante del metodo delle bisezioni è appunto il metodo della falsa posizione. Partendo sempre da una funzione $f(x)$ continua in un intervallo $[a, b]$ tale che $f(a)f(b) < 0$, in questo caso si approssima la radice considerando l'intersezione della retta passante per i punti $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ con l'asse x . L'equazione della retta è

$$y = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

pertanto il punto c_1 , sua intersezione con l'asse x , è:

$$c_1 = a - f(a) \frac{b - a}{f(b) - f(a)}.$$

Si testa a questo punto l'appartenenza della radice α ad uno dei due intervalli $[a, c_1]$ e $[c_1, b]$ e si procede esattamente come nel caso del metodo delle bisezioni, ponendo

$$[a_1, b_1] \equiv \begin{cases} a_1 = a, & b_1 = c_1 & \text{se } f(a)f(c_1) < 0 \\ a_1 = c_1, & b_1 = b & \text{se } f(a)f(c_1) > 0. \end{cases}$$

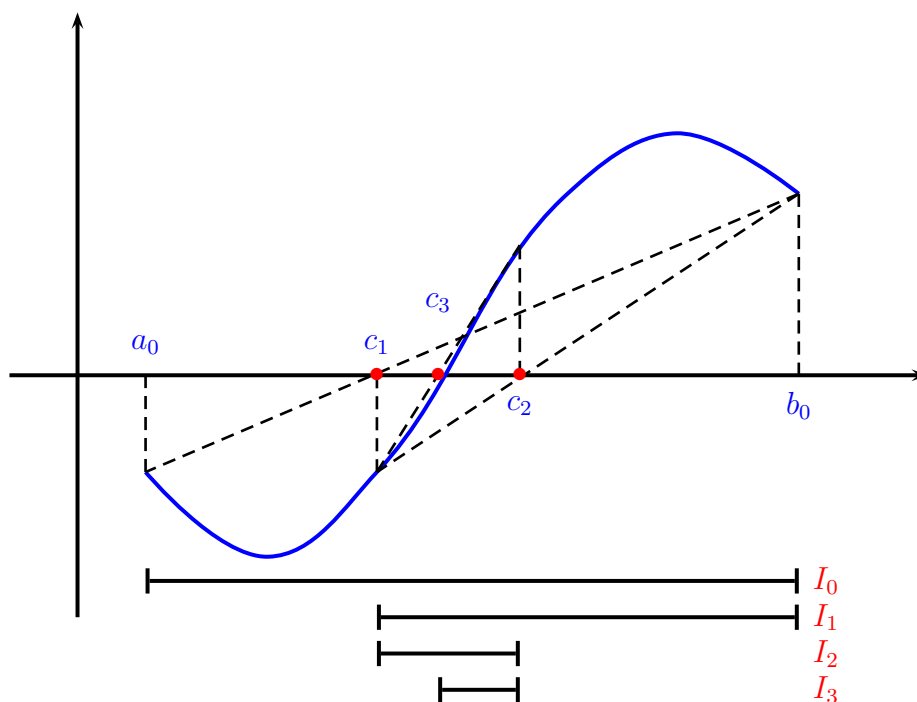
Ad un generico passo k si calcola

$$c_{k+1} = a_k - f(a_k) \frac{b_k - a_k}{f(b_k) - f(a_k)}$$

e si pone

$$[a_{k+1}, b_{k+1}] \equiv \begin{cases} a_{k+1} = a_k & b_{k+1} = c_{k+1} & \text{se } f(a_k)f(c_{k+1}) < 0 \\ a_{k+1} = c_{k+1} & b_{k+1} = b_k & \text{se } f(a_k)f(c_{k+1}) > 0. \end{cases}$$

Anche per questo metodo è possibile dimostrare la convergenza nella sola ipotesi di continuità della funzione $f(x)$. Nella seguente figura è rappresentato graficamente il metodo della falsa posizione.



2.4 Metodi di Iterazione Funzionale

Il metodo di bisezione può essere applicato ad una vastissima classe di funzioni, in quanto per poter essere applicato si richiede solo la continuità della funzione. Tuttavia ha lo svantaggio di risultare piuttosto lento, infatti ad ogni passo si guadagna in precisione una cifra binaria. Per ridurre l'errore di un decimo sono mediamente necessarie 3.3 iterazioni. Inoltre la velocità di convergenza non dipende dalla funzione $f(x)$ poichè il metodo utilizza esclusivamente il segno assunto dalla funzione in determinati punti e non il suo valore. Il metodo delle bisezioni può essere comunque utilizzato con profitto per determinare delle buone approssimazioni della radice α che possono essere utilizzate dai metodi iterativi che stiamo per descrivere.

Infatti richiedendo alla f supplementari condizioni di regolarità è possibile

individuare una vasta classe di metodi che forniscono le stesse approssimazioni del metodo di bisezione utilizzando però un numero di iterate molto minore. In generale questi metodi sono del tipo:

$$x_{k+1} = g(x_k) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.4)$$

dove x_0 è un assegnato valore iniziale e forniscono un'approssimazione delle soluzioni dell'equazione

$$x = g(x). \quad (2.5)$$

Ogni punto α tale che $\alpha = g(\alpha)$ si dice **punto fisso** o **punto unito** di g . La funzione $g(x)$ viene detta **funzione iteratrice**.

Per poter applicare uno schema del tipo (2.4) all'equazione $f(x) = 0$, bisogna prima trasformare questa nella forma (2.5). Ad esempio se $[a, b]$ è l'intervallo di definizione di f ed $h(x)$ è una qualunque funzione tale che $h(x) \neq 0$, per ogni $x \in [a, b]$, si può porre:

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{h(x)}. \quad (2.6)$$

Ovviamente ogni punto fisso di g è uno zero di f e viceversa.

Nel seguente teorema dimostriamo che se la successione definita dalla relazione (2.4) risulta convergente il suo limite coincide con il punto fisso della funzione $g(x)$ (che coincide con la radice α della funzione $f(x)$).

Teorema 2.4.1 *Sia $g \in \mathcal{C}([a, b])$ e assumiamo che la successione $\{x_k\}$ generata da (2.4) sia contenuta in $[a, b]$. Allora se tale successione converge, il limite è il punto fisso di g .*

Dimostrazione.

$$\alpha = \lim_{k \rightarrow +\infty} x_{k+1} = \lim_{k \rightarrow +\infty} g(x_k) = g\left(\lim_{k \rightarrow +\infty} x_k\right) = g(\alpha). \quad \square$$

Il seguente teorema fornisce una condizione sufficiente per la convergenza della successione definita dalla relazione (2.4). Questo risultato, unitamente al Teorema 2.4.1, garantisce, sotto le ipotesi del Teorema 2.4.2, la convergenza della successione x_k alla radice della funzione $f(x)$.

Teorema 2.4.2 *Sia α punto fisso di g e $g \in \mathcal{C}^1([\alpha - \rho, \alpha + \rho])$, per qualche $\rho > 0$; se si suppone che*

$$|g'(x)| < 1, \quad \text{per ogni } x \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$$

allora valgono le seguenti asserzioni:

1. se $x_0 \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$ allora anche $x_k \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$ per ogni k ;
2. la successione $\{x_k\}$ converge ad α ;
3. α è l'unico punto fisso di $g(x)$ nell'intervallo $[\alpha - \rho, \alpha + \rho]$.

Dimostrazione. Sia

$$\lambda = \max_{|x-\alpha| \leq \rho} |g'(x)| < 1.$$

Innanzitutto dimostriamo per induzione che tutti gli elementi della successione $\{x_k\}$ sono contenuti nell'intervallo di centro α e ampiezza 2ρ . Per $k = 0$ si ha banalmente $x_0 \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$. Assumiamo che $|x_k - \alpha| \leq \rho$ e dimostriamolo per $k + 1$.

$$|x_{k+1} - \alpha| = |g(x_k) - g(\alpha)| = |g'(\xi_k)| |x_k - \alpha|$$

dove $|\xi_k - \alpha| < |x_k - \alpha| \leq \rho$ e l'ultima uguaglianza segue dall'applicazione del teorema di Lagrange. Pertanto

$$|x_{k+1} - \alpha| \leq \lambda |x_k - \alpha| < |x_k - \alpha| \leq \rho.$$

Proviamo ora che:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} x_k = \alpha.$$

Da $|x_{k+1} - \alpha| \leq \lambda |x_k - \alpha|$ segue

$$|x_{k+1} - \alpha| \leq \lambda^{k+1} |x_0 - \alpha|.$$

Conseguentemente qualunque sia x_0 si ha:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} |x_k - \alpha| = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{k \rightarrow +\infty} x_k = \alpha.$$

Per dimostrare l'unicità del punto ragioniamo per assurdo che supponiamo che i punti fissi sono due, $\alpha, \beta \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$. Allora

$$|\alpha - \beta| = |g(\alpha) - g(\beta)| = |g'(\xi)| |\alpha - \beta|$$

con $\xi \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$. Poichè $|g'(\xi)| < 1$ si ha

$$|\alpha - \beta| < |\alpha - \beta|$$

e ciò è assurdo. $\square$

Nelle figure 2.1 e 2.2 è rappresentata l'interpretazione geometrica di un metodo di iterazione funzionale in ipotesi di convergenza.

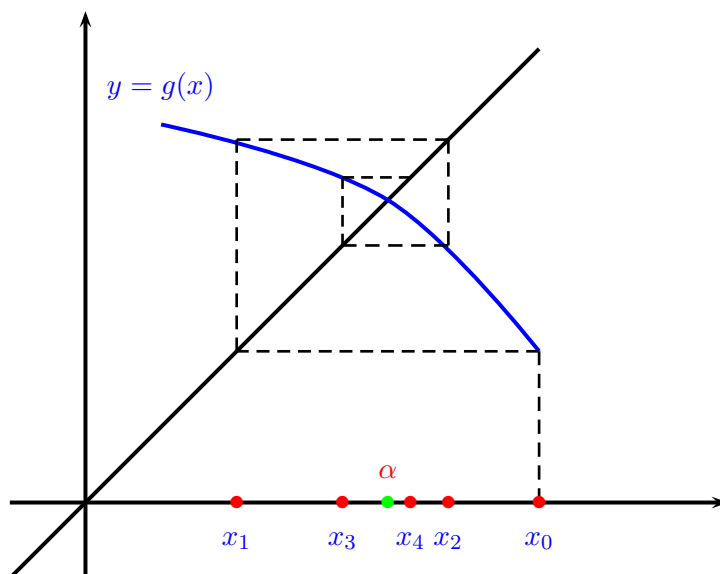


Figura 2.1: Interpretazione geometrica del processo $x_{k+1} = g(x_k)$, se $-1 < g'(\alpha) \leq 0$.

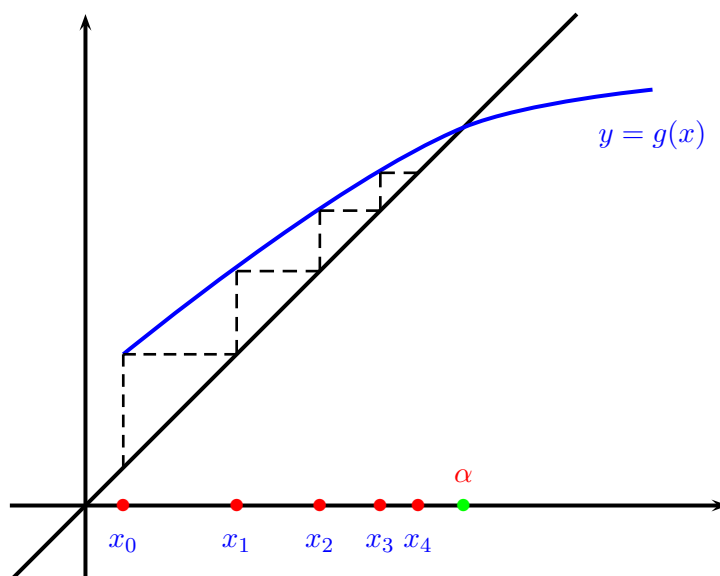


Figura 2.2: Interpretazione geometrica del processo $x_{k+1} = g(x_k)$, se $0 \leq g'(\alpha) < 1$.

Definizione 2.4.1 Un metodo iterativo del tipo (2.4) si dice *localmente convergente* ad una soluzione α del problema $f(x) = 0$ se esiste un intervallo $[a, b]$ contenente α tale che, per ogni $x_0 \in [a, b]$, la successione generata da (2.4) converge a α .

Come abbiamo già visto nel caso del metodo delle bisezioni anche per metodi di iterazione funzionale è necessario definire dei criteri di arresto per il calcolo delle iterazioni. Teoricamente, una volta stabilita la precisione voluta, ε , si dovrebbe arrestare il processo iterativo quando l'errore al passo k

$$e_k = |\alpha - x_k|$$

risulta minore della tolleranza prefissata ε . In pratica l'errore non può essere noto quindi è necessario utilizzare qualche stima. Per esempio si potrebbe considerare la differenza tra due iterate consecutive e fermare il calcolo degli elementi della successione quando

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \varepsilon,$$

oppure

$$\frac{|x_{k+1} - x_k|}{\min(|x_{k+1}|, |x_k|)} \leq \varepsilon \quad |x_{k+1}|, |x_k| \neq 0$$

se i valori hanno un ordine di grandezza particolarmente elevato. Una stima alternativa valuta il residuo della funzione rispetto al valore in α , cioè

$$|f(x_k)| \leq \varepsilon.$$

2.4.1 Ordine di Convergenza

Per confrontare differenti metodi iterativi che approssimano la stessa radice α di $f(x) = 0$, si può considerare la velocità con cui tali successioni convergono verso α . Lo studio della velocità di convergenza passa attraverso il concetto di ordine del metodo.

Definizione 2.4.2 Sia $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ una successione convergente ad α e tale che $x_k \neq \alpha$, per ogni k . Se esiste un numero reale $p \geq 1$ tale che

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|x_k - \alpha|^p} = \gamma \quad \text{con} \quad \begin{cases} 0 < \gamma \leq 1 & \text{se } p = 1 \\ \gamma > 0 & \text{se } p > 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

allora si dice che la successione ha *ordine di convergenza* p . La costante γ prende il nome di *costante asintotica di convergenza*.

In particolare se $p = 1$ e $0 < \gamma < 1$ allora la convergenza si dice **lineare**, mentre se $p > 1$ allora la convergenza si dice genericamente **superlineare**, per esempio se $p = 2$ la convergenza si dice quadratica, se $p = 3$ cubica e così via.

Osservazione. La relazione (2.7) implica che esiste una costante positiva β ($\beta \simeq \gamma$) tale che, per k sufficientemente grande:

$$|x_{k+1} - \alpha| \leq \beta |x_k - \alpha|^p \quad (2.8)$$

ed anche

$$\frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|\alpha|} \leq \beta |\alpha|^{p-1} \left| \frac{x_k - \alpha}{\alpha} \right|^p. \quad (2.9)$$

Le (2.8) e (2.9) indicano che la riduzione di errore (assoluto o relativo) ad ogni passo è tanto maggiore quanto più alto è l'ordine di convergenza e, a parità di ordine, quanto più piccola è la costante asintotica di convergenza. In generale l'ordine di convergenza è un numero reale maggiore o uguale a 1. Tuttavia per i metodi di iterazione funzionale di tipo (2.4) è un numero intero per il quale vale il seguente teorema.

Teorema 2.4.3 *Sia $\{x_k\}_{k=0}^\infty$ una successione generata dallo schema (2.4) convergente ad α , punto fisso di $g(x)$, funzione sufficientemente derivabile in un intorno di α . La successione ha ordine di convergenza $p \geq 1$ se e solo se*

$$g'(\alpha) = g''(\alpha) = \dots = g^{(p-1)}(\alpha) = 0, \quad g^{(p)}(\alpha) \neq 0. \quad (2.10)$$

Inoltre il valore della costante asintotica di convergenza è

$$\gamma = \frac{|g^{(p)}(\alpha)|}{p!}.$$

Dimostrazione. Scriviamo lo sviluppo in serie di Taylor della funzione $g(x)$ in x_k prendendo come punto iniziale α :

$$\begin{aligned} g(x_k) &= g(\alpha) + g'(\alpha)(x_k - \alpha) + \frac{g''(\alpha)}{2!}(x_k - \alpha)^2 + \dots \\ &\quad \dots + \frac{g^{(p-1)}(\alpha)}{(p-1)!}(x_k - \alpha)^{p-1} + \frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p!}(x_k - \alpha)^p. \end{aligned}$$

Sostituendo a $g(x_k)$ il valore x_{k+1} e sfruttando l'ipotesi che α è punto fisso di $g(x)$ risulta

$$\begin{aligned} x_{k+1} - \alpha &= g'(\alpha)(x_k - \alpha) + \frac{g''(\alpha)}{2!}(x_k - \alpha)^2 + \dots \\ &\quad \dots + \frac{g^{(p-1)}(\alpha)}{(p-1)!}(x_k - \alpha)^{p-1} + \frac{g^{(p)}(\xi_k)}{p!}(x_k - \alpha)^p \end{aligned}$$

dove ξ è compreso tra x_k e α . Quindi se vale l'ipotesi (2.10) e passando ai moduli risulta

$$\frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|x_k - \alpha|^p} = \frac{|g^{(p)}(\xi_k)|}{p!}$$

e quindi

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|x_k - \alpha|^p} = \frac{|g^{(p)}(\alpha)|}{p!}.$$

Da questa relazione scaturisce il valore della costante asintotica di convergenza:

$$\gamma = \frac{|g^{(p)}(\alpha)|}{p!}.$$

Viceversa supponiamo per ipotesi che la successione ha ordine di convergenza p e dimostriamo che

$$g'(\alpha) = g''(\alpha) = \dots = g^{(p-1)}(\alpha) = 0.$$

Ipotizziamo, per assurdo, che esista una derivata di ordine i , $i < p$, diversa da zero, ovvero

$$g^{(i)}(\alpha) \neq 0.$$

Scriviamo lo sviluppo in serie di Taylor di $x_{k+1} = g(x_k)$:

$$x_{k+1} = g(x_k) = g(\alpha) + \frac{g^{(i)}(\xi_k)}{i!}(x_k - \alpha)^i$$

da cui

$$x_{k+1} - \alpha = \frac{g^{(i)}(\xi_k)}{i!}(x_k - \alpha)^i.$$

Passando ai moduli e calcolando il limite della successione si ottiene:

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{|x_{k+1} - \alpha|}{|x_k - \alpha|^i} = \frac{|g^{(i)}(\alpha)|}{i!} \neq 0$$

da cui segue che la successione ha ordine $i < p$ in contrasto con l'ipotesi fatta. $\square$

Osservazione. L'ordine di convergenza p può essere anche un numero non intero. In questo caso, posto $q = [p]$, se $g \in C^q([a, b])$ si ha anche

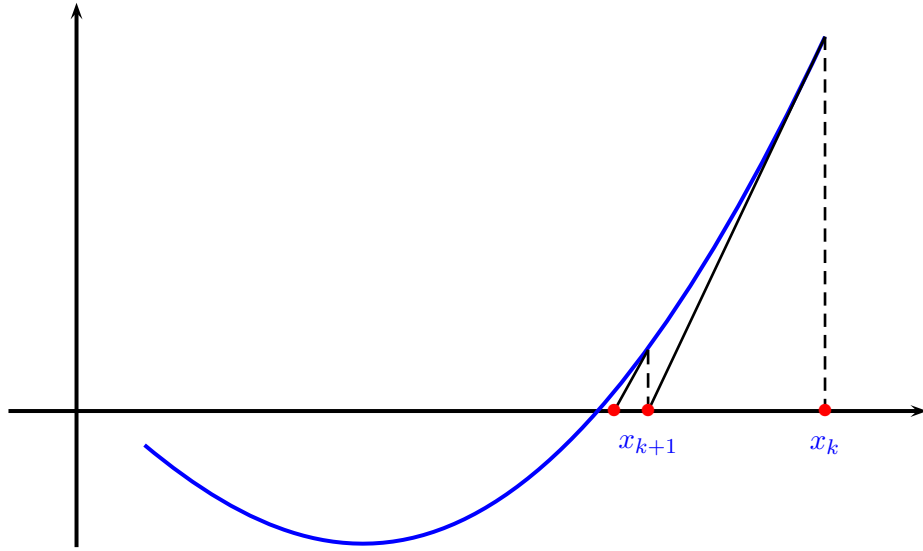
$$g'(\alpha) = g''(\alpha) = \cdots = g^{(q)}(\alpha) = 0,$$

e che g non ha derivata di ordine $q + 1$ altrimenti per il precedente teorema tutte le successioni ottenute da (2.4) a partire da $x_0 \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$ avrebbero ordine almeno $q + 1$.

Definizione 2.4.3 *Un metodo iterativo convergente ad α si dice di ordine p (di ordine almeno p) se tutte le successioni ottenute al variare del punto iniziale in un opportuno intorno di α convergono con ordine di convergenza p (almeno p).*

2.4.2 Metodo di Newton-Raphson

Nell'ipotesi che f sia derivabile ed ammetta derivata prima continua allora un altro procedimento per l'approssimazione dello zero della funzione $f(x)$ è il **metodo di Newton-Raphson**, noto anche come **metodo delle tangenti**. Nella figura seguente è riportata l'interpretazione geometrica di tale metodo. A partire dall'approssimazione x_0 si considera la retta tangente alla funzione f passante per il punto P_0 di coordinate $(x_0, f(x_0))$. Si calcola l'ascissa x_1 del punto di intersezione tra tale retta tangente e l'asse delle x e si ripete il procedimento a partire dal punto P_1 di coordinate $(x_1, f(x_1))$. Nella seguente figura è rappresentato graficamente il metodo di Newton-Raphson.



Per ricavare la funzione iteratrice del metodo consideriamo l'equazione della retta tangente alla funzione $y = f(x)$ nel punto di coordinate $(x_k, f(x_k))$

$$y - f(x_k) = f'(x_k)(x - x_k).$$

Posto $y = 0$ ricaviamo l'espressione di x che diventa il nuovo elemento della successione x_{k+1} :

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

che equivale, scegliendo in (2.6) $h(x) = f'(x)$, al metodo di iterazione funzionale in cui la funzione $g(x)$ è

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}. \quad (2.12)$$

Per la convergenza e l'ordine del metodo di Newton-Raphson vale il seguente teorema.

Teorema 2.4.4 *Sia $f \in \mathcal{C}^3([a, b])$, tale che $f'(x) \neq 0$, per $x \in [a, b]$, dove $[a, b]$ è un opportuno intervallo contenente α , allora valgono le seguenti proposizioni:*

1. *esiste un intervallo $[\alpha - \rho, \alpha + \rho]$, tale che, scelto x_0 appartenente a tale intervallo, la successione definita dal metodo di Newton-Raphson è convergente ad α ;*

2. la convergenza è di ordine $p \geq 2$.

Dimostrazione. Per valutare la convergenza del metodo calcoliamo la derivata prima della funzione iteratrice:

$$g'(x) = 1 - \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}.$$

Poichè $f'(\alpha) \neq 0$ risulta:

$$g'(\alpha) = \frac{f(\alpha)f''(\alpha)}{[f'(\alpha)]^2} = 0$$

quindi, fissato un numero positivo $\kappa < 1$, esiste $\rho > 0$ tale che per ogni $x \in [\alpha - \rho, \alpha + \rho]$ si ha $|g'(x)| < \kappa$ e quindi vale il teorema di convergenza 2.4.2.

Per dimostrare la seconda parte del teorema si deve calcolare la derivata seconda di $g(x)$:

$$g''(x) = \frac{[f'(x)f''(x) + f(x)f'''(x)][f'(x)]^2 - 2f(x)f'(x)[f''(x)]^2}{[f'(x)]^4}.$$

Calcolando la derivata seconda in $x = \alpha$ risulta

$$g''(\alpha) = \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} \quad (2.13)$$

ne segue che se $f''(\alpha) \neq 0$ allora anche $g''(\alpha) \neq 0$ e quindi, applicando il Teorema 2.4.3, l'ordine $p = 2$. Se invece $f''(\alpha) = 0$ allora l'ordine è almeno pari a 3. Dalla relazione 2.13 segue inoltre che la costante asintotica di convergenza vale

$$\gamma = \frac{1}{2} \left| \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} \right|. \quad \square$$

Il Teorema 2.4.4 vale nell'ipotesi in cui $f'(\alpha) \neq 0$, cioè se α è una radice semplice di $f(x)$. Consideriamo ora la seguente definizione.

Definizione 2.4.4 Sia $f \in C^r([a, b])$ per un intero $r > 0$. Una radice α di $f(x)$ si dice di **molteplicità r** se

$$\lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f(x)}{(x - \alpha)^r} = \gamma, \quad \gamma \neq 0, \gamma \neq \pm\infty. \quad (2.14)$$

Se α è una radice della funzione $f(x)$ di molteplicità r allora risulta

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \dots = f^{(r-1)}(\alpha) = 0, \quad f^{(r)}(\alpha) = \gamma \neq 0.$$

Se la radice α ha molteplicità $r > 1$ l'ordine di convergenza del metodo non è più 2. In questo caso infatti si può porre

$$f(x) = q(x)(x - \alpha)^r, \quad q(\alpha) \neq 0,$$

quindi riscrivendo la funzione iteratrice del metodo di Newton-Raphson risulta

$$g(x) = x - \frac{q(x)(x - \alpha)}{rq(x) + q'(x)(x - \alpha)},$$

da cui, dopo una serie di calcoli, risulta

$$g'(\alpha) = 1 - \frac{1}{r}. \quad (2.15)$$

Pertanto, poichè $r > 1$ risulta $|g'(x)| < 1$ e quindi per il Teorema 2.4.2 il metodo è ancora convergente ma, applicando il Teorema 2.4.3 l'ordine di convergenza è 1.

Se si conosce la molteplicità della radice si può modificare il metodo di Newton-Raphson ottenendo uno schema numerico con ordine 2. Ponendo

$$x_{k+1} = x_k - r \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

si definisce un metodo con la seguente funzione iteratrice

$$g(x) = x - r \frac{f(x)}{f'(x)}$$

da cui segue, tenendo conto della (2.15), che

$$g'(\alpha) = 0.$$

Riportiamo nel seguito l'implementazione MatLab del metodo di Newton-Raphson.

Esempio 2.4.1 *Approssimare il numero $\alpha = \sqrt[m]{c}$ con $m \in \mathbb{R}$, $m \geq 2$, $c > 0$.*

Il numero α cercato è lo zero della funzione

$$f(x) = x^m - c.$$

Poichè per $x > 0$ la funzione risulta essere monotona allora è sufficiente scegliere un qualsiasi $x_0 > 0$ per ottenere una successione convergente alla radice m -esima di c . Il metodo di Newton-Raphson fornisce la formula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^m - c}{mx_k^{m-1}} = \frac{1}{m} [(m-1)x_k + cx_k^{1-m}], \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Per $m = 2$ lo schema diviene

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{c}{x_k} \right),$$

che è la cosiddetta formula di Erone per il calcolo della radice quadrata, nota già agli antichi Greci.

Considerando come esempio $m = 4$ e $c = 3$, poichè $f(0) < 0$ e $f(3) > 0$ allora si può applicare il metodo di bisezione ottenendo la seguente successione di intervalli:

Intervallo	Punto medio	Valore di f nel punto medio
$[0, 3]$	$c = 1.5$	$f(c) = 2.0625$
$[0, 1.5]$	$c = 0.75$	$f(c) = -2.6836$
$[0.75, 1.5]$	$c = 1.125$	$f(c) = -1.3982$
$[1.125, 1.5]$	$c = 1.3125$	$f(c) = -0.0325$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Dopo 10 iterazioni $c = 1.3154$ mentre $\alpha = 1.3161$, e l'errore è pari circa a $6.4433 \cdot 10^{-4}$.

Applicando il metodo di Newton-Raphson, si ottiene il processo iterativo

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

Poichè per $x > 0$ la funzione è monotona crescente allora si può scegliere $x_0 = 3$ come approssimazione iniziale, ottenendo la seguente successione:

$x_0 = 3$	$f(x_0) = 78$
$x_1 = 2.2778$	$f(x_1) = 23.9182$
$x_2 = 1.7718$	$f(x_2) = 6.8550$
$x_3 = 1.4637$	$f(x_3) = 1.5898$
$x_4 = 1.3369$	$f(x_4) = 0.1948$
$x_5 = 1.3166$	$f(x_5) = 0.0044$
$\vdots$	$\vdots$

Dopo 10 iterazioni l'approssimazione è esatta con un errore dell'ordine di 10^{-16} .

2.4.3 Il metodo della direzione costante

Se applicando ripetutamente la formula di Newton-Raphson accade che la derivata prima della funzione $f(x)$ si mantiene sensibilmente costante allora si può porre

$$M = f'(x_k)$$

e applicare la formula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{M} \quad (2.16)$$

anzichè la (2.11). La (2.16) definisce un metodo che viene detto **metodo di Newton semplificato** oppure **metodo della direzione costante** in quanto geometricamente equivale all'applicazione del metodo di Newton in cui anzichè prendere la retta tangente la curva f si considera la retta avente coefficiente angolare uguale a M . La funzione iteratrice del metodo è

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{M}$$

ed il metodo è convergente se

$$|g'(x)| = \left| 1 - \frac{f'(x)}{M} \right| < 1$$

da cui si deduce che è necessario che $f'(x)$ ed M abbiano lo stesso segno.

2.4.4 Il Metodo della Secante

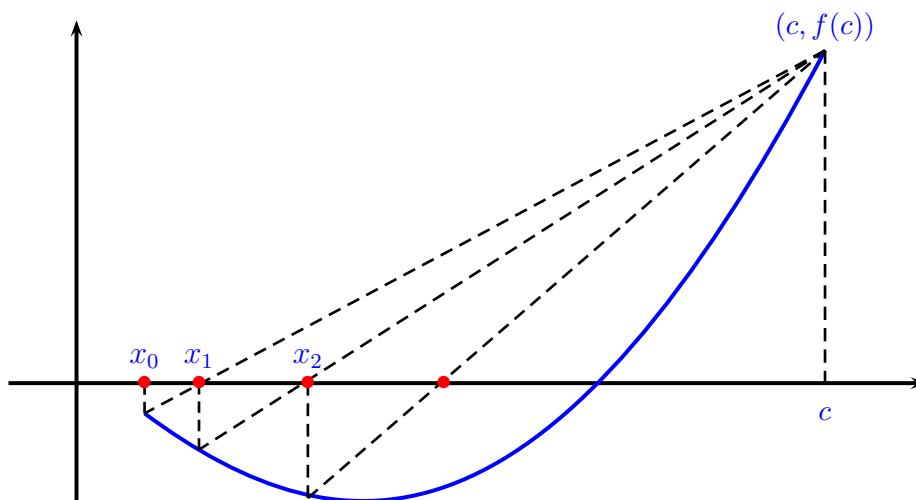
Il metodo della secante è definito dalla relazione

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) \frac{x_k - c}{f(x_k) - f(c)}$$

dove $c \in [a, b]$. Il significato geometrico di tale metodo è il seguente: ad un generico passo k si considera la retta congiungente i punti di coordinate $(x_k, f(x_k))$ e $(c, f(c))$ e si pone x_{k+1} pari all'ascissa del punto di intersezione di tale retta con l'asse x . Dalla formula si evince che la funzione iteratrice del metodo è

$$g(x) = x - f(x) \frac{x - c}{f(x) - f(c)}.$$

Il metodo è rappresentato graficamente nella seguente figura.



In base alla teoria vista nei paragrafi precedenti il metodo ha ordine di convergenza 1 se $g'(\alpha) \neq 0$. Può avere ordine di convergenza almeno 1 se $g'(\alpha) = 0$. Tale eventualità si verifica se la tangente alla curva in α ha lo stesso coefficiente angolare della retta congiungente i punti $(\alpha, 0)$ e $(c, f(c))$.

Il metodo delle secanti ha lo svantaggio di avere, solitamente, convergenza lineare mentre il metodo di Newton-Raphson, pur avendo convergenza quadratica, ha lo svantaggio di richiedere, ad ogni passo, due valutazioni di funzioni: $f(x_k)$ ed $f'(x_k)$, quindi se il costo computazionale di $f'(x_k)$ è molto più elevato rispetto a quello di $f(x_k)$ può essere più conveniente l'uso di metodi che necessitano solo del calcolo del valore della funzione $f(x)$.

2.5 Sistemi di Equazioni non Lineari

Supponiamo che sia Ω un sottoinsieme di $\mathbb{R}^n$ e che siano assegnate le n funzioni

$$f_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Ogni vettore $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, soluzione del sistema non lineare di n equazioni in n incognite

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

prende il nome di radice dell'equazione vettoriale

$$F(\mathbf{x}) = 0$$

oppure di zero della funzione vettoriale

$$F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$$

dove il vettore $F(\mathbf{x})$ è definito da:

$$F(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix}.$$

Tutti i metodi per la risoluzione del sistema non lineare $F(\mathbf{x}) = 0$ partono dalle seguenti due ipotesi:

1. la funzione $F(\mathbf{x})$ è calcolabile in ogni punto del dominio Ω ;
2. la funzione $F(\mathbf{x})$ è continua in un opportuno intorno della radice.

Come nel caso scalare l'equazione $F(\mathbf{x}) = 0$ viene trasformata in un problema del tipo

$$\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{x}) \tag{2.17}$$

ovvero

$$x_i = \Phi_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

con $\Phi(\mathbf{x})$ funzione definita in Ω e scelta in modo tale che le proprietà richieste ad $F(\mathbf{x})$ si trasferiscano su Φ , cioè anch'essa deve essere continua in un opportuno intorno della radice e calcolabile nell'insieme di definizione. Il motivo di tali richieste è che la funzione $\Phi(\mathbf{x})$ viene utilizzata per definire una successione di vettori nel seguente modo. Sia $\mathbf{x}^{(0)}$ un vettore iniziale appartenente a Ω e definiamo la seguente successione

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \Phi(\mathbf{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$

ovvero

$$x_i^{(k+1)} = \Phi_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}), \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

La funzione $\Phi(\mathbf{x})$ prende il nome di **funzione iteratrice** dell'equazione non lineare $F(\mathbf{x}) = 0$. Ricordiamo che un vettore $\boldsymbol{\alpha}$ che soddisfa la (2.17) viene detto **punto fisso di $\Phi(\mathbf{x})$** (oppure **punto unito**). La successione dei vettori $\mathbf{x}^{(k)}$ definisce il **metodo delle approssimazioni successive** per il calcolo appunto di tale punto fisso. Quello che si richiede a tale successione è che essa converga al vettore $\boldsymbol{\alpha}$, soluzione del sistema non lineare. In questo caso per convergenza si intende che

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} = \boldsymbol{\alpha}$$

cioè, in termini di componenti,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = \alpha_i.$$

Per la convergenza del metodo delle approssimazioni successive vale quindi il seguente teorema.

Teorema 2.5.1 *Se la funzione $\Phi(\mathbf{x})$ è differenziabile con continuità in un intorno del punto fisso $\boldsymbol{\alpha}$, e risulta*

$$\rho(J_{\Phi}(\boldsymbol{\alpha})) < 1$$

allora, scelto $\mathbf{x}^{(0)}$ appartenente a tale intorno, la successione costruita con il metodo delle approssimazioni successive è convergente a $\boldsymbol{\alpha}$.

Chiaramente il risultato appena enunciato ha un'importanza teorica in quanto generalmente è molto complesso (o non è possibile) conoscere gli autovalori della matrice Jacobiana nella soluzione del sistema non lineare.

2.5.1 Il Metodo di Newton per Sistemi non Lineari

Se si conosce abbastanza bene l'approssimazione iniziale della soluzione del sistema di equazioni

$$F(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.18)$$

il metodo di Newton risulta molto efficace. Il **Metodo di Newton** per risolvere il sistema (2.18) può essere derivato in modo semplice come segue. Sia $\mathbf{x}^{(k)}$ una buona approssimazione a $\boldsymbol{\alpha}$, soluzione di $F(\mathbf{x}) = 0$, possiamo allora scrivere lo sviluppo in serie della funzione F valutata nella soluzione del sistema non lineare prendendo come punto iniziale proprio il vettore $\mathbf{x}^{(k)}$:

$$0 = F(\boldsymbol{\alpha}) = F(\mathbf{x}^{(k)}) + J_F(\boldsymbol{\delta}_k)(\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k)})$$

dove $\boldsymbol{\delta}_k$ è un vettore appartenente al segmento congiungente $\boldsymbol{\alpha}$ e $\mathbf{x}^{(k)}$ e $J_F(\mathbf{x})$ indica la matrice Jacobiana i cui elementi sono le derivate prime delle funzioni componenti di $F(\mathbf{x})$:

$$J_F(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

Supponendo ora che la matrice Jacobiana sia invertibile possiamo scrivere,

$$\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{x}^{(k)} = -J_F^{-1}(\boldsymbol{\delta}_k)F(\mathbf{x}^{(k)}) \Rightarrow \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{x}^{(k)} - J_F^{-1}(\boldsymbol{\delta}_k)F(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (2.19)$$

Se $\mathbf{x}^{(k)}$ è sufficientemente vicino a $\boldsymbol{\alpha}$ allora possiamo confondere $\mathbf{x}^{(k)}$ con $\boldsymbol{\delta}_k$: in tal modo però (2.19) non fornirà esattamente $\boldsymbol{\alpha}$ ma una sua ulteriore approssimazione, che indichiamo con $\mathbf{x}^{(k+1)}$. In questo modo abbiamo definito il seguente processo iterativo

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - J_F^{-1}(\mathbf{x}^{(k)})F(\mathbf{x}^{(k)}). \quad (2.20)$$

che definisce, appunto il **metodo di Newton**.

Può essere interessante soffermarsi su alcuni dettagli di implementazione del metodo (2.20). Poniamo infatti

$$\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$$

e osserviamo che, moltiplicando per la matrice $J_F(\mathbf{x}^{(k)})$ l'espressione del metodo di Newton diventa

$$J_F(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{z}^{(k)} = -F(\mathbf{x}^{(k)})$$

da cui, risolvendo il sistema lineare che ha $J_F(\mathbf{x}^{(k)})$ come matrice dei coefficienti e $-F(\mathbf{x}^{(k)})$ come vettore dei termini noti si può ricavare il vettore $\mathbf{z}^{(k)}$ e ottenere il vettore al passo $k+1$:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{z}^{(k)}.$$

L'algoritmo, ad un generico passo k , può essere così riassunto:

1. Calcolare la matrice $J_F(\mathbf{x}^{(k)})$ e il vettore $-F(\mathbf{x}^{(k)})$;
2. Risolvere il sistema lineare $J_F(\mathbf{x}^{(k)})\mathbf{z}^{(k)} = -F(\mathbf{x}^{(k)})$;
3. Calcolare il vettore $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{z}^{(k)}$;
4. Valutare la convergenza: fissata una tolleranza ε , se risulta

$$\|\mathbf{z}^{(k)}\| \leq \varepsilon$$

allora $\mathbf{x}^{(k+1)}$ è una buona approssimazione della soluzione, altrimenti si ritorna al passo 1.

Consideriamo come esempio la funzione vettoriale composta da due componenti

$$f_1(x, y) = x^3 + y - 1, \quad f_2(x, y) = y^3 - x + 1.$$

Il sistema non lineare

$$F(\mathbf{x}) = 0 = \begin{bmatrix} x^3 + y - 1 \\ y^3 - x + 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ammette come soluzione $x = 1$ e $y = 0$. La matrice Jacobiana di $F(\mathbf{x})$ è la seguente

$$J_F(x, y) = \begin{bmatrix} 3x^2 & 1 \\ -1 & 3y^2 \end{bmatrix}$$

pertanto il metodo di Newton è definito dal seguente schema:

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_k \\ y_k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3x_k^2 & 1 \\ -1 & 3y_k^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} x_k^3 + y_k - 1 \\ y_k^3 - x_k + 1 \end{bmatrix}.$$

Capitolo 3

Metodi numerici per sistemi lineari

3.1 Introduzione

Siano assegnati una matrice non singolare $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ed un vettore $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Risolvere un sistema lineare avente A come matrice dei coefficienti e $\mathbf{b}$ come vettore dei termini noti significa trovare un vettore $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ tale che

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (3.1)$$

Esplicitare la relazione (3.1) significa imporre le uguaglianze tra le componenti dei vettori a primo e secondo membro:

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 + & a_{12}x_2 + & \cdots + & a_{1n}x_n = & b_1 \\ a_{21}x_1 + & a_{22}x_2 + & \cdots + & a_{2n}x_n = & b_2 \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1}x_1 + & a_{n2}x_2 + & \cdots + & a_{nn}x_n = & b_n. \end{array} \quad (3.2)$$

Le (3.2) definiscono un **sistema di n equazioni algebriche lineari** nelle n **incognite** $x_1, x_2, \dots, x_n$. Il vettore $\mathbf{x}$ viene detto **vettore soluzione**. Prima di affrontare il problema della risoluzione numerica di sistemi lineari richiamiamo alcuni importanti concetti di algebra lineare.

Definizione 3.1.1 Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è una matrice di ordine 1, si definisce **determinante di A** il numero

$$\det A = a_{11}.$$

Se la matrice A è quadrata di ordine n allora fissata una qualsiasi riga (colonna) di A , diciamo la i -esima (j -esima) allora applicando la cosiddetta *regola di Laplace* il determinante di A è:

$$\det A = \sum_{j=1}^n a_{ij}(-1)^{i+j} \det A_{ij}$$

dove A_{ij} è la matrice che si ottiene da A cancellando la i -esima riga e la j -esima colonna.

Il determinante è pure uguale a

$$\det A = \sum_{i=1}^n a_{ij}(-1)^{i+j} \det A_{ij},$$

cioè il determinante è indipendente dall'indice di riga (o di colonna) fissato. Se A è la matrice di ordine 2

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}.$$

allora

$$\det A = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}.$$

Il determinante ha le seguenti proprietà:

1. Se A è una matrice triangolare o diagonale allora

$$\det A = \prod_{i=1}^n a_{ii};$$

2. $\det I = 1$;

3. $\det A^T = \det A$;

4. $\det AB = \det A \det B$ (Regola di Binet);

5. se $\alpha \in \mathbb{R}$ allora $\det \alpha A = \alpha^n \det A$;

6. $\det A = 0$ se una riga (o una colonna) è nulla, oppure una riga (o una colonna) è proporzionale ad un'altra riga (o colonna) oppure è combinazione lineare di due (o più) righe (o colonne) di A .

7. Se A è una matrice triangolare a blocchi

$$A = \begin{bmatrix} B & C \\ O & D \end{bmatrix}$$

con B e D matrici quadrate, allora

$$\det A = \det B \det D. \quad (3.3)$$

Una matrice A di ordine n si dice **non singolare** se il suo determinante è diverso da zero, in caso contrario viene detta *singolare*. Si definisce **inversa di A** la matrice A^{-1} tale che:

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I_n$$

Per quello che riguarda il determinante della matrice inversa vale la seguente proprietà:

$$\det A^{-1} = \frac{1}{\det A}.$$

Un metodo universalmente noto per risolvere il problema (3.1) è l'applicazione della cosiddetta **Regola di Cramer** la quale fornisce:

$$x_i = \frac{\det A_i}{\det A} \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.4)$$

dove A_i è la matrice ottenuta da A sostituendo la sua i -esima colonna con il termine noto $\mathbf{b}$. Dalla (3.4) è evidente che per ottenere tutte le componenti del vettore soluzione è necessario il calcolo di $n + 1$ determinanti di ordine n . Calcoliamo ora il numero di operazioni aritmetiche necessario per calcolare un determinante con la regola di Laplace. Indichiamo con $f(n)$ il numero di operazioni aritmetiche su numeri reali necessario per calcolare un determinante di ordine n , ricordando che $f(2) = 3$. La regola di Laplace richiede il calcolo di n determinanti di matrici di ordine $n - 1$ (il cui costo computazionale in termini di operazioni è $nf(n - 1)$) inoltre n prodotti ed $n - 1$ somme algebriche, ovvero

$$f(n) = nf(n - 1) + 2n - 1.$$

Per semplicità tralasciamo gli ultimi addendi ottenendo il valore approssimato

$$f(n) \simeq nf(n - 1)$$

Applicando lo stesso ragionamento al numero $f(n - 1) \simeq (n - 1)f(n - 2)$ e in modo iterativo si ottiene

$$f(n) \simeq n(n - 1)(n - 2) \dots 3f(2) = \frac{3}{2} n!.$$

Se $n = 100$ si ha $100! \simeq 10^{157}$. Anche ipotizzando di poter risolvere il problema con un elaboratore in grado di eseguire miliardi di operazioni al secondo sarebbero necessari diversi anni di tempo per calcolare un singolo determinante. Questo esempio rende chiara la necessità di trovare metodi alternativi per risolvere sistemi lineari, in particolare quando le dimensioni sono particolarmente elevate.

Un calcolatore in grado di effettuare 10^9 flops al secondo impiegherebbe 9.6×10^{47} anni per risolvere un sistema di 50 equazioni.

3.2 Risoluzione di sistemi triangolari

Prima di affrontare la soluzione algoritmica di un sistema lineare vediamo qualche particolare sistema che può essere agevolmente risolto. Assumiamo che il sistema da risolvere abbia la seguente forma:

$$\begin{array}{ccccccc}
 a_{11}x_1 & +a_{12}x_2 & \dots & +a_{1i}x_i & \dots & +a_{1n}x_n & = b_1 \\
 & a_{22}x_2 & \dots & +a_{2i}x_i & \dots & +a_{2n}x_n & = b_2 \\
 & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & a_{ii}x_i & \dots & +a_{in}x_n & = b_i \\
 & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\
 & & & & & a_{nn}x_n & = b_n
 \end{array} \tag{3.5}$$

In questo caso la matrice A è detta **triangolare superiore**. Il determinante di una matrice di questo tipo è uguale al prodotto degli elementi diagonali pertanto la matrice è non singolare se risulta $a_{ii} \neq 0$ per ogni i . In questo caso, la soluzione è facilmente calcolabile infatti è sufficiente osservare che nell'ultima equazione compare solo un'incognita che può essere calcolata e che procedendo a ritroso da ogni equazione può essere ricavata un'incognita poichè le successive sono già state calcolate. Il metodo può essere riassunto nelle seguenti formule:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \\ \\ x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}} \quad i = n-1, \dots, 1. \end{array} \right. \tag{3.6}$$

Il metodo (3.6) prende il nome di **metodo di sostituzione all'indietro**, poichè il vettore $\mathbf{x}$ viene calcolato partendo dall'ultima componente.

Anche per il seguente sistema il vettore soluzione è calcolabile in modo analogo.

$$\begin{array}{ccccccc}
 a_{11}x_1 & & & & & & = b_1 \\
 a_{21}x_1 & +a_{22}x_2 & & & & & = b_2 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & & & & \vdots \\
 a_{i1}x_1 & +a_{i2}x_2 & \dots & +a_{ii}x_i & & & = b_i \\
 \vdots & \vdots & & & \ddots & & \vdots \\
 a_{n1}x_1 & +a_{n2}x_2 & \dots & +a_{ni}x_i & \dots & +a_{nn}x_n & = b_n
 \end{array} \tag{3.7}$$

In questo caso la matrice dei coefficienti è **triangolare inferiore** e la soluzione viene calcolata con il **metodo di sostituzione in avanti**:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \\ \\ x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}} \quad i = 2, \dots, n. \end{array} \right.$$

Concludiamo questo paragrafo facendo alcune considerazioni sul costo computazionale dei metodi di sostituzione. Per costo computazionale di un algoritmo si intende il numero di operazioni che esso richiede per fornire la soluzione di un determinato problema. La misura del costo computazionale di un algoritmo fornisce una stima (seppur grossolana) del tempo che esso richiede per fornire la soluzione approssimata di un determinato problema indipendentemente dall'elaboratore che viene utilizzato e dal linguaggio di programmazione in cui esso è stato codificato. Nel caso di algoritmi numerici le operazioni che si contano sono quelle aritmetiche su dati reali. Considerando per esempio il metodo di sostituzione in avanti, per calcolare x_1 è necessaria una sola operazione (una divisione), per calcolare x_2 le operazioni sono tre (un prodotto, una somma algebrica e una divisione), mentre il generico x_i richiede $2i - 1$ operazioni ($i - 1$ prodotti, $i - 1$ somme algebriche e una divisione). Indicato con $c(n)$ il numero totale di operazioni necessarie è:

$$C(n) = \sum_{i=1}^n (2i - 1) = 2 \sum_{i=1}^n i - \sum_{i=1}^n 1 = 2 \frac{n(n+1)}{2} - n = n^2,$$

sfruttando la proprietà che

$$\sum_{i=1}^n i = \frac{n(n+1)}{2}.$$

Il costo computazionale viene sempre valutato in funzione di un determinato parametro (il numero assoluto in sè non avrebbe alcun significato) che, in questo caso è la dimensione del sistema. In questo modo è possibile prevedere il tempo necessario per calcolare la soluzione del problema.

3.3 Metodo di Eliminazione di Gauss

L'idea di base del metodo di Gauss è appunto quella di operare delle opportune trasformazioni sul sistema originale $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, che non costino eccessivamente, in modo da ottenere un sistema equivalente¹ avente come matrice dei coefficienti una matrice triangolare superiore.

Supponiamo di dover risolvere il sistema:

$$\begin{array}{cccccccl} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & & & = & -1 \\ -6x_1 & -4x_2 & -5x_3 & +x_4 & = & 1 \\ -4x_1 & -6x_2 & -3x_3 & -x_4 & = & 2 \\ 2x_1 & -3x_2 & +7x_3 & -3x_4 & = & 0. \end{array}$$

Il vettore soluzione di un sistema lineare non cambia se ad un'equazione viene sommata la combinazione lineare di un'altra equazione del sistema. L'idea alla base del metodo di Gauss è quella di ottenere un sistema lineare con matrice dei coefficienti triangolare superiore effettuando opportune combinazioni lineari tra le equazioni. Poniamo

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ -6 & -4 & -5 & 1 \\ -4 & -6 & -3 & -1 \\ 2 & -3 & 7 & -3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(1)} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

¹Due sistemi si dicono equivalenti se ammettono lo stesso insieme di soluzioni, quindi nel nostro caso la stessa soluzione. Osserviamo che se $\mathbf{x}^*$ è un vettore tale che $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$ e B è una matrice non singolare allora $BA\mathbf{x}^* = B\mathbf{b}$; viceversa se $BA\mathbf{x}^* = B\mathbf{b}$ e B è non singolare allora $B^{-1}BA\mathbf{x}^* = B^{-1}B\mathbf{b}$ e quindi $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$. Dunque se B è non singolare i sistemi $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ e $BA\mathbf{x} = B\mathbf{b}$ sono equivalenti.

rispettivamente la matrice dei coefficienti e il vettore dei termini noti del sistema di partenza. Calcoliamo un sistema lineare equivalente a quello iniziale ma che abbia gli elementi sottodiagonali della prima colonna uguali a zero. Azzeriamo ora l'elemento $a_{21}^{(1)}$. Lasciamo inalterata la prima equazione. Poniamo

$$l_{21} = -\frac{a_{21}}{a_{11}} = -\frac{-6}{2} = 3$$

e moltiplichiamo la prima equazione per l_{21} ottenendo:

$$6x_1 + 3x_2 + 3x_3 = -3.$$

La nuova seconda equazione sarà la somma tra la seconda equazione e la prima moltiplicata per l_{21} :

$$\begin{array}{rrrrr} -6x_1 & -4x_2 & -5x_3 & +x_4 & = 1 \\ 6x_1 & +3x_2 & +3x_3 & & = -3 \\ \hline & -x_2 & -2x_3 & +x_4 & = -2 \end{array} \quad [\text{Nuova seconda equazione}].$$

Procediamo nello stesso modo per azzerare gli altri elementi della prima colonna. Poniamo

$$l_{31} = -\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = -\frac{-4}{2} = 2$$

e moltiplichiamo la prima equazione per l_{31} ottenendo:

$$4x_1 + 2x_2 + 2x_3 = -2.$$

La nuova terza equazione sarà la somma tra la terza equazione e la prima moltiplicata per l_{31} :

$$\begin{array}{rrrrr} -4x_1 & -6x_2 & -3x_3 & -x_4 & = 2 \\ 4x_1 & +2x_2 & +2x_3 & & = -2 \\ \hline & -4x_2 & -x_3 & -x_4 & = 0 \end{array} \quad [\text{Nuova terza equazione}].$$

Poniamo ora

$$l_{41} = -\frac{a_{41}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = -\frac{2}{2} = -1$$

e moltiplichiamo la prima equazione per l_{41} ottenendo:

$$-2x_1 - x_2 - x_3 = 1.$$

La nuova quarta equazione sarà la somma tra la quarta equazione e la prima moltiplicata per l_{41} :

$$\begin{array}{rrrrr} 2x_1 & -3x_2 & +7x_3 & -3x_4 & = 0 \\ -2x_1 & -x_2 & -x_3 & & = 1 \\ \hline & -4x_2 & +6x_3 & -3x_4 & = 1 \end{array} \quad [\text{Nuova quarta equazione}].$$

I numeri $l_{21}, l_{31}, \dots$ sono detti **moltiplicatori**.

Al secondo passo il sistema lineare è diventato:

$$\begin{array}{rrrrr} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & & = -1 \\ & -x_2 & -2x_3 & +x_4 & = -2 \\ & -4x_2 & -x_3 & -x_4 & = 0 \\ & -4x_2 & +6x_3 & -3x_4 & = 1. \end{array}$$

La matrice dei coefficienti e il vettore dei termini noti sono diventati:

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 1 \\ 0 & -4 & -1 & -1 \\ 0 & -4 & 6 & -3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Cerchiamo ora di azzerare gli elementi sottodiagonali della seconda colonna, a partire da a_{32} , usando una tecnica simile. Innanzitutto osserviamo che non conviene prendere in considerazione una combinazione lineare che coinvolga la prima equazione perchè avendo questa un elemento in prima posizione diverso da zero quando sommata alla terza equazione cancellerà l'elemento uguale a zero in prima posizione. Lasciamo inalterate le prime due equazioni del sistema e prendiamo come equazione di riferimento la seconda. Poichè $a_{22}^{(2)} \neq 0$ poniamo

$$l_{32} = -\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = -\frac{-4}{-1} = -4$$

e moltiplichiamo la seconda equazione per l_{32} ottenendo:

$$4x_2 + 8x_3 - 4x_4 = 8.$$

La nuova terza equazione sarà la somma tra la terza equazione e la seconda appena modificata:

$$\begin{array}{rrrrr} -4x_2 & -x_3 & -x_4 & & = 0 \\ 4x_2 & +8x_3 & -4x_4 & & = 8 \\ \hline & 7x_3 & -5x_4 & & = 8 \end{array} \quad [\text{Nuova terza equazione}].$$

Poniamo

$$l_{42} = -\frac{a_{42}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = -\frac{-4}{-1} = -4$$

e moltiplichiamo la seconda equazione per l_{42} ottenendo:

$$4x_2 + 8x_3 - 4x_4 = 8.$$

La nuova quarta equazione sarà la somma tra la quarta equazione e la seconda appena modificata:

$$\begin{array}{rrcr} -4x_2 & +6x_3 & -3x_4 & = 1 \\ 4x_2 & +8x_3 & -4x_4 & = 8 \\ \hline & 14x_3 & -7x_4 & = 9 \quad [\text{Nuova quarta equazione}]. \end{array}$$

Al terzo passo il sistema lineare è diventato:

$$\begin{array}{rrrrr} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & & = -1 \\ & -x_2 & -2x_3 & +x_4 & = -2 \\ & & 7x_3 & -5x_4 & = 8 \\ & & 14x_3 & -7x_4 & = 9. \end{array}$$

La matrice dei coefficienti e il vettore dei termini noti sono quindi

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 7 & -5 \\ 0 & 0 & 14 & -7 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(3)} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \\ 8 \\ 9 \end{bmatrix}.$$

Resta da azzerare l'unico elemento sottodiagonali della terza colonna. Lasciamo inalterate le prime tre equazioni del sistema. Poniamo

$$l_{43} = -\frac{a_{43}^{(3)}}{a_{33}^{(3)}} = -\frac{14}{7} = -2$$

e moltiplichiamo la terza equazione per l_{43} ottenendo:

$$-14x_3 + 10x_4 = -16.$$

La nuova quarta equazione sarà la somma tra la quarta equazione e la terza appena modificata:

$$\begin{array}{rrcr} 14x_3 & -7x_4 & = -16 \\ -14x_3 & +10x_4 & = 9 \\ \hline & 3x_4 & = -7 \quad [\text{Nuova quarta equazione}]. \end{array}$$

Abbiamo ottenuto un sistema triangolare superiore:

$$\begin{array}{rrrrrcl} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & & & = & -1 \\ & -x_2 & -2x_3 & +x_4 & & = & -2 \\ & & 7x_3 & -5x_4 & & = & 8 \\ & & & 3x_4 & & = & -7. \end{array}$$

La matrice dei coefficienti e il vettore dei termini noti sono diventati:

$$A^{(4)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 7 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(4)} = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \\ 8 \\ -7 \end{bmatrix}.$$

Cerchiamo ora di ricavare le formule di trasformazione del metodo di eliminazione di Gauss per rendere un generico sistema di ordine n in forma triangolare superiore.

Consideriamo il sistema di equazioni nella sua forma scalare (3.2):

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.8)$$

Poichè il procedimento richiede un certo numero di passi indichiamo con $a_{ij}^{(1)}$ e $b_i^{(1)}$ gli elementi della matrice dei coefficienti e del vettore dei termini noti del sistema di partenza. Isoliamo in ogni equazione la componente x_1 . Abbiamo:

$$a_{11}^{(1)}x_1 + \sum_{j=2}^n a_{1j}^{(1)}x_j = b_1^{(1)} \quad (3.9)$$

$$a_{i1}^{(1)}x_1 + \sum_{j=2}^n a_{ij}^{(1)}x_j = b_i^{(1)}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (3.10)$$

Moltiplicando l'equazione (3.9) per $-a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}, i = 2, \dots, n$, si ottengono le seguenti $n - 1$ equazioni:

$$-a_{i1}^{(1)}x_1 + \sum_{j=2}^n \left(-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}a_{1j}^{(1)} \right) x_j = -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}b_1^{(1)}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (3.11)$$

Sommando alle equazioni (3.10) le (3.11) si ricavano $n - 1$ nuove equazioni:

$$\sum_{j=2}^n \left(a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)} \right) x_j = b_i^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} b_1^{(1)}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (3.12)$$

L'equazione (3.9) insieme alle (3.12) formano un nuovo sistema di equazioni, equivalente a quello originario, che possiamo scrivere nel seguente modo:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + \sum_{j=2}^n a_{1j}^{(1)} x_j = b_1^{(1)} \\ \sum_{j=2}^n a_{ij}^{(2)} x_j = b_i^{(2)} \quad i = 2, \dots, n \end{cases} \quad (3.13)$$

dove

$$\begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)} & i, j = 2, \dots, n \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} b_1^{(1)} & i = 2, \dots, n. \end{cases} \quad (3.14)$$

Osserviamo che la matrice dei coefficienti del sistema (3.13) è la seguente

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}.$$

Ora a partire dal sistema di equazioni

$$\sum_{j=2}^n a_{ij}^{(2)} x_j = b_i^{(2)} \quad i = 2, \dots, n,$$

ripetiamo i passi fatti precedentemente:

$$a_{22}^{(2)} x_2 + \sum_{j=3}^n a_{2j}^{(2)} x_j = b_2^{(2)} \quad (3.15)$$

$$a_{i2}^{(2)}x_2 + \sum_{j=3}^n a_{ij}^{(2)}x_j = b_i^{(2)}, \quad i = 3, \dots, n. \quad (3.16)$$

Moltiplicando l'equazione (3.15) per $-a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$, per $i = 3, \dots, n$, si ottiene

$$a_{i2}^{(2)}x_2 + \sum_{j=3}^n \left(-\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} a_{2j}^{(2)} \right) x_j = -\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} b_2^{(2)}, \quad i = 3, \dots, n. \quad (3.17)$$

Sommando le equazioni (3.17) alle (3.16) si ottengono $n - 2$ nuove equazioni:

$$\sum_{j=3}^n \left(a_{ij}^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} a_{2j}^{(2)} \right) x_j = b_i^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} b_2^{(2)}, \quad i = 3, \dots, n \quad (3.18)$$

che possiamo scrivere in forma più compatta:

$$\sum_{j=3}^n a_{ij}^{(3)} x_j = b_i^{(3)} \quad i = 3, \dots, n$$

dove

$$\begin{cases} a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} a_{2j}^{(2)} & i, j = 3, \dots, n \\ b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} b_2^{(2)} & i = 3, \dots, n. \end{cases}$$

Abbiamo il nuovo sistema equivalente:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{1j}^{(1)} x_j = b_1^{(1)} \\ \sum_{j=2}^n a_{2j}^{(2)} x_j = b_2^{(2)} \\ \sum_{j=3}^n a_{ij}^{(3)} x_j = b_i^{(3)} & i = 3, \dots, n. \end{cases}$$

Osserviamo che in questo caso la matrice dei coefficienti è

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \dots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \dots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix}.$$

È evidente ora che dopo $n - 1$ passi di questo tipo arriveremo ad un sistema equivalente a quello di partenza avente la forma:

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & a_{n-1, n-1}^{(n-1)} & a_{n-1, n}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_{n-1}^{(n-1)} \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

la cui soluzione, come abbiamo visto, si ottiene facilmente, e dove le formule di trasformazione al passo k sono:

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} a_{kj}^{(k)} \quad i, j = k + 1, \dots, n \quad (3.19)$$

e

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} b_k^{(k)} \quad i = k + 1, \dots, n. \quad (3.20)$$

Soffermiamoci ora un momento sul primo passo del procedimento. Osserviamo che per ottenere il 1° sistema equivalente abbiamo operato le seguenti fasi:

1. moltiplicazione della prima riga della matrice dei coefficienti (e del corrispondente elemento del termine noto) per un opportuno scalare;
2. sottrazione dalla riga i -esima di A della prima riga modificata dopo il passo 1.

Il valore di k varia da 1 (matrice dei coefficienti e vettore dei termini noti iniziali) fino a $n - 1$, infatti la matrice $A^{(n)}$ avrà gli elementi sottodisegnali

delle prime $n - 1$ colonne uguali a zero.

Si può osservare che il metodo di eliminazione di Gauss ha successo se tutti gli elementi $a_{kk}^{(k)}$ sono diversi da zero, che sono detti **elementi pivotali**.

Una proprietà importante delle matrici $A^{(k)}$ è il fatto che le operazioni effettuate non alterano il determinante della matrice, quindi

$$\det A^{(k)} = \det A,$$

per ogni k . Poichè la matrice $A^{(n)}$ è triangolare superiore allora il suo determinante può essere calcolato esplicitamente

$$\det A^{(n)} = \prod_{k=1}^n a_{kk}^{(k)}.$$

Quello appena descritto è un modo, alternativo alla regola di Laplace per calcolare il determinante della matrice A .

Esempio 3.3.1 *Calcolare il determinante della matrice*

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 & 0 \\ 3 & 2 & 6 & -1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 1 & 3 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

utilizzando il metodo di eliminazione di Gauss.

Posto $A^{(1)} = A$, calcoliamo i tre moltiplicatori

$$l_{2,1} = -1, \quad l_{3,1} = 0, \quad l_{4,1} = -\frac{1}{3}.$$

Calcoliamo la seconda riga:

$$\begin{array}{rrrrrr} [2^a \text{ riga di } A^{(1)} +] & 3 & 2 & 6 & -1 & + \\ [(-1) \times 1^a \text{ riga di } A^{(1)}] & -3 & -3 & -5 & 0 & = \\ \hline [2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -1 & 1 & -1 & \end{array}$$

La terza riga non cambia perchè il moltiplicatore è nullo, mentre la quarta riga è

$$\begin{array}{rrrrrr} [4^a \text{ riga di } A^{(1)} +] & 1 & 3 & 0 & 4 & + \\ [(-1/3) \times 1^a \text{ riga di } A^{(1)}] & -1 & -1 & -5/3 & 0 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & 2 & -5/3 & 4 & \end{array}$$

Abbiamo ottenuto la seguente matrice al passo 2:

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 \\ 0 & 2 & -5/3 & 4 \end{bmatrix}.$$

Calcoliamo i due moltiplicatori

$$l_{3,2} = 2, \quad l_{4,2} = 2.$$

Calcoliamo la terza riga:

$$\begin{array}{rrrrrr} [3^a \text{ riga di } A^{(2)} +] & 0 & 2 & 0 & 4 & + \\ [(2) \times 2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -2 & 2 & -2 & = \\ \hline [3^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & 2 & 2 & \end{array}$$

La quarta riga è

$$\begin{array}{rrrrrr} [4^a \text{ riga di } A^{(2)} +] & 0 & 2 & -5/3 & 4 & + \\ [(2) \times 2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -2 & 2 & -2 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & 1/3 & 2 & \end{array}$$

Abbiamo ottenuto la seguente matrice al passo 3:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1/3 & 2 \end{bmatrix}.$$

Calcoliamo l'unico moltiplicatore del terzo passo:

$$l_{4,3} = -\frac{1}{6}.$$

La quarta riga è

$$\begin{array}{rrrrrr} [4^a \text{ riga di } A^{(3)} +] & 0 & 0 & 1/3 & 2 & + \\ [(-1/6) \times 3^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & -1/3 & -1/3 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(4)}] & 0 & 0 & 0 & 5/3 & \end{array}$$

La matrice triagolarizzata è

$$A^{(4)} = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 5 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 5/3 \end{bmatrix}.$$

Il determinante della matrice è uguale al prodotto degli elementi diagonali della matrice triangolare, ovvero

$$\det A = -10.$$

Esempio 3.3.2 *Calcolare l'inversa della matrice*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

utilizzando il metodo di eliminazione di Gauss.

L'inversa di A è la matrice X tale che

$$AX = I$$

ovvero, detta $\mathbf{x}_i$ la i -esima colonna di X , questo è soluzione del sistema lineare

$$A\mathbf{x}_i = \mathbf{e}_i \quad (3.21)$$

dove $\mathbf{e}_i$ è l' i -esimo versore della base canonica di $\mathbb{R}^n$. Posto $i = 1$ risolvendo il sistema

$$A\mathbf{x}_1 = \mathbf{e}_1, \quad \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

si ottengono gli elementi della prima colonna di A^{-1} . Posto $A^{(1)} = A$ gli elementi della matrice al passo 2 sono calcolati applicando le formule

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{1j}^{(1)}, \quad i, j = 2, 3, 4.$$

Tralasciando il dettaglio delle operazioni risulta

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2 & 2 & -1/2 \\ 0 & 1/2 & 3 & 3/2 \\ 0 & 1/2 & 2 & 3/2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_1^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}$$

Applicando le formula

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} a_{2j}^{(2)}, \quad i, j = 3, 4.$$

si ottiene il sistema al terzo passo

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2 & 2 & -1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_1^{(3)} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1/2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

In questo caso non è necessario applicare l'ultimo passo del metodo in quanto la matrice è già triangolare superiore e pertanto si può risolvere il sistema triangolare superiore ottenendo:

$$x_4 = 0, \quad x_3 = 1, \quad x_2 = -5, \quad x_1 = 3.$$

Cambiando i termini noti del sistema (3.21), ponendo $i = 2, 3, 4$ si ottengono le altre tre colonne della matrice inversa.

3.3.1 Costo Computazionale del Metodo di Eliminazione di Gauss

Cerchiamo ora di determinare il costo computazionale (cioè il numero di operazioni aritmetiche) richiesto dal metodo di eliminazione di Gauss per risolvere un sistema lineare di ordine n . Il calcolo del costo computazionale richiede quattro fasi:

1. Numero di operazioni aritmetiche necessarie per modificare un singolo elemento della matrice dei coefficienti e del vettore dei termini noti;
2. Numero di operazioni aritmetiche necessarie per calcolare la matrice $A^{(k+1)}$ ed il vettore $\mathbf{b}^{(k+1)}$ partendo da $A^{(k)}$ e $\mathbf{b}^{(k)}$, con k valore generico;

3. Numero di operazioni aritmetiche richieste per effettuare tutti gli $n - 1$ passi del metodo;
4. Numero di operazioni aritmetiche richieste dalla risoluzione del sistema triangolare superiore.

Di tali fasi solo per l'ultima sappiamo che esso è pari a n^2 .

Per la prima fase dalle relazioni

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} b_k^{(k)}, \quad i = k + 1, \dots, n,$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} a_{kj}^{(k)}, \quad i, j = k + 1, \dots, n$$

è evidente che servono 3 operazioni aritmetiche per calcolare $b_i^{(k+1)}$ (noti $a_{ij}^{(k)}$ e $b_i^{(k)}$) mentre sono necessarie solo 2 operazioni per calcolare $a_{ij}^{(k+1)}$ (noti $a_{ij}^{(k)}$ e $a_{ik}^{(k)}$), infatti il moltiplicatore viene calcolato solo una volta.

Per determinare il numero richiesto dalla seconda fase esso è pari a:

$3 \times$ elementi del vettore calcolati $+ 2 \times$ elementi della matrice calcolati.

Il numero di elementi del vettore dei termini noti che vengono modificati è pari ad $n - k$ mentre gli elementi della matrice cambiati sono $(n - k)^2$ quindi complessivamente il numero di operazioni per calcolare gli elementi al passo $k + 1$ è:

$$2(n - k)^2 + 3(n - k). \quad (3.22)$$

Osserviamo che nel computo del numero di elementi della matrice che vengono calcolati non si tiene conto degli elementi che sono stati azzerati, in quanto è noto che sono uguali a zero e non c'è alcuna necessità di calcolarli. Per trasformare A in $A^{(n)}$ e $\mathbf{b}$ in $\mathbf{b}^{(n)}$ è necessario un numero di operazioni pari alla somma, rispetto a k , di (3.22), ovvero

$$f(n) = 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n - k)^2 + 3 \sum_{k=1}^{n-1} (n - k).$$

Sapendo che

$$\sum_{k=1}^n n^2 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

ed effettuando un opportuno cambio di indice nelle sommatorie risulta

$$f(n) = 2 \left[\frac{n(n-1)(2n-1)}{6} \right] + 3 \frac{n(n-1)}{2} = \frac{2}{3}n^3 + \frac{n^2}{2} - \frac{7}{6}n.$$

Nel calcolo del costo computazionale di un algoritmo si tende a considerare solo la componente più grande tralasciando quelle che contribuiscono meno a tale valore, pertanto si ha

$$f(n) \simeq \frac{2}{3}n^3.$$

A questo valore bisognerebbe aggiungere le n^2 operazioni aritmetiche necessarie per risolvere il sistema triangolare superiore ma tale valore non altera l'ordine di grandezza della funzione che è un valore molto inferiore rispetto alle $n!$ operazioni richieste dalla regola di Cramer, applicata insieme alla regola di Laplace.

Nel calcolo delle operazioni aritmetiche sono state considerate tutte le 4 operazioni aritmetiche, ipotizzando implicitamente che esse richiedano lo stesso tempo di esecuzione da parte dall'elaboratore (ottenendo una stima del tempo di risoluzione richiesto dal metodo). Nella realtà non è così in quanto le somme algebriche richiedono un tempo inferiore rispetto al prodotto ed al quoziente e pertanto il numero di tali operazioni andrebbe contato a parte. Facendo questo tipo di calcolo si scoprirebbe che il numero di moltiplicazioni/divisioni richiesto dal metodo è circa la metà di quello trovato:

$$f_1(n) \simeq \frac{n^3}{3}.$$

3.3.2 Strategie di Pivoting per il metodo di Gauss

Nell'eseguire il metodo di Gauss si è fatta l'implicita ipotesi (vedi formule (3.19) e (3.20)) che gli elementi pivotali $a_{kk}^{(k)}$ siano non nulli per ogni k . Tale situazione si verifica quando i minori principali di testa di A sono diversi da zero. Infatti vale il seguente risultato.

Teorema 3.3.1 *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, indicata con A_k la sottomatrice principale di testa² di ordine k , risulta*

$$a_{kk}^{(k)} = \frac{\det A_k}{\det A_{k-1}}, \quad k = 1, \dots, n$$

²La sottomatrice principale di testa di ordine k si ottiene da A prendendo i primi k elementi delle prime k righe della matrice.

avendo posto per convenzione $\det A_0 = 1$.

In pratica questa non è un'ipotesi limitante in quanto la non singolarità di A permette, con un opportuno scambio di righe in $A^{(k)}$, di ricondursi a questo caso. Infatti scambiare due righe in $A^{(k)}$ significa sostanzialmente scambiare due equazioni nel sistema $A^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$ e ciò non altera la natura del sistema stesso.

Consideriamo la matrice $A^{(k)}$ e supponiamo $a_{kk}^{(k)} = 0$. In questo caso possiamo scegliere un elemento sottodiagonale appartenente alla k -esima colonna diverso da zero, supponiamo $a_{ik}^{(k)}$, scambiare le equazioni di indice i e k e continuare il procedimento perchè in questo modo l'elemento pivotale è diverso da zero. In ipotesi di non singolarità della matrice A possiamo dimostrare che tale elemento diverso da zero esiste sicuramente. Infatti supponendo che, oltre all'elemento pivotale, siano nulli tutti gli $a_{ik}^{(k)}$ per $i = k+1, \dots, n$, allora $A^{(k)}$ ha la seguente struttura:

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(1)} & a_{1k}^{(1)} & a_{1,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{k-1,k-1}^{(k-1)} & a_{k-1,k}^{(k-1)} & a_{k-1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k-1)} \\ & & & 0 & a_{k,k+1}^{(k)} & & a_{kn}^{(k)} \\ & 0 & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & 0 & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

Se partizioniamo $A^{(k)}$ nel seguente modo

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$$

con $A_{11}^{(k)} \in \mathbb{R}^{(k-1) \times (k-1)}$ allora il determinante di $A^{(k)}$ è

$$\det A^{(k)} = \det A_{11}^{(k)} \det A_{22}^{(k)} = 0$$

perchè la matrice $A_{22}^{(k)}$ ha una colonna nulla. Poichè tutte le matrici $A^{(k)}$ hanno lo stesso determinante di A , dovrebbe essere $\det A = 0$ e questo contrasta con l'ipotesi fatta. Possiamo concludere che se $a_{kk}^{(k)} = 0$ e $\det A \neq 0$ deve necessariamente esistere un elemento $a_{ik}^{(k)} \neq 0$, con $i \in \{k+1, k+2, \dots, n\}$. Per evitare che un elemento pivotale possa essere uguale a zero si applica

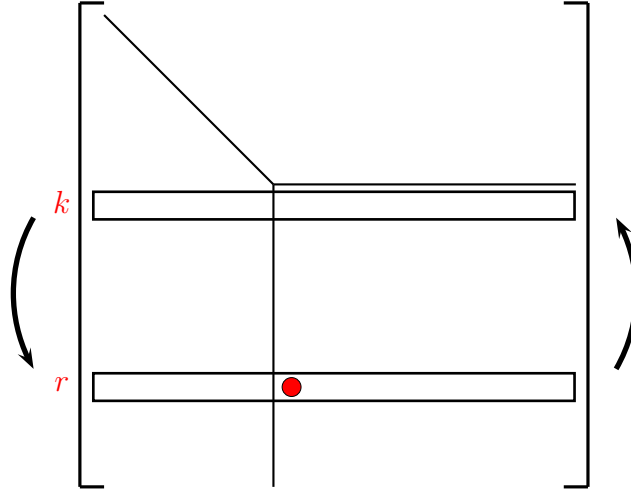


Figura 3.1: Strategia di pivoting parziale.

una delle cosiddette strategie di pivoting. La strategia di **Pivoting parziale** prevede che al k -esimo passo si ricerchi l'elemento di massimo modulo tra gli elementi $a_{kk}^{(k)}, a_{k+1,k}^{(k)}, \dots, a_{nk}^{(k)}$ e si scambi l'equazione in cui si trova questo elemento con la k -esima qualora esso sia diverso da $a_{kk}^{(k)}$. In altri termini il pivoting parziale richiede le seguenti operazioni:

1. determinare l'elemento $a_{rk}^{(k)}$ tale che

$$|a_{rk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|;$$

2. effettuare lo scambio tra le equazioni del sistema di indice r e k .

In alternativa si può adottare la strategia di **pivoting totale** che è la seguente:

1. determinare gli indici r, s tali che

$$|a_{rs}^{(k)}| = \max_{\substack{k \leq i \leq n \\ k \leq j \leq n}} |a_{ij}^{(k)}|;$$

2. effettuare lo scambio tra le equazioni del sistema di indice r e k .

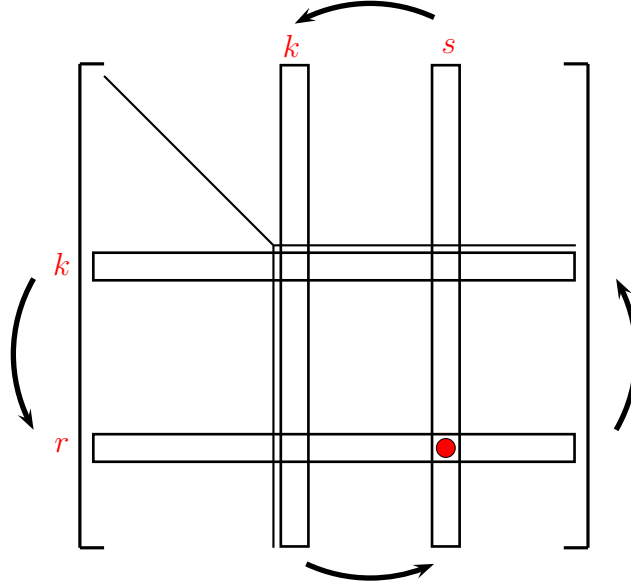


Figura 3.2: strategia di pivoting totale.

3. effettuare lo scambio tra le colonne di indice s e k della matrice dei coefficienti.

La strategia di pivoting totale è senz'altro migliore perchè garantisce maggiormente che un elemento pivotale non sia un numero piccolo (in questa eventualità potrebbe accadere che un moltiplicatore sia un numero molto grande) ma richiede che tutti gli eventuali scambi tra le colonne della matrice siano memorizzati. Infatti scambiare due colonne significa scambiare due incognite del vettore soluzione pertanto dopo la risoluzione del sistema triangolare per ottenere il vettore soluzione del sistema di partenza è opportuno permutare le componenti che sono state scambiate.

Esempio 3.3.3 Risolvere il sistema lineare $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ dove

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & -1 & 1 \\ 3 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix}$$

utilizzando il metodo di eliminazione di Gauss con strategia di pivoting parziale.

Posto $A^{(1)} = A$, osserviamo che l'elemento pivotale della prima colonna si trova sulla terza riga allora scambiamo le equazioni 1 e 3:

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 & 0 \\ 1 & -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(1)} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

calcoliamo i tre moltiplicatori

$$l_{2,1} = -\frac{2}{3}, \quad l_{3,1} = -\frac{1}{3}, \quad l_{4,1} = -\frac{1}{3}.$$

Calcoliamo la seconda riga:

$$\begin{array}{rrrrrrr} [2^a \text{ riga di } A^{(1)} +] & 2 & -1 & -1 & 1 & 1 & + \\ [(-2/3) \times 1^a \text{ riga di } A^{(1)}] & -2 & 0 & 2/3 & -2/3 & -8/3 & = \\ \hline [2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -1 & -1/3 & 1/3 & -5/3 & \end{array}$$

La terza riga è la seguente:

$$\begin{array}{rrrrrrr} [3^a \text{ riga di } A^{(1)} +] & 1 & 2 & -1 & 0 & 2 & + \\ [(-1/3) \times 1^a \text{ riga di } A^{(1)}] & -1 & 0 & 1/3 & -1/3 & -4/3 & = \\ \hline [3^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & 2 & -2/3 & -1/3 & 2/3 & \end{array}$$

mentre la quarta riga è

$$\begin{array}{rrrrrrr} [4^a \text{ riga di } A^{(1)} +] & 1 & -3 & 1 & 1 & 2 & + \\ [(-1/3) \times 1^a \text{ riga di } A^{(1)}] & -1 & 0 & 1/3 & -1/3 & -4/3 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -3 & 4/3 & 2/3 & 2/3 & \end{array}$$

Abbiamo ottenuto la matrice ed il vettore al passo 2:

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & -1/3 & 1/3 \\ 0 & 2 & -2/3 & -1/3 \\ 0 & -3 & 4/3 & 2/3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} 4 \\ -5/3 \\ 2/3 \\ 2/3 \end{bmatrix}.$$

L'elemento pivotale della seconda colonna si trova sulla quarta riga quindi scambiamo le equazioni 2 e 4:

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -3 & 4/3 & 2/3 \\ 0 & 2 & -2/3 & -1/3 \\ 0 & -1 & -1/3 & 1/3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2/3 \\ 2/3 \\ -5/3 \end{bmatrix}.$$

Calcoliamo i due moltiplicatori

$$l_{3,2} = \frac{2}{3}, \quad l_{4,2} = -\frac{1}{3}.$$

La terza riga è la seguente:

$$\begin{array}{rcccccc} [3^a \text{ riga di } A^{(2)} +] & 0 & 2 & -2/3 & -1/3 & 2/3 & + \\ [(2/3) \times 2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & -2 & 8/9 & 4/9 & 4/9 & = \\ \hline [3^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & 2/9 & 1/9 & 10/9 & \end{array}$$

mentre la quarta riga è

$$\begin{array}{rcccccc} [4^a \text{ riga di } A^{(2)} +] & 0 & -1 & -1/3 & 1/3 & -5/3 & + \\ [(-1/3) \times 2^a \text{ riga di } A^{(2)}] & 0 & 1 & -4/9 & -2/9 & -2/9 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & -7/9 & 1/9 & -17/9 & \end{array}$$

Abbiamo ottenuto la matrice ed il vettore al passo 3:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -3 & 4/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & 2/9 & 1/9 \\ 0 & 0 & -7/9 & 1/9 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(3)} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2/3 \\ 10/9 \\ -17/9 \end{bmatrix}.$$

L'elemento pivotale della terza colonna si trova sulla quarta riga quindi scambiamo le equazioni 3 e 4:

$$A^{(3)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -3 & 4/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & -7/9 & 1/9 \\ 0 & 0 & 2/9 & 1/9 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(3)} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2/3 \\ -17/9 \\ 10/9 \end{bmatrix}.$$

Calcoliamo l'unico moltiplicatore del terzo passo:

$$l_{4,3} = \frac{2}{7}.$$

La quarta riga è

$$\begin{array}{rcccccc} [4^a \text{ riga di } A^{(3)} +] & 0 & 0 & 2/9 & 1/9 & 10/9 & + \\ [(2/7) \times 3^a \text{ riga di } A^{(3)}] & 0 & 0 & -2/9 & 2/63 & -34/63 & = \\ \hline [4^a \text{ riga di } A^{(4)}] & 0 & 0 & 0 & 1/7 & 4/7 & \end{array}$$

Il sistema triangolare superiore equivalente a quello iniziale ha come matrice dei coefficienti e come termine noto:

$$A^{(4)} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & -3 & 4/3 & 2/3 \\ 0 & 0 & -7/9 & 1/9 \\ 0 & 0 & 0 & 1/7 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(4)} = \begin{bmatrix} 4 \\ 2/3 \\ -17/9 \\ 4/7 \end{bmatrix}.$$

Risolvendo tale sistema triangolare superiore si ricava il vettore:

$$x_4 = 4, \quad x_3 = 3, \quad x_2 = 2, \quad x_1 = 1.$$

3.4 La Fattorizzazione LU

Introduzione

Supponiamo di dover risolvere un problema che richieda, ad un determinato passo, la risoluzione del sistema lineare $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ e di utilizzare il metodo di Gauss. La matrice viene resa triangolare superiore e viene risolto il sistema triangolare

$$A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}. \quad (3.23)$$

Ipotizziamo che, nell'ambito dello stesso problema, dopo un certo tempo sia necessario risolvere il sistema

$$A\mathbf{x} = \mathbf{c}$$

in cui la matrice dei coefficienti è la stessa mentre è cambiato il termine noto. Appare chiaro che non è possibile sfruttare i calcoli già fatti in quanto il calcolo del vettore dei termini noti al passo n dipende dalle matrici ai passi precedenti all'ultimo, quindi la conoscenza della matrice $A^{(n)}$ è del tutto inutile. È necessario pertanto applicare nuovamente il metodo di Gauss e risolvere il sistema triangolare

$$A^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{c}^{(n)}. \quad (3.24)$$

L'algoritmo che sarà descritto in questo paragrafo consentirà di evitare l'eventualità di dover rifare tutti i calcoli (o una parte di questi).

Calcolo diretto della fattorizzazione LU

La **Fattorizzazione LU** di una matrice stabilisce, sotto determinate ipotesi, l'esistenza di una matrice L triangolare inferiore con elementi diagonali uguali a 1 e di una matrice triangolare superiore U tali che $A = LU$.

Una volta note tali matrici il sistema di partenza $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ viene scritto come

$$LU\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

e, posto $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$, il vettore $\mathbf{x}$ viene trovato prima risolvendo il sistema triangolare inferiore

$$L\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

e poi quello triangolare superiore

$$U\mathbf{x} = \mathbf{y}.$$

Vediamo ora di determinare le formule esplicite per gli elementi delle due matrici. Fissata la matrice A , quadrata di ordine n , imponiamo quindi che risulti

$$A = LU,$$

ovvero

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \dots & a_{ij} & \dots & a_{in} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nj} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & & \vdots \\ l_{i1} & \dots & l_{i,i-1} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \dots & l_{n,i-1} & l_{n,i} & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & \dots & \dots & u_{1j} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2j} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & u_{jj} & \dots & u_{jn} \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & u_{nn} \end{bmatrix}.$$

Deve essere

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj} \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (3.25)$$

Considerando prima il caso $i \leq j$, uguagliando quindi la parte triangolare superiore delle matrici abbiamo

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^i l_{ik} u_{kj} \quad j \geq i \quad (3.26)$$

ovvero

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ii} u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij} \quad j \geq i$$

infine risulta

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \quad j \geq i \quad (3.27)$$

e ovviamente $u_{1j} = a_{1j}$, per $j = 1, \dots, n$. Considerando ora il caso $j < i$, uguagliando cioè le parti strettamente triangolari inferiori delle matrici risulta:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^j l_{ik} u_{kj} \quad i > j \quad (3.28)$$

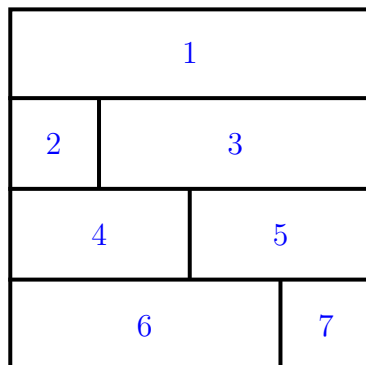
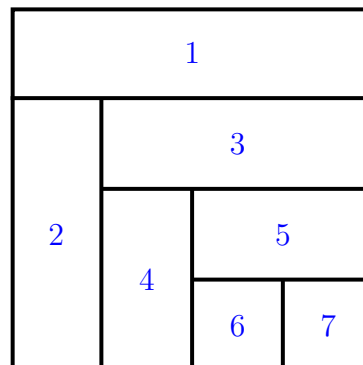
ovvero

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij} u_{jj} \quad i > j$$

da cui

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right) \quad i > j. \quad (3.29)$$

Si osservi che le formule (3.27) e (3.29) vanno implementate secondo uno degli schemi riportati nella seguente figura.

**Tecnica di Crout****Tecnica di Doolittle**

Ogni schema rappresenta in modo schematico una matrice la cui parte triangolare superiore indica la matrice U mentre quella triangolare inferiore la matrice L mentre i numeri indicano l'ordine con cui gli elementi saranno calcolati. Per esempio applicando la tecnica di Crout si segue il seguente ordine:

- 1° Passo: Calcolo della prima riga di U ;
- 2° Passo: Calcolo della seconda riga di L ;
- 3° Passo: Calcolo della seconda riga di U ;
- 4° Passo: Calcolo della terza riga di L ;
- 5° Passo: Calcolo della terza riga di U ;
- 6° Passo: Calcolo della quarta riga di L ;
- 7° Passo: Calcolo della quarta riga di U ;

e così via procedendo per righe in modo alternato. Nel caso della tecnica di Doolittle si seguono i seguenti passi:

- 1° Passo: Calcolo della prima riga di U ;
- 2° Passo: Calcolo della prima colonna di L ;
- 3° Passo: Calcolo della seconda riga di U ;

- 4° Passo: Calcolo della seconda colonna di L ;
- 5° Passo: Calcolo della terza riga di U ;
- 6° Passo: Calcolo della terza colonna di L ;
- 7° Passo: Calcolo della quarta riga di U .

La fattorizzazione LU è un metodo sostanzialmente equivalente al metodo di Gauss, infatti la matrice U che viene calcolata coincide con la matrice $A^{(n)}$. Lo svantaggio del metodo di fattorizzazione diretto risiede essenzialmente nella maggiore difficoltà, rispetto al metodo di Gauss, di poter programmare una strategia di pivot. Infatti se un elemento diagonale della matrice U è uguale a zero non è possibile applicare l'algoritmo.

Equivalenza tra metodo di Gauss e fattorizzazione LU

In questo paragrafo esplicitiamo la relazione di equivalenza che lega il metodo di eliminazione di Gauss (senza alcuna strategia di pivoting) e la fattorizzazione LU .

Supponiamo di dover risolvere il sistema

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \Leftrightarrow \quad A^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$$

con $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e tale che tutti i suoi minori principali siano diversi da zero, e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Definiamo ora la seguente matrice $L^{(1)}$, quadrata di ordine n , detta **matrice elementare di Gauss**:

$$L^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & 0 \\ l_{31} & 0 & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{i1} \in \mathbb{R} \quad i = 2, \dots, n. \quad (3.30)$$

i cui elementi l_{i1} sono i moltiplicatori definiti al primo passo del metodo di Gauss. È facile verificare che

$$A^{(2)} = L^{(1)}A^{(1)}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = L^{(1)}\mathbf{b}^{(1)}$$

pertanto il sistema al secondo passo si ottiene moltiplicando (a sinistra) il sistema di partenza per la matrice (3.30). La matrice $L^{(1)}$ ha determinante

unitario pertanto le matrici $A^{(1)}$ e $A^{(2)}$ hanno lo stesso determinante (come abbiamo già osservato in precedenza). Si può verificare che ad un generico passo k , definita la k -esima matrice elementare di Gauss

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & l_{n,k} & & 1 \end{bmatrix},$$

in cui i numeri l_{ik} sono i moltiplicatori al passo k , si ottiene

$$A^{(k+1)} = L^{(k)} A^{(k)}, \quad \mathbf{b}^{(k+1)} = L^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}. \quad (3.31)$$

Arrivando all'ultimo passo si ottiene

$$A^{(n)} = L^{(n-1)} A^{(n-1)}, \quad \mathbf{b}^{(n)} = L^{(n-1)} \mathbf{b}^{(n-1)}$$

e, applicando ripetutamente la (3.31) è possibile mettere in relazione la matrice triangolare $A^{(n)}$ con la matrice dei coefficienti del sistema iniziale:

$$A^{(n)} = L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(2)} L^{(1)} A^{(1)} = L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(2)} L^{(1)} A. \quad (3.32)$$

A questo punto enunciamo, senza dimostrare, le seguenti proprietà:

- I proprietà: l'inversa di una matrice elementare di Gauss si ottiene cambiando il segno dei moltiplicatori:

$$(L^{(k)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -l_{k+1,k} & \ddots & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & 1 \end{bmatrix}.$$

- II proprietà: per ogni $k = 1, \dots, n-1$ risulta

$$(L^{(1)})^{-1} \dots (L^{(k)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & \ddots & & & \\ -l_{31} & \ddots & 1 & & \\ \vdots & & -l_{k+1,k} & 1 & \\ \vdots & & \vdots & & \ddots \\ -l_{n1} & \dots & -l_{n,k} & & 1 \end{bmatrix}.$$

La relazione (3.32) può essere riscritta come

$$(L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(2)} L^{(1)})^{-1} A^{(n)} = A$$

da cui, sfruttando la proprietà della matrice inversa di un prodotto di matrici

$$(L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1} A^{(n)} = A \quad (3.33)$$

Applicando la II proprietà si deduce che il prodotto delle inverse delle matrici elementari di Gauss è una matrice triangolare inferiore con elementi diagonali uguali a 1, pertanto ponendo

$$L = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1},$$

e

$$U = A^{(n)}$$

da (3.33) segue

$$A = LU.$$

3.5 Condizionamento di sistemi lineari

Nel Capitolo 1 è stato introdotto il concetto di rappresentazione in base ed è stata motivata la sostanziale inaffidabilità dei risultati dovuti ad elaborazioni numeriche, a causa dell'aritmetica finita dell'elaboratore. Appare chiaro come la bassa precisione nel calcolo potrebbe fornire dei risultati numerici molto lontani da quelli reali. In alcuni casi tale proprietà è insita nel problema. Consideriamo il sistema lineare

$$\begin{array}{rclcl} x & + & y & = & 2 \\ 1000x & + & 1001y & = & 2001 \end{array} \quad (3.34)$$

la cui soluzione è $x = y = 1$. Perturbiamo ora dell'1% il coefficiente di x nella prima equazione e consideriamo pertanto il seguente sistema

$$\begin{aligned} (1 + 0.01)x + y &= 2 \\ 1000x + 1001y &= 2001. \end{aligned}$$

Sarebbe naturale attendersi che la soluzione del sistema non sia molto lontana da quella del sistema (3.34), invece la soluzione è $\tilde{x} = -1/9$ e $\tilde{y} = 1901/900$, il che porta ad una differenza pari a

$$\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| = 1.57.$$

Se consideriamo inoltre il sistema

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{3.35}$$

dove $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è la cosiddetta **matrice di Hilbert**, i cui elementi sono

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i, j = 1, \dots, n$$

ovvero, se $n = 5$:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \end{bmatrix}$$

mentre il vettore $\mathbf{b}$ è scelto in modo tale che il vettore soluzione abbia tutte componenti uguali a 1, cosicchè si possa conoscere con esattezza l'errore commesso nel suo calcolo. Risolvendo il sistema di ordine 20 con il metodo di Gauss senza pivoting si osserva che la soluzione è, in realtà, molto lontana da quella teorica (l'errore relativo è pari circa a 23.5). Questa situazione peggiora prendendo matrici di dimensioni crescenti.

Definizione 3.5.1 *Un sistema lineare per cui a piccoli errori dei dati corrispondono grandi errori nella soluzione si definisce **mal condizionato** o **mal posto**.*

L'importanza dello studio del condizionamento dei problemi dipende dal fatto che bisogna ricordare che, a causa degli errori legati alla rappresentazione dei numeri reali, il sistema che l'elaboratore risolve non coincide con quello teorico, poichè alla matrice A ed al vettore $\mathbf{b}$ è necessario aggiungere la matrice δA ed il vettore $\delta \mathbf{b}$ (che contengono le perturbazioni legate a tali errori), e che la soluzione ovviamente non è la stessa, pertanto la indichiamo con $\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}$:

$$(A + \delta A)(\mathbf{x} + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta \mathbf{b}. \quad (3.36)$$

Si può dimostrare che l'ordine di grandezza della perturbazione sulla soluzione è

$$\frac{\|\delta \mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta \mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} \right).$$

Il numero $K(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$, detto **indice di condizionamento del sistema**, misura le amplificazioni degli errori sui dati del problema (ovvero la misura di quanto aumentano gli errori sulla soluzione). Il caso della matrice di Hilbert è appunto uno di quelli per cui l'indice di condizionamento assume valori molto grandi (di ordine esponenziale) all'aumentare della dimensione, si parla infatti di **matrici malcondizionate**. Quando ciò non accade si parla invece di **matrici bencondizionate**. Tra i metodi numerici che si possono applicare per la risoluzione di un problema un metodo risulta **più stabile** di un altro se è meno sensibile agli errori indotti dai calcoli. Lo studio della stabilità di un metodo numerico può perdere di significato quando il problema è fortemente mal condizionato, poichè in questo caso l'errore inerente (legato alla rappresentazione dei dati) prevale sull'errore algoritmico (introdotto nelle operazioni macchina).

Capitolo 4

Interpolazione di dati e Funzioni

4.1 Introduzione

Nel campo del Calcolo Numerico si possono incontrare diversi casi nei quali è richiesta l'approssimazione di una funzione (o di una grandezza incognita):

1) non è nota l'espressione analitica della funzione $f(x)$ ma si conosce il valore che assume in un insieme finito di punti $x_1, x_2, \dots, x_n$. Si potrebbe pensare anche che tali valori siano delle misure di una grandezza fisica incognita valutate in differenti istanti di tempo.

2) Si conosce l'espressione analitica della funzione $f(x)$ ma è così complicata dal punto di vista computazionale che è più conveniente cercare un'espressione semplice partendo dal valore che essa assume in un insieme finito di punti. In questo capitolo analizzeremo un particolare tipo di approssimazione di funzioni cioè la cosiddetta interpolazione che richiede che la funzione approssimante assume in determinate ascisse esattamente lo stesso valore di $f(x)$. In entrambi i casi appena citati è noto, date certe informazioni supplementari, che la funzione approssimante va ricercata della forma:

$$f(x) \simeq g(x; a_0, a_1, \dots, a_n). \quad (4.1)$$

Se i parametri $a_0, a_1, \dots, a_n$ sono definiti dalla condizione di coincidenza di f e g nei punti $x_0, x_1, \dots, x_n$, allora tale procedimento di approssimazione si chiama appunto **Interpolazione**. Invece se $x \notin [\min_i x_i, \max_i x_i]$ allora si parla di **Estrapolazione**. Un problema simile è invece quello in cui i valori

della funzione f che sono noti sono affetti da errore e quindi si cerca una funzione approssimante che passi vicino ai valori assegnati ma che non sia perfettamente coincidente con essi. Il problema in questo caso prende il nome di **Approssimazione**. Tra i procedimenti di interpolazione il più usato è quello in cui si cerca la funzione g in (4.1) nella forma

$$g(x; a_0, a_1, \dots, a_n) = \sum_{i=0}^n a_i \Phi_i(x)$$

dove $\Phi_i(x)$, per $i = 0, \dots, n$, sono funzioni fissate e i valori di a_i , $i = 0, \dots, n$, sono determinati in base alle condizioni di coincidenza di f con la funzione approssimante nei punti di interpolazione (detti anche **nod**i), x_j , cioè si pone

$$f(x_j) = \sum_{i=0}^n a_i \Phi_i(x_j) \quad j = 0, \dots, n. \quad (4.2)$$

Il processo di determinazione degli a_i attraverso la risoluzione del sistema (4.2) si chiama **metodo dei coefficienti indeterminati**. Il caso più studiato è quello dell'interpolazione polinomiale, in cui si pone:

$$\Phi_i(x) = x^i \quad i = 0, \dots, n$$

e perciò la funzione approssimante g assume la forma

$$\sum_{i=0}^n a_i x^i,$$

mentre le condizioni di coincidenza diventano

$$\begin{array}{cccccccl} a_0 & +a_1x_0 & +a_2x_0^2 & +\dots & +a_{n-1}x_0^{n-1} & +a_nx_0^n & = & f(x_0) \\ a_0 & +a_1x_1 & +a_2x_1^2 & +\dots & +a_{n-1}x_1^{n-1} & +a_nx_1^n & = & f(x_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & & & & \vdots \\ a_0 & +a_1x_n & +a_2x_n^2 & +\dots & +a_{n-1}x_n^{n-1} & +a_nx_n^n & = & f(x_n) \end{array} \quad (4.3)$$

Le equazioni (4.3) costituiscono un sistema di $n + 1$ equazioni nelle $n + 1$ incognite a_i , $i = 0, \dots, n$:

$$V\mathbf{a} = \mathbf{y}$$

dove la matrice dei coefficienti è

$$V = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^{n-1} & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} & x_n^n \end{bmatrix},$$

i vettori dei termini noti e delle incognite sono, rispettivamente,

$$\mathbf{y} = [f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)]^T$$

e $\mathbf{a} = [a_0, a_1, \dots, a_n]^T$.

Se i nodi x_j sono a due a due distinti allora la matrice dei coefficienti del sistema (4.3), detta **matrice di Vandermonde**, è non singolare e pertanto il problema dell'interpolazione ammette sempre un'unica soluzione. Il metodo dei coefficienti indeterminati consente di trovare la soluzione del problema solo risolvendo un sistema lineare che potrebbe avere grandi dimensioni, essere malcondizionato (soprattutto se due nodi sono molto vicini) e comunque non in grado di fornire un'espressione in forma chiusa del polinomio. Per questi motivi descriviamo un modo alternativo per risolvere il problema di interpolazione in grado di fornire l'espressione esplicita del polinomio cercato.

4.2 Il Polinomio Interpolante di Lagrange

Al fine di dare una forma esplicita al polinomio interpolante, scriviamo il candidato polinomio nella seguente forma:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n l_{nk}(x) f(x_k) \quad (4.4)$$

dove gli $l_{nk}(x)$ sono per il momento generici polinomi di grado n . Imponendo le condizioni di interpolazione

$$L_n(x_i) = f(x_i) \quad i = 0, \dots, n$$

deve essere, per ogni i :

$$L_n(x_i) = \sum_{k=0}^n l_{nk}(x_i) f(x_k) = f(x_i)$$

ed è evidente che se

$$l_{nk}(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{se } k \neq i \\ 1 & \text{se } k = i \end{cases} \quad (4.5)$$

allora esse sono soddisfatte. Infatti calcolando il polinomio (4.4) in un generico nodo x_i risulta

$$\begin{aligned} L_n(x_i) &= \sum_{k=0}^n l_{nk}(x_i) f(x_k) \\ &= \underbrace{\sum_{k=0}^{i-1} l_{nk}(x_i) f(x_k)}_{=0} + \underbrace{l_{ni}(x_i) f(x_i)}_{=1} + \underbrace{\sum_{k=i+1}^n l_{nk}(x_i) f(x_k)}_{=0} = f(x_i). \end{aligned}$$

Per determinare l'espressione del generico polinomio $l_{nk}(x)$ osserviamo che la prima condizione di (4.5) indica che esso si annulla negli n nodi

$$x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_{k+1}, \dots, x_n$$

pertanto deve essere

$$l_{nk}(x) = c_k \prod_{i=0, i \neq k}^n (x - x_i)$$

dove c_k è una costante da determinare, mentre imponendo la seconda condizione di (4.5)

$$l_{nk}(x_k) = c_k \prod_{i=0, i \neq k}^n (x_k - x_i) = 1$$

si trova immediatamente:

$$c_k = \frac{1}{\prod_{i=0, i \neq k}^n (x_k - x_i)}.$$

In definitiva il polinomio interpolante ha la seguente forma:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n \left(\prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \right) f(x_k). \quad (4.6)$$

Il polinomio (4.6) prende il nome di **Polinomio di Lagrange** mentre i polinomi:

$$l_{nk}(x) = \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}; \quad k = 0, 1, \dots, n$$

si chiamano **Polinomi Fondamentali di Lagrange**.

Esempio 4.2.1 Supponiamo di voler calcolare il polinomio interpolante di Lagrange passante per i punti $(-1, -1)$, $(0, 1)$, $(1, -1)$, $(3, 2)$ e $(5, 6)$. Il grado di tale polinomio è 4, quindi definiamo i nodi

$$x_0 = -1, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = 3, \quad x_4 = 5,$$

cui corrispondono le ordinate che indichiamo con y_i , $i = 0, \dots, 4$:

$$y_0 = -1, \quad y_1 = 1, \quad y_2 = -1, \quad y_3 = 2, \quad y_4 = 6.$$

Scriviamo ora l'espressione del polinomio $L_4(x)$:

$$L_4(x) = l_{4,0}(x)y_0 + l_{4,1}(x)y_1 + l_{4,2}(x)y_2 + l_{4,3}(x)y_3 + l_{4,4}(x)y_4 \quad (4.7)$$

e calcoliamo i 5 polinomi fondamentali di Lagrange:

$$\begin{aligned} l_{4,0}(x) &= \frac{(x-0)(x-1)(x-3)(x-5)}{(-1-0)(-1-1)(-1-3)(-1-5)} \\ &= \frac{1}{48} x(x-1)(x-3)(x-5) \\ l_{4,1}(x) &= \frac{(x+1)(x-1)(x-3)(x-5)}{(0+1)(0-1)(0-3)(0-5)} \\ &= -\frac{1}{15}(x+1)(x-1)(x-3)(x-5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
l_{4,2}(x) &= \frac{(x+1)(x-0)(x-3)(x-5)}{(1+1)(1-0)(1-3)(1-5)} \\
&= \frac{1}{16}x(x+1)(x-3)(x-5) \\
l_{4,3}(x) &= \frac{(x+1)(x-0)(x-1)(x-5)}{(3+1)(3-0)(3-1)(3-5)} \\
&= -\frac{1}{48}x(x+1)(x-1)(x-5) \\
l_{4,4}(x) &= \frac{(x+1)(x-0)(x-1)(x-3)}{(5+1)(5-0)(5-1)(5-3)} \\
&= \frac{1}{240}x(x+1)(x-1)(x-3)
\end{aligned}$$

Sostituendo in (4.7) il valore della funzione nei nodi si ottiene l'espressione finale del polinomio interpolante:

$$L_4(x) = -l_{4,0}(x) + l_{4,1}(x) - l_{4,2}(x) + 2l_{4,3}(x) + 6l_{4,4}(x).$$

Se vogliamo calcolare il valore approssimato della funzione $f(x)$ in un'ascissa diversa dai nodi, per esempio $x = 2$ allora dobbiamo calcolare il valore del polinomio interpolante $L_4(2)$.

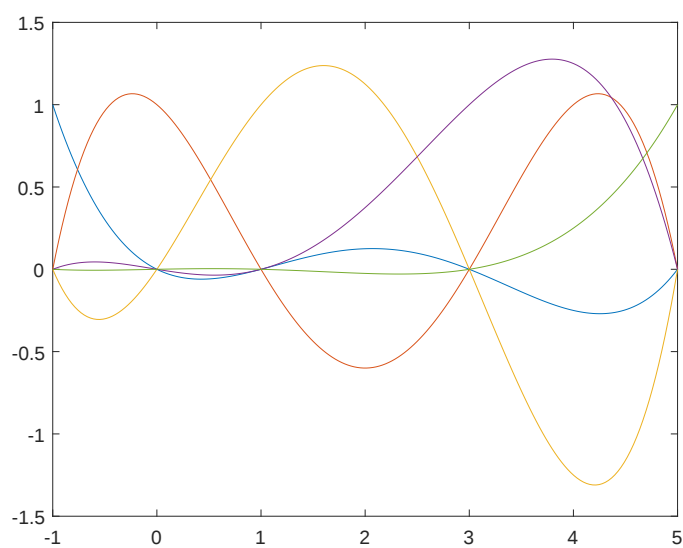
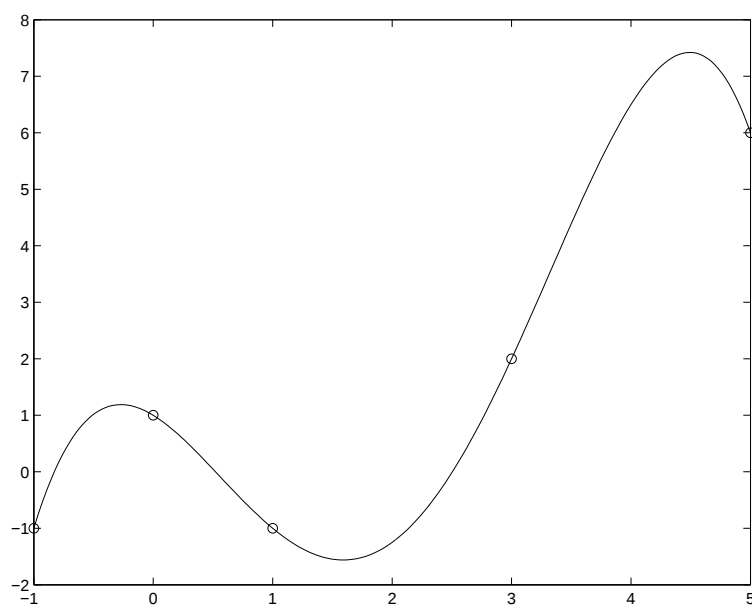
Nella figura 4.1 sono riportati i grafici dei cinque polinomi fondamentali di Lagrange $l_{4,k}(x)$, $k = 0, \dots, 4$. Nella figura 4.2 è tracciato il grafico del polinomio interpolante di Lagrange, i cerchi evidenziano ancora una volta i punti di interpolazione.

4.2.1 Errore nell'interpolazione polinomiale

Nei nodi x_i il polinomio interpolante assume, per definizione, i valori $f(x_i)$ e pertanto in tali punti l'errore è nullo, almeno se si prescinde dagli errori di arrotondamento. Lo studio dell'errore ha quindi senso per valori di $x \neq x_i$. Si chiama allora errore di interpolazione (o resto di interpolazione) la quantità

$$e(x) = f(x) - P_n(x),$$

e una sua stima è importante per un corretto utilizzo pratico del polinomio di interpolazione. Si intuisce, comunque, che una tale stima non è ottenibile con la sola conoscenza della funzione $f(x)$ nei nodi x_i ; ad esempio, per

Figura 4.1: Grafico dei polinomi $l_{4k}(x)$, $k = 0, \dots, 4$.Figura 4.2: Grafico del polinomio interpolante di Lagrange $L_4(x)$.

una funzione discontinua l'errore di troncamento può essere arbitrariamente grande. In effetti, la regolarità della funzione $f(x)$ può essere opportunamente utilizzata per fornire una rappresentazione dell'errore, dalla quale, almeno in teoria, è possibile ricavare una maggiorazione dell'errore e una indicazione sul suo comportamento al variare del numero e della collocazione dei nodi x_i . Importante in questo senso è il seguente risultato che ricordiamo senza dimostrazione, che è comunque una semplice conseguenza del Teorema di Rolle.

Teorema 4.2.1 (Rappresentazione dell'errore di interpolazione) *Sia $f(x)$ una funzione con $n + 1$ derivate continue in un intervallo $[a, b]$ contenente i punti x_i , $i = 0, 1, \dots, n + 1$. Se $P_n(x)$ è il polinomio di interpolazione della funzione $f(x)$ nei punti x_i , allora per ogni $x \in [a, b]$ esiste un punto $\xi = \xi(x) \in (a, b)$, tale che*

$$e(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

ovvero indicando con

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

il cosiddetto **polinomio nodale**, risulta

$$e(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x). \quad (4.8)$$

La formula (4.8) mette in evidenza il fatto importante che l'errore di interpolazione dipende sia dal comportamento della derivata di ordine $n + 1$ della funzione interpolata, sia dalla scelta, attraverso il polinomio nodale, dei nodi x_i e del punto di valutazione x del polinomio interpolante.

Illustreremo il risultato mediante un esempio.

Esempio 4.2.2 *Se $f(x)$ è una funzione derivabile con continuità due volte ed è approssimata per*

$$x_0 \leq x \leq x_1 = x_0 + h$$

mediante interpolazione lineare nei punti $(x_0, f(x_0))$ e $(x_1, f(x_1))$, dalla rappresentazione (4.8) si ha

$$|f(x) - L_1(x)| = \frac{f''(\xi)}{2!} (x - x_0)(x - x_1)$$

$$|f(x) - L_1(x)| = \frac{f''(x_0 + sh)}{2} h^2 s(s-1)$$

avendo posto $x = x_0 + sh$ con $0 \leq s \leq 1$. Tenendo conto che

$$\max_{0 \leq s \leq 1} |s(s-1)| = \frac{1}{4},$$

si ha quindi

$$|f(x) - L_1(x)| \leq \frac{h^2}{8} \max_{x_0 \leq x \leq x_0+h} |f''(x)|.$$

4.2.2 Convergenza del polinomio interpolante

La rappresentazione (4.8) pone le basi per lo studio di un'altra importante questione relativa all'errore di interpolazione. Dal punto di vista pratico, è essenziale poter ridurre tale errore inferiore ad una quantità prefissata, scegliendo convenientemente il numero e la posizione dei nodi x_i . Dal punto di vista matematico, questo significa studiare la convergenza del metodo di approssimazione. In maniera più precisa, il problema si pone nella seguente forma. Data una funzione $f(x)$ definita su un intervallo $[a, b]$, e sufficientemente regolare, consideriamo, per ogni n intero ($n \geq 1$), una suddivisione dell'intervallo $[a, b]$ mediante i punti

$$a \leq x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$$

e sia $L_n(x)$ il polinomio di interpolazione nei nodi $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$. Lo studio della convergenza riguarda allora l'analisi dell'errore $f(x) - L_n(x)$, per $x \in [a, b]$ e al tendere di n all'infinito (più precisamente, al tendere a zero dell'ampiezza degli intervallini della suddivisione). Contrariamente all'intuizione (supportata anche dal Teorema di Weierstrass), la risposta a tale questione non è sempre positiva; ossia, anche se la funzione $f(x)$ ammette derivate di ogni ordine su $[a, b]$, la successione $\{L_n(x)\}$ dei valori assunti dal polinomio di interpolazione di grado n in un punto $x \in [a, b]$ può non convergere a $f(x)$, per $n \rightarrow \infty$.

Un classico esempio che conferma tale fenomeno è l'interpolazione della funzione

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

nell'intervallo $[-5, 5]$ e prendendo i nodi equidistanti

$$x_i = -5 + \frac{10i}{n}, \quad i = 0, \dots, n$$

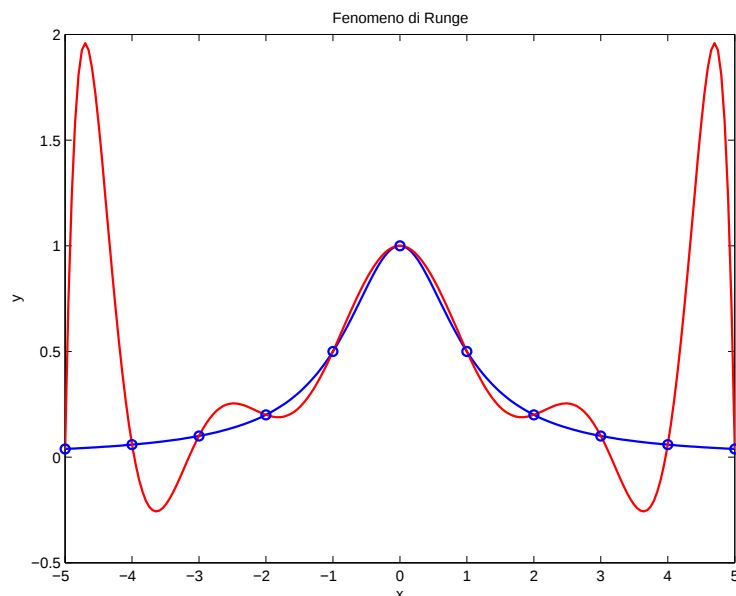


Figura 4.3: Il fenomeno di Runge.

Nella successiva figura viene appunto visualizzata la funzione (in blu) ed il relativo polinomio interpolante (in rosso) per $n = 10$.

Il polinomio interpolante presenta un errore piccolo nei punti vicini all'origine ma grande verso gli estremi dell'intervallo di interpolazione, che diventano ancora più evidenti all'aumentare di n . In effetti si può dimostrare che

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\max_{-5 \leq x \leq 5} |f(x) - L_n(x)| \right) = +\infty.$$

L'osservazione si deve ad un matematico tedesco del XIX secolo, e infatti è universalmente noto come **fenomeno di Runge**.

Per ovviare al fenomeno di Runge si possono utilizzare insiemi di nodi non equidistanti oppure utilizzare funzioni interpolanti polinomiali a tratti (interpolando di fatto su intervalli più piccoli e imponendo le condizioni di continuità fino ad un ordine opportuno).

4.3 Minimizzazione del Resto nel Problema di Interpolazione

Supponiamo che la funzione $f(x)$ sia approssimata su $[a, b]$ dal polinomio interpolante $L_n(x)$ e siano $x_0, x_1, \dots, x_n$ i nodi di interpolazione. Come già sappiamo se $x \in [a, b]$ risulta

$$e(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) \quad \xi_x \in [a, b]$$

e dove

$$\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i).$$

Si noti che variando i nodi x_i , $i = 0, \dots, n$, cambia il polinomio $\omega_{n+1}(x)$ e di conseguenza cambia l'errore. Ha senso allora porsi il seguente problema: indicato con $\mathcal{P}_{n+1}$ l'insieme di tutti i polinomi di grado al più $n+1$ cerchiamo il polinomio $\tilde{p} \in \mathcal{P}_{n+1}$ tale che:

$$\max_{x \in [a, b]} |\tilde{p}(x)| = \min_{p \in \mathcal{P}_{n+1}} \max_{x \in [a, b]} |p(x)|. \quad (4.9)$$

Per dare una risposta a questo problema è essenziale introdurre i **Polinomi di Chebyshev di 1^a Specie**.

4.3.1 Polinomi di Chebyshev

I polinomi di Chebyshev $T_n(x)$, $n \geq 0$, sono così definiti:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \quad (4.10)$$

per $x \in [-1, 1]$. Per esempio:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= \cos(0 \arccos x) = \cos 0 = 1 \\ T_1(x) &= \cos(1 \arccos x) = x \end{aligned}$$

e così via. È possibile ricavare una relazione di ricorrenza sui polinomi di Chebyshev che permette un più agevole calcolo. Infatti, posto

$$\arccos x = \theta \quad (\text{ovvero } x = \cos \theta)$$

risulta

$$T_n(x) = \cos n\theta(x).$$

Considerando le relazioni

$$T_{n+1}(x) = \cos(n+1)\theta = \cos n\theta \cos \theta - \sin n\theta \sin \theta$$

$$T_{n-1}(x) = \cos(n-1)\theta = \cos n\theta \cos \theta + \sin n\theta \sin \theta$$

e sommandole membro a membro,

$$T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) = 2 \cos \theta \cos n\theta = 2xT_n(x)$$

si ricava la seguente relazione di ricorrenza

$$T_{n+1}(x) = 2x T_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n \geq 1 \quad (4.11)$$

che, insieme all'espressione dei primi due polinomi,

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x$$

consente di calcolare tutti i polinomi di Chebyshev.

L'espressione dei primi polinomi è la seguente

$$T_2(x) = 2xT_1(x) - T_0(x) = 2x^2 - 1$$

$$T_3(x) = 2xT_2(x) - T_1(x) = 4x^3 - 3x$$

$$T_4(x) = 2xT_3(x) - T_2(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

$$T_5(x) = 2xT_4(x) - T_3(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$$

Le seguenti proprietà dei polinomi di Chebyshev sono di facile dimostrazione:

1. $\max_{x \in [-1,1]} |T_n(x)| = 1$
2. $T_{2k}(-x) = T_{2k}(x)$ ovvero i polinomi di grado pari sono funzioni pari, quindi tutti i coefficienti delle potenze dispari di x sono nulli;
3. $T_{2k+1}(-x) = -T_{2k+1}(x)$ ovvero i polinomi di grado dispari sono funzioni dispari, quindi tutti i coefficienti delle potenze pari di x sono nulli;

4. $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \dots$
5. $T_n(x)$ assume complessivamente $n+1$ volte il valore $+1$ e -1 nei punti:

$$x_k = \cos \frac{k\pi}{n} \quad k = 0, \dots, n;$$

$$T_n(x_k) = (-1)^k \quad k = 0, \dots, n;$$

6. $T_n(x)$ ha n zeri distinti nell'intervallo $] -1, 1[$ dati da

$$x_k = \cos \frac{(2k+1)\pi}{2n} \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Infatti è sufficiente porre

$$\cos n\theta = 0$$

da cui risulta

$$n\theta = \frac{\pi}{2} + k\pi = \frac{(2k+1)\pi}{2}, \quad k = 0, \dots, n-1.$$

Nella Figura 4.4 sono tracciati i grafici dei primi cinque polinomi di Chebyshev nell'intervallo $[-1, 1]$. Ovviamente per calcolare il valore del polinomio $T_n(x)$ in un punto x fissato si usa la formula di ricorrenza (4.11), in quanto tale espressione è valida per ogni $x \in \mathbb{R}$.

Sia

$$\tilde{T}_n(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$$

il polinomio di Chebyshev normalizzato in modo da risultare monico (ricordiamo che un polinomio di grado n è monico se il coefficiente del termine di grado massimo è 1). Vale allora la seguente **proprietà di minimax**.

Teorema 4.3.1 (*Proprietà di minimax*) *Se $p_n(x)$ è un qualunque polinomio monico di grado n si ha:*

$$\frac{1}{2^{n-1}} = \max_{x \in [-1, 1]} |\tilde{T}_n(x)| \leq \max_{x \in [-1, 1]} |p_n(x)|.$$

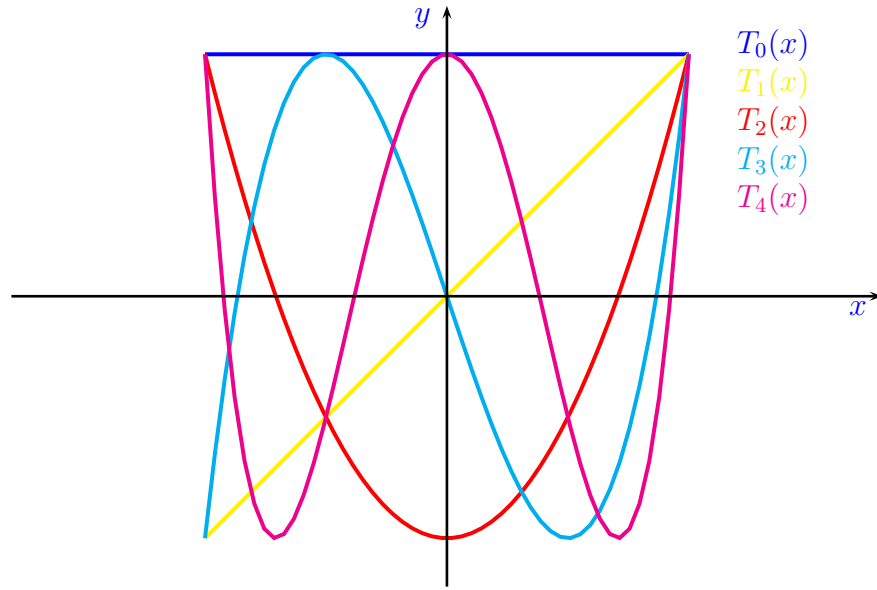


Figura 4.4: Grafico dei primi cinque polinomi di Chebyshev

Dimostrazione. Assumiamo per assurdo che sia

$$\max_{x \in [-1, 1]} |p_n(x)| < \frac{1}{2^{n-1}}$$

e consideriamo il polinomio $d(x) = \tilde{T}_n(x) - p_n(x)$. Osserviamo subito che essendo sia $\tilde{T}_n(x)$ che $p_n(x)$ monici, $d(x)$ è un polinomio di grado al più $n - 1$. Siano $t_0, t_1, \dots, t_n$ i punti in cui T_n assume valore -1 e $+1$. Allora:

$$\text{segn}(d(t_k)) = \text{segn}(\tilde{T}_n(t_k) - p_n(t_k)) = \text{segn}(\tilde{T}_n(t_k)).$$

Poichè $\tilde{T}_n(x)$ cambia segno n volte anche $d(x)$ cambia segno n volte e pertanto ammetterà n zeri, in contraddizione con il fatto che $d(x)$ è un polinomio di grado al più $n - 1$. $\square$

Osservazione. In verità vale un'affermazione più forte di quella del teorema, cioè se $p(x)$ è un polinomio monico di grado n diverso da $\tilde{T}_n(x)$ allora:

$$\max_{x \in [-1, 1]} |p(x)| > \frac{1}{2^{n-1}}.$$

Il teorema di minimax stabilisce che, tra tutti i polinomi di grado n definiti nell'intervallo $[-1, 1]$, il polinomio di Chebyshev monico è quello che ha il massimo più piccolo. Supponendo che l'intervallo di interpolazione della funzione $f(x)$ sia appunto $[-1, 1]$ e scegliendo come nodi gli zeri del polinomio di Chebyshev risulta

$$\omega_{n+1}(x) = \tilde{T}_{n+1}(x)$$

pertanto

$$e(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \tilde{T}_{n+1}(x)$$

e, massimizzando tale errore, risulta

$$\begin{aligned} \max_{x \in [-1, 1]} |e(x)| &\leq \max_{x \in [-1, 1]} \left| \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \right| \max_{x \in [-1, 1]} |\omega_{n+1}(x)| \\ &= \frac{1}{2^n(n+1)!} \max_{x \in [-1, 1]} |f^{(n+1)}(x)|. \end{aligned}$$

La crescita dell'errore può dipendere solo dalla derivata di ordine $n+1$ della funzione $f(x)$.

Se l'intervallo di interpolazione è $[a, b] \neq [-1, 1]$ allora il discorso può essere ripetuto egualmente effettuando una trasformazione lineare tra i due intervalli, nel modo riportato in Figura 4.5. Calcolando la retta nel piano (x, t) passante per i punti $(-1, a)$ e $(1, b)$:

$$t = \frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2} \quad (4.12)$$

detti x_k gli zeri del polinomio di Chebyshev $T_{n+1}(x)$ allora si possono usare come nodi i valori

$$\tau_k = \frac{b-a}{2}x_k + \frac{a+b}{2}, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

ovvero

$$\tau_k = \frac{b-a}{2} \cos \frac{(2k+1)\pi}{2(n+1)} + \frac{a+b}{2} \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (4.13)$$

Nella Figura 4.6 sono raffigurati la funzione di Runge ed il polinomio interpolante di Lagrange di grado 10 calcolato prendendo come nodi gli zeri del polinomio di Chebyshev di grado 11. Si può osservare la differenza con la Figura 4.3.

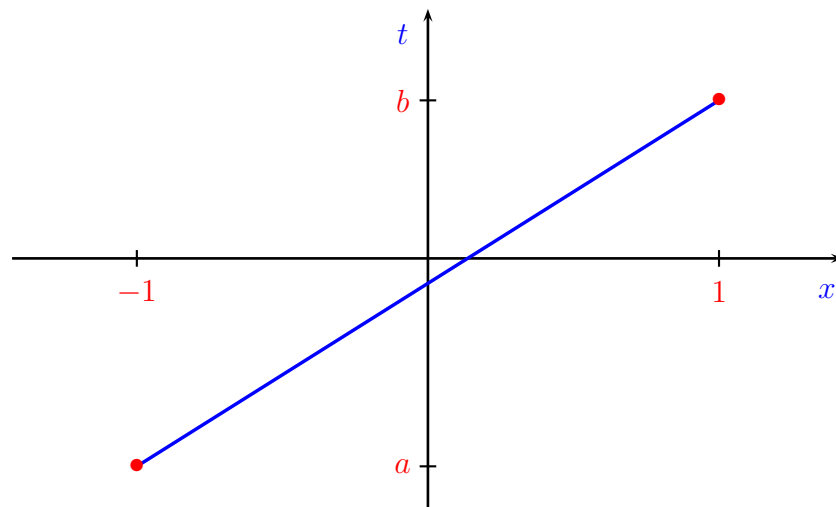


Figura 4.5: Trasformazione lineare tra gli intervalli $[-1, 1]$ e $[a, b]$.

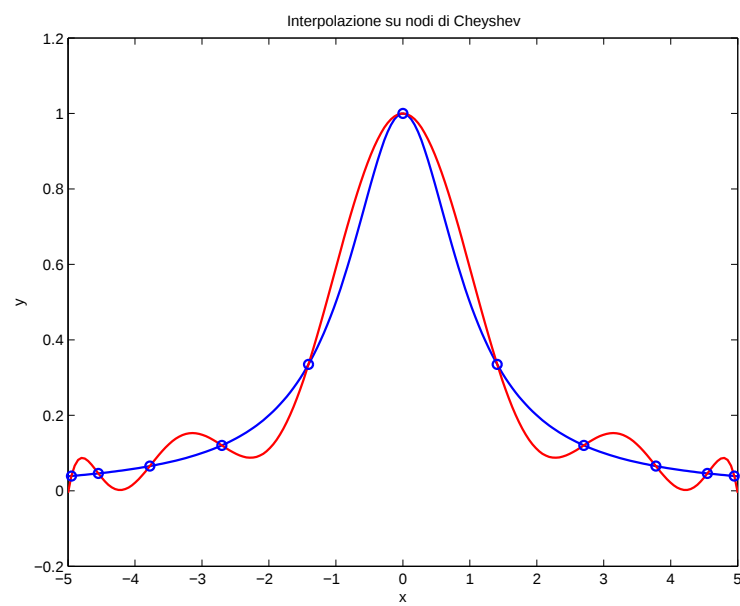


Figura 4.6: Interpolazione su nodi di Chebyshev.

4.4 Interpolazione con Funzioni Polinomiali a Tratti

L'interpolazione polinomiale con un numero di nodi sufficientemente alto può dar luogo a polinomi interpolanti che mostrano un comportamento fortemente oscillatorio che può essere inaccettabile. In questo caso si preferisce usare una diversa strategia consistente nell'approssimare la funzione con polinomi di basso grado su sottointervalli dell'intervallo di definizione. Per esempio, supposto che l'intero n sia un multiplo di 3, denotiamo con $P_{3,j}(x)$ il polinomio di interpolazione di terzo grado associato ai nodi $x_{3j-3}, x_{3j-2}, x_{3j-1}, x_{3j}$, $j = 1, 2, \dots, n/3$. Come funzione interpolante prendiamo poi la funzione:

$$I_n(x) = P_{3,j}(x) \quad \text{in } [x_{3j-3}, x_{3j}]$$

che prende il nome di **Funzione di tipo polinomiale a tratti**. La tecnica esposta non è l'unica, anzi la più popolare è forse quella basata sull'uso delle cosiddette **Funzioni Spline**.

4.4.1 Interpolazione con Funzioni Spline

Con il termine **spline** si indica in lingua inglese un sottile righello usato nella progettazione degli scafi dagli ingegneri navali, per raccordare su un piano un insieme di punti (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n+1$.

Imponendo mediante opportune guide che il righello passi per i punti assegnati, si ottiene una curva che li interpola. Detta $y = f(x)$ l'equazione della curva definita dalla spline, sotto opportune condizioni $f(x)$ può essere approssimativamente descritta da pezzi di polinomi di terzo grado in modo che la funzione e le sue prime due derivate risultino continue nell'intervallo di interesse. La derivata terza può presentare discontinuità nei punti x_i . La spline può essere concettualmente rappresentata e generalizzata nel seguente modo.

Sia

$$\Delta =: a \equiv x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} \equiv b$$

una decomposizione dell'intervallo $[a, b]$.

Definizione 4.4.1 Si dice *funzione Spline di grado $m \geq 1$ relativa alla decomposizione Δ* una funzione $s(x)$ soddisfacente le seguenti proprietà:

1. $s(x)$ ristretta a ciascun intervallo $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, n$, è un polinomio di grado al più m ;
2. la derivata $s^{(k)}(x)$ è una funzione continua su $[a, b]$ per $k = 0, 1, \dots, m-1$.

Si verifica facilmente che l'insieme delle spline di grado assegnato è uno spazio vettoriale. In generale le spline vengono utilizzate in tutte quelle situazioni dove l'approssimazione polinomiale sull'intero intervallo non è soddisfacente. Per $m = 1$ si hanno le cosiddette **spline lineari**, mentre per $m = 3$ si hanno le **spline cubiche**.

4.5 Approssimazione ai minimi quadrati

Come si è già accennato nell'introduzione di questo Capitolo quando i dati (x_i, y_i) , $i = 0, \dots, n$, sono rilevati con scarsa precisione, non ha molto senso cercare un polinomio di grado n (o, più in generale una funzione $\Psi(x)$) che interpoli i valori y_i nei nodi x_i . In questo caso è più utile cercare una funzione che si avvicini il più possibile ai dati rilevati. Chiaramente i criteri che si possono scegliere per tradurre l'espressione “*si avvicini il più possibile*” in termini matematici sono molteplici. Nel seguito descriviamo uno dei più usati non senza aver richiamato alcune definizioni di algebra lineare. In particolare ricordiamo che si definisce **norma 2** di un vettore (o **norma euclidea**) $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ la quantità

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

che, introducendo il prodotto scalare tra vettori $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$,

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{y}^T \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

può essere scritta nel seguente modo:

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}.$$

Indichiamo con $\Phi(a_0, a_1, \dots, a_m; x)$ la funzione (nella variabile x) che stiamo cercando e che dipende dagli $m + 1$ coefficienti $a_0, a_1, \dots, a_m$, e sia ε_i la

differenza tra il valore assunto da tale funzione nei nodi x_i ed valore rilevato y_i :

$$\varepsilon_i = \Phi(a_0, a_1, \dots, a_m; x_i) - y_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

Si possono determinare i coefficienti $a_0, \dots, a_m$ in modo tale che il vettore

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_0 & \varepsilon_1 & \varepsilon_2 & \dots & \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

abbia la minima norma euclidea al quadrato. Definita la funzione

$$Q(a_0, a_1, \dots, a_m) = \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2 = \sum_{i=0}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=0}^n (\Phi(a_0, a_1, \dots, a_m; x_i) - y_i)^2$$

si deve risolvere il seguente problema di minimo

$$Q(a_0^*, a_1^*, \dots, a_m^*) = \min_{a_0, \dots, a_m \in \mathbb{R}} Q(a_0, a_1, \dots, a_m). \quad (4.14)$$

Tale metodo prende il nome, appunto, di **approssimazione ai minimi quadrati**, poichè consiste nel minimizzare una somma di quadrati. Un caso particolare di tale metodo consiste nel cercare una funzione $\Phi(a_0, \dots, a_m)$ di tipo lineare che risolve il problema di minimo appena definito. Tale metodo viene descritto nel successivo paragrafo.

4.5.1 La Retta di Regressione

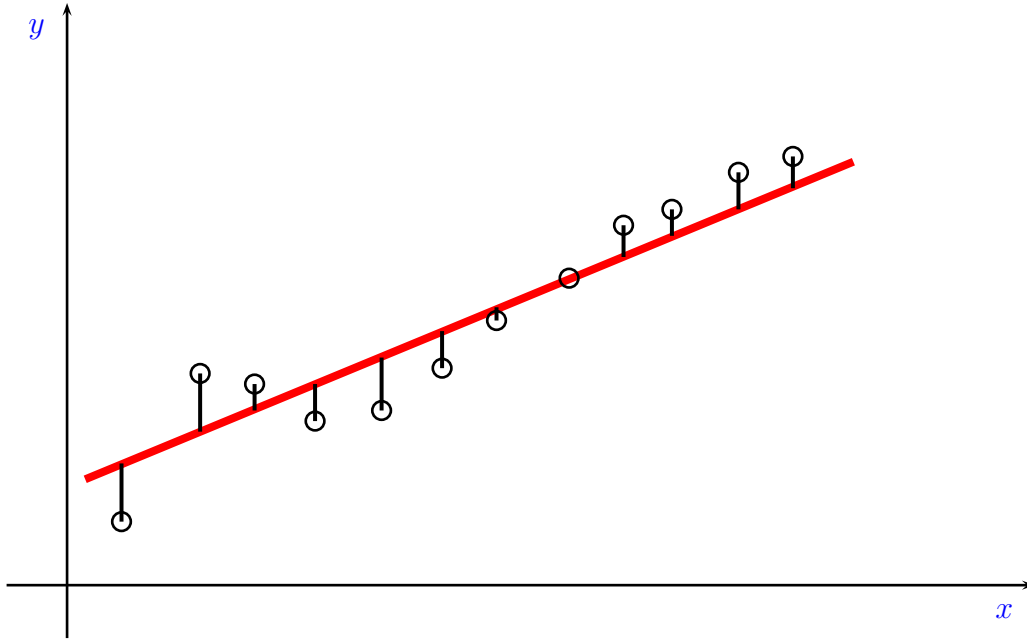
In questo caso si pone

$$\Phi(\alpha, \beta; x) = \alpha x + \beta, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \quad (4.15)$$

e si cercano, tra tutte le possibili rette, i coefficienti α e β che globalmente minimizzano la differenza

$$\Phi(\alpha, \beta; x_i) - y_i = \alpha x_i + \beta - y_i$$

La retta (4.15) che risolve tale problema viene detta **Retta di regressione**. Nella seguente figura sono evidenziate le quantità che devono essere globalmente minimizzate (i punti (x_i, y_i) sono evidenziati con il simbolo $\circ$).



Un modo per minimizzare globalmente le distanze della retta dalle approssimazioni è quello di trovare i valori α, β che minimizzano la funzione:

$$\Psi(\alpha, \beta) = \sum_{i=0}^n (\alpha x_i + \beta - y_i)^2.$$

Per questo si parla di problema ai minimi quadrati (si minimizza una somma di quantità elevate al quadrato).

Per determinare tali valori calcoliamo le derivate parziali rispetto alle incognite:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} &= 2 \sum_{i=0}^n x_i (\alpha x_i + \beta - y_i) \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \beta} &= 2 \sum_{i=0}^n (\alpha x_i + \beta - y_i) \end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} = 2 \sum_{i=0}^n x_i (\alpha x_i + \beta - y_i) = 0 \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \beta} = 2 \sum_{i=0}^n (\alpha x_i + \beta - y_i) = 0 \end{array} \right.$$

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^n x_i (\alpha x_i + \beta - y_i) = 0 \\ \sum_{i=0}^n (\alpha x_i + \beta - y_i) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha \sum_{i=0}^n x_i^2 + \beta \sum_{i=0}^n x_i - \sum_{i=0}^n x_i y_i = 0 \\ \alpha \sum_{i=0}^n x_i + (n+1)\beta - \sum_{i=0}^n y_i = 0. \end{cases}$$

Poniamo per semplicità

$$S_{xx} = \sum_{i=0}^n x_i^2 \quad S_x = \sum_{i=0}^n x_i$$

$$S_{xy} = \sum_{i=0}^n x_i y_i \quad S_y = \sum_{i=0}^n y_i.$$

Il sistema diventa

$$\begin{cases} S_{xx}\alpha + S_x\beta = S_{xy} \\ S_x\alpha + (n+1)\beta = S_y \end{cases}$$

la cui soluzione è

$$\alpha = \frac{(n+1)S_{xy} - S_x S_y}{(n+1)S_{xx} - S_x^2}$$

$$\beta = \frac{S_y S_{xx} - S_x S_{xy}}{(n+1)S_{xx} - S_x^2}.$$

La tecnica della retta di regressione può essere applicata anche nel caso in cui la relazione tra le ascisse x_i e le ordinate y_i sia di tipo esponenziale, ovvero si può ipotizzare che la funzione che meglio approssima i dati sperimentali sia

$$\Phi(x) = B e^{Ax}, \quad A, B \in \mathbb{R}, B > 0.$$

Ponendo

$$Y = \log \Phi(x)$$

risulta

$$Y = \log(Be^{Ax}) = Ax + \log B$$

ovvero

$$Y = \alpha x + \beta, \quad \alpha = A, \beta = \log B$$

quindi si può applicare la tecnica della retta di regressione ai dati $(x_i, \log y_i)$ (osserviamo che affinché il modello abbia senso i valori y_i devono essere tutti strettamente positivi).

Capitolo 5

Quadratura e Derivazione Numerica

5.1 Formule di Quadratura di Tipo Interpolatorio

Siano assegnati due valori a, b , con $a < b$, ed una funzione f integrabile sull'intervallo (a, b) . Il problema che ci poniamo è quello di costruire degli algoritmi numerici che ci permettano di valutare, con errore misurabile, il numero

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

Diversi sono i motivi che possono portare alla richiesta di un algoritmo numerico per questi problemi.

Per esempio pur essendo in grado di calcolare una primitiva della funzione f , questa risulta così complicata da preferire un approccio di tipo numerico. Non è da trascurare poi il fatto che il coinvolgimento di funzioni, elementari e non, nella primitiva e la loro valutazione negli estremi a e b comporta comunque un'approssimazione dei risultati. Un'altra eventualità è che f sia nota solo in un numero finito di punti o comunque può essere valutata in ogni valore dell'argomento solo attraverso una routine. In questi casi l'approccio analitico non è neanche da prendere in considerazione.

Supponiamo dunque di conoscere la funzione $f(x)$ nei punti distinti $x_0, x_1, \dots$,

x_n prefissati o scelti da noi, ed esaminiamo la costruzione di formule del tipo

$$\sum_{k=0}^n w_k f(x_k) \quad (5.1)$$

che approssimino $I(f)$.

Formule di tipo (5.1) si dicono **di quadratura**, i numeri reali $x_0, x_1, \dots, x_n$ e $w_0, \dots, w_n$ si chiamano rispettivamente **nodi** e **pesi** della formula di quadratura.

Il modo più semplice ed immediato per costruire formule di tipo (5.1) è quello di sostituire la funzione integranda $f(x)$ con il polinomio di Lagrange $L_n(x)$ interpolante $f(x)$ nei nodi x_i , $i = 0, \dots, n$. Posto infatti

$$f(x) = L_n(x) + e(x)$$

dove $e(x)$ è la funzione errore, abbiamo:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_a^b [L_n(x) + e(x)] dx = \int_a^b L_n(x) dx + \int_a^b e(x) dx \\ &= \int_a^b \sum_{k=0}^n l_{nk}(x) f(x_k) dx + \int_a^b e(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^n \left(\int_a^b l_{nk}(x) dx \right) f(x_k) + \int_a^b e(x) dx. \end{aligned}$$

Ponendo

$$w_k = \int_a^b l_{nk}(x) dx \quad k = 0, 1, \dots, n \quad (5.2)$$

e

$$R_{n+1}(f) = \int_a^b e(x) dx \quad (5.3)$$

otteniamo

$$I(f) \simeq \sum_{k=0}^n w_k f(x_k)$$

con un errore stabilito dalla relazione (5.3). Le formule di quadratura con pesi definiti dalle formule (5.2) si dicono **interpolatorie**. La quantità $R_{n+1}(f)$

prende il nome di **Resto della formula di quadratura**. Un utile concetto per misurare il grado di accuratezza con cui una formula di quadratura, interpolatoria o meno, approssima un integrale è il seguente.

Definizione 5.1.1 *Una formula di quadratura ha **grado di precisione** q se fornisce il valore esatto dell'integrale quando la funzione integranda è un qualunque polinomio di grado al più q ed inoltre esiste un polinomio di grado $q + 1$ tale che l'errore è diverso da zero.*

È evidente da questa definizione che ogni formula di tipo interpolatorio con nodi $x_0, x_1, \dots, x_n$ ha grado di precisione almeno n . Infatti applicando una formula di quadratura costruita su $n + 1$ nodi al polinomio $p_n(x)$, di grado n si ottiene:

$$\int_a^b p_n(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i p_n(x_i) + R_{n+1}(f)$$

e

$$R_{n+1}(f) = \int_a^b \omega_{n+1}(x) \frac{p_n^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} dx \equiv 0$$

ovvero la formula fornisce il risultato esatto dell'integrale, quindi $q \geq n$.

5.2 Formule di Newton-Cotes

Suddividiamo l'intervallo $[a, b]$ in n sottointervalli di ampiezza h , con

$$h = \frac{b - a}{n}$$

e definiamo i nodi

$$x_i = a + ih \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

La formula di quadratura interpolatoria costruita su tali nodi, cioè

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) + R_{n+1}(f)$$

è detta **Formula di Newton-Cotes**.

Una proprietà di cui godono i pesi delle formule di Newton-Cotes è la cosiddetta **proprietà di simmetria**. Infatti poichè i nodi sono a due a due simmetrici

rispetto al punto medio c dell'intervallo $[a, b]$, cioè $c = (x_i + x_{n-i})/2$, per ogni i , tale proprietà si ripercuote sui pesi che infatti sono a due a due uguali, cioè $w_i = w_{n-i}$, per ogni i . Infatti

$$\begin{aligned}
 w_k &= \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx \\
 &= \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - 2c + x_{n-i}}{2c - x_{n-k} - 2c + x_{n-i}} dx \\
 &= \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{x - 2c + x_{n-i}}{x_{n-i} - x_{n-k}} dx \\
 &= \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{2c - x - x_{n-i}}{x_{n-k} - x_{n-i}} dx.
 \end{aligned}$$

Posto $t = 2c - x$ risulta

$$\begin{aligned}
 x = a &\quad \Rightarrow \quad t = 2c - a = b \\
 x = b &\quad \Rightarrow \quad t = 2c - b = a
 \end{aligned}$$

quindi gli estremi di integrazione risultano invertiti, ma poichè $dt = -dx$ possiamo invertirli nuovamente, ottenendo

$$w_k = \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{t - x_{n-i}}{x_{n-k} - x_{n-i}} dt,$$

ponendo quindi nella produttoria $j = n - i$ risulta

$$w_k = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq n-k}^n \frac{t - x_j}{x_{n-k} - x_j} dt = w_{n-k},$$

e la proprietà di simmetria dei pesi è dimostrata.

Descriviamo ora due esempi di formule di Newton-Cotes.

5.2.1 Formula dei Trapezi

Siano $x_0 = a$, $x_1 = b$ e $h = b - a$.

$$T_2 = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1)$$

$$\begin{aligned}
w_0 &= \int_a^b l_{1,0}(x)dx = \int_a^b \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}dx = \int_a^b \frac{x - b}{a - b}dx \\
&= \frac{1}{a - b} \left[\frac{(x - b)^2}{2} \right]_{x=a}^{x=b} = \frac{h}{2}.
\end{aligned}$$

Poichè i nodi scelti sono simmetrici rispetto al punto medio $c = (a + b)/2$ è

$$w_1 = w_0 = \frac{h}{2}.$$

Otteniamo dunque la formula

$$T_2 = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)]$$

che viene detta **Formula dei Trapezi**. Per quanto riguarda il resto abbiamo

$$R_2(f) = \frac{1}{2} \int_a^b (x - a)(x - b)f''(\xi_x)dx.$$

Prima di vedere come tale espressione può essere manipolata enunciamo il seguente teorema che è noto come **teorema della media generalizzato**.

Teorema 5.2.1 *Siano $f, g : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, funzioni continue con $g(x)$ a segno costante e $g(x) \neq 0$ per ogni $x \in]a, b[$. Allora*

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi) \int_a^b g(x)dx, \quad \xi \in [a, b]. \quad \square$$

Poichè la funzione $(x - a)(x - b)$ è a segno costante segue:

$$R_2(f) = \frac{1}{2}f''(\eta) \int_a^b (x - a)(x - b)dx$$

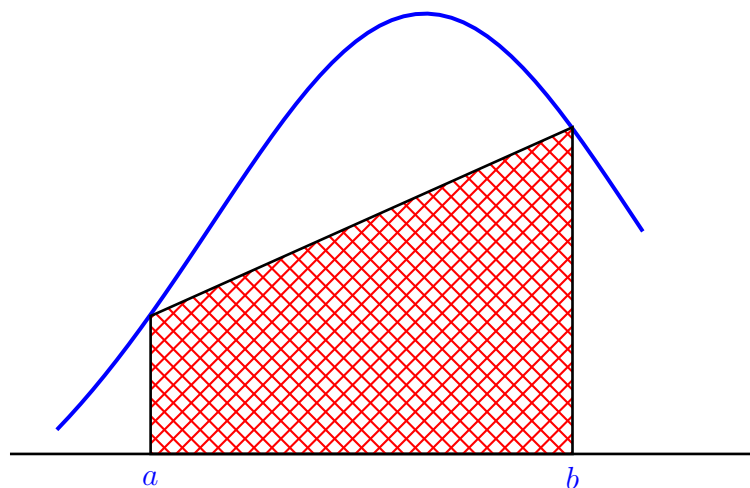
posto $x = a + ht$ otteniamo

$$R_2(f) = \frac{1}{2}f''(\eta)h^3 \int_0^1 t(t - 1)dt = -\frac{1}{12}h^3f''(\eta).$$

L'errore della formula dipende dalla derivata seconda della funzione quindi il grado di precisione è pari a 1 in quanto solo se f è un polinomio di grado

al più 1 essa fornisce il risultato esatto dell'integrale.

L'interpretazione geometrica della formula del trapezio è riassunta nella seguente figura, l'area tratteggiata (ovvero l'integrale della funzione viene approssimato attraverso l'area del trapezio che ha come basi i valori della funzione in a e b e come altezza l'intervallo $[a, b]$).



5.2.2 Formula di Simpson

Siano $x_0 = a$, $x_2 = b$ mentre poniamo $x_1 = c$, punto medio dell'intervallo $[a, b]$. Allora

$$S_3 = w_0 f(a) + w_1 f(c) + w_2 f(b).$$

Posto

$$h = \frac{b-a}{2}$$

abbiamo

$$w_0 = \int_a^b l_{2,0}(x) dx = \int_a^b \frac{(x-c)(x-b)}{(a-c)(a-b)} dx.$$

Effettuando il cambio di variabile $x = c + ht$ è facile calcolare quest'ultimo integrale, infatti

$$x = a \Rightarrow a = c + ht \Rightarrow a - c = ht \Rightarrow -h = ht \Rightarrow t = -1$$

e

$$x = b \Rightarrow b = c + ht \Rightarrow b - c = ht \Rightarrow h = ht \Rightarrow t = 1.$$

Inoltre $a - c = -h$ e $a - b = -2h$ mentre

$$x - c = c + ht - c = ht, \quad x - b = c + ht - b = c - b + ht = -h + ht = h(t - 1),$$

ed il differenziale $dx = hdt$ cosicchè

$$\begin{aligned} w_0 &= \int_a^b \frac{(x - c)(x - b)}{(a - c)(a - b)} dx = \int_{-1}^1 \frac{ht h(t - 1)}{(-h)(-2h)} h dt \\ &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 (t^2 - t) dt = \frac{h}{2} \int_{-1}^1 t^2 dt = \frac{h}{2} \left[\frac{t^3}{3} \right]_{-1}^1 = \frac{h}{3}. \end{aligned}$$

Per la proprietà di simmetria è anche

$$w_2 = w_0 = \frac{h}{3}$$

mentre possiamo calcolare w_1 senza ricorrere alla definizione. Infatti possiamo notare che la formula fornisce il valore esatto dell'integrale quando la funzione è costante nell'intervallo $[a, b]$, quindi possiamo imporre che, prendendo $f(x) = 1$ in $[a, b]$, sia

$$\int_a^b dx = b - a = \frac{h}{3}(f(a) + f(b)) + w_1 f(c) = \frac{2}{3}h + w_1$$

da cui segue

$$w_1 = b - a - \frac{2}{3}h = 2h - \frac{2}{3}h = \frac{4}{3}h.$$

Dunque

$$S_3 = \frac{h}{3} [f(a) + 4f(c) + f(b)].$$

Questa formula prende il nome di **Formula di Simpson**. Per quanto riguarda l'errore si può dimostrare, e qui ne omettiamo la prova, che vale la seguente relazione

$$R_3(f) = -h^5 \frac{f^{(4)}(\sigma)}{90} \quad \sigma \in (a, b),$$

che assicura che la formula ha grado di precisione 3.

5.3 Formule di Quadratura Composte

Come abbiamo già avuto modo di vedere le formule di quadratura interpolatorie vengono costruite approssimando su tutto l'intervallo di integrazione la funzione integranda con un unico polinomio, quello interpolante la funzione sui nodi scelti. Per formule convergenti la precisione desiderata si ottiene prendendo n sufficientemente grande. In tal modo comunque, per ogni fissato n , bisogna costruire la corrispondente formula di quadratura. Una strategia alternativa che ha il pregio di evitare la costruzione di una nuova formula di quadratura, e che spesso produce risultati più apprezzabili, è quella delle **formule composte**. Infatti scelta una formula di quadratura l'intervallo di integrazione (a, b) viene suddiviso in N sottointervalli di ampiezza h ,

$$h = \frac{b - a}{N} \quad (5.4)$$

sicchè

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$$

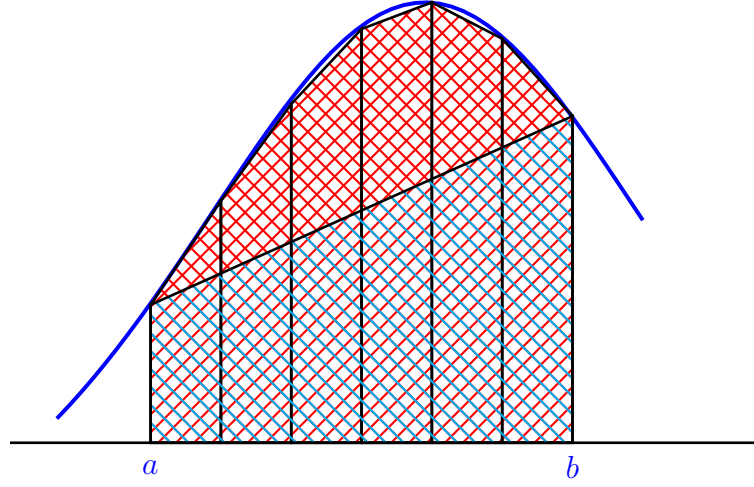
dove i punti x_i sono:

$$x_i = a + ih \quad i = 0, \dots, N \quad (5.5)$$

quindi la formula di quadratura viene applicata ad ognuno degli intervalli $[x_i, x_{i+1}]$. Il grado di precisione della formula di quadratura composta coincide con il grado di precisione della formula da cui deriva. Descriviamo ora la **Formula dei Trapezi Composta**.

5.3.1 Formula dei Trapezi Composta

Per quanto visto in precedenza suddividiamo l'intervallo $[a, b]$ in N sottointervalli, ognuno di ampiezza data da h , come in (5.4), e con i nodi x_i definiti in (5.5). Appliciamo quindi in ciascuno degli N intervalli $[x_i, x_{i+1}]$ la formula dei trapezi. Nella seguente figura sono evidenziate le aree che approssimano l'integrale utilizzando la formula dei trapezi semplice e quella composta.



Applicando la formula dei trapezi a ciascun sottointervallo si ottiene

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{h}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) - \frac{1}{12} h^3 f''(\eta_i) \right]$$

con $\eta_i \in (x_i, x_{i+1})$. Scrivendo diversamente la stessa espressione

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_N)) + h \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) - \frac{1}{12} h^3 \sum_{i=0}^{N-1} f''(\eta_i) \\ &= \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_N)) + h \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) - \frac{1}{12} h^3 N f''(\eta) \end{aligned}$$

dove $\eta \in (a, b)$. L'esistenza di tale punto η è garantito dal cosiddetto **Teorema della media nel discreto** applicato a $f''(x)$, che stabilisce che se $g(x)$ è una funzione continua in un intervallo $[a, b]$ e $\eta_i \in [a, b]$ $i = 1, N$, sono N punti distinti, allora esiste un punto $\eta \in (a, b)$ tale che

$$\sum_{i=1}^N g(\eta_i) = N g(\eta).$$

Dunque la formula dei trapezi composta è data da:

$$T_C(h) = \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_N)) + h \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i)$$

con resto

$$R_T = -\frac{1}{12}h^3 N f''(\eta) = -\frac{1}{12} \frac{(b-a)^3}{N^3} N f''(\eta) = -\frac{1}{12} \frac{(b-a)^3}{N^2} f''(\eta).$$

Quest'ultima formula può essere utile per ottenere a priori una suddivisione dell'intervallo $[a, b]$ in un numero di intervalli che permetta un errore non superiore ad una prefissata tolleranza. Infatti

$$|R_T| \leq \frac{1}{12} \frac{(b-a)^3}{N^2} M, \quad M = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|.$$

Imponendo che $|R_T| \leq \varepsilon$, precisione prefissata, segue

$$N_\varepsilon \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M}{12\varepsilon}}. \quad (5.6)$$

Tuttavia questo numero spesso risulta una stima eccessiva a causa della maggiorazione della derivata seconda tramite M .

Esempio 5.3.1 *Determinare il numero di intervalli in cui suddividere l'intervallo di integrazione per approssimare*

$$\int_1^2 \log x \, dx$$

con la formula dei trapezi composta con un errore inferiore a $\varepsilon = 10^{-4}$.

La derivata seconda della funzione integranda è

$$f''(x) = -\frac{1}{x^2}$$

quindi il valore di M è 1. Dalla relazione (5.6) segue che

$$N_\varepsilon \geq \sqrt{\frac{1}{12\varepsilon}} = 29.$$

5.3.2 Formula di Simpson Composta

Per ottenere la formula di Simpson composta, si procede esattamente come per la formula dei trapezi composta. Suddividiamo $[a, b]$ in N intervalli di ampiezza h , con N numero pari. Allora

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x)dx \\ &= \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} \left[\frac{h}{3} (f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta_i) \right] \\ &= \frac{h}{3} \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} [f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})] - \frac{h^5 N}{180} f^{(4)}(\eta) \end{aligned}$$

dove $\eta_i \in (x_i, x_{i+1})$ e $\eta \in (a, b)$.

La formula di Simpson composta è dunque

$$\begin{aligned} S_C(h) &= \frac{h}{3} \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} [f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})] \\ &= \frac{h}{3} \left[f(x_0) + f(x_N) + 2 \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i}) + 4 \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i+1}) \right] \end{aligned}$$

mentre la formula dell'errore è

$$R_S = -\frac{(b-a)^5}{180N^4} f^{(4)}(\eta).$$

Anche quest'ultima formula talvolta può essere utile per ottenere a priori una suddivisione dell'intervallo $[a, b]$ in un numero di intervalli che permetta un errore non superiore ad una prefissata tolleranza. Infatti

$$|R_S| \leq \frac{1}{180} \frac{(b-a)^5}{N^4} M, \quad M = \max_{x \in [a, b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Imponendo che $|R_S| \leq \varepsilon$ segue

$$N_\varepsilon \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5 M}{180\varepsilon}}. \quad (5.7)$$

Esempio 5.3.2 *Risolvere il problema descritto nell'esempio 5.3.1 applicando la formula di Simpson composta.*

La derivata quarta della funzione integranda è

$$f^{iv}(x) = -\frac{6}{x^4}$$

quindi è maggiorata da $M = 6$. Dalla relazione (5.7) segue che

$$N_\varepsilon \geq \sqrt[4]{\frac{6}{180\varepsilon}} > 4,$$

quindi $N_\varepsilon \geq 6$.

5.4 La formula del punto di mezzo

Sia c il punto medio dell'intervallo $[a, b]$. Sviluppiamo $f(x)$ in serie di Taylor prendendo c come punto iniziale:

$$f(x) = f(c) + f'(c)(x - c) + \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - c)^2, \quad \xi_x \in [a, b].$$

Integrando membro a membro

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_a^b f(c)dx + f'(c) \int_a^b (x - c)dx + \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - c)^2dx \\ &= (b - a)f(c) + \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - c)^2dx. \end{aligned}$$

Poichè la funzione $x - c$ è dispari rispetto a c il suo integrale nell'intervallo $[a, b]$ è nullo. Posto $h = b - a$ la formula diventa

$$\int_a^b f(x)dx \simeq hf(c)$$

e prende appunto il nome di **formula del punto di mezzo** (o di midpoint). Per quanto riguarda l'errore

$$\begin{aligned} R(f) &= \int_a^b \frac{f''(\xi_x)}{2}(x - c)^2dx \\ &= \frac{f''(\xi)}{2} \int_a^b (x - c)^2dx. \end{aligned}$$

In questo caso la funzione $(x - c)^2$ è a segno costante quindi è stato possibile applicare il teorema 5.2.1. Calcoliamo ora l'integrale

$$\int_a^b (x - c)^2 dx = 2 \int_c^b (x - c)^2 = \frac{2}{3} [(x - c)^3]_c^b = \frac{h^3}{12}.$$

L'espressione del resto di tale formula è quindi

$$R(f) = \frac{h^3}{24} f''(\xi).$$

Osserviamo che la formula ha grado di precisione 1, come quella dei trapezi, però richiede il calcolo della funzione solo nel punto medio dell'intervallo mentre la formula dei trapezi necessita di due valutazioni funzionali.

5.4.1 Formula del punto di mezzo composta

Anche in questo caso suddividiamo l'intervallo $[a, b]$ in N intervallini di ampiezza h , con N pari. Allora

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} f(x) dx \\ &= \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} \left[2h f(x_{2i+1}) + \frac{(2h)^3}{24} f''(\eta_i) \right] \\ &= 2h \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i+1}) + \frac{Nh^3}{6} f''(\eta) \\ &= 2h \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i+1}) + \frac{(b-a)^3}{6N^2} f''(\eta) \end{aligned}$$

dove $\eta_i \in (x_{2i}, x_{2i+2})$ e $\eta \in (a, b)$. La formula del punto di mezzo composta è dunque

$$M_C(h) = 2h \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} f(x_{2i+1})$$

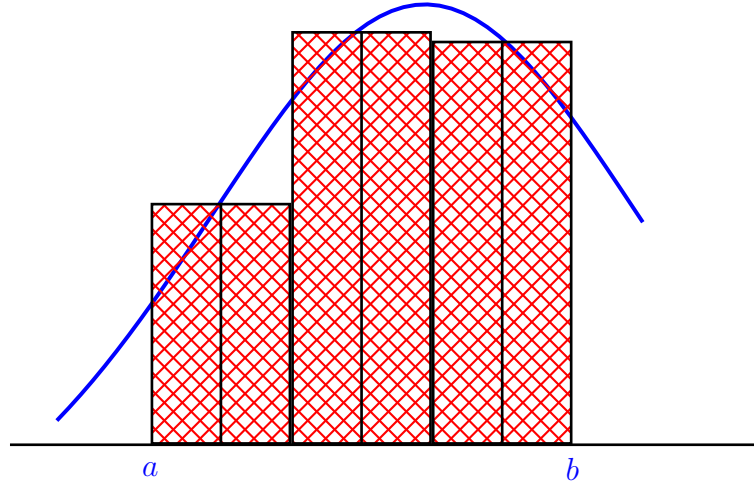


Figura 5.1: Formula del Punto di Mezzo Composta

mentre il resto è

$$R_M = \frac{(b-a)^3}{6N^2} f''(\eta). \quad (5.8)$$

Se ε è la tolleranza fissata risulta

$$|R_M| \leq \frac{1}{6} \frac{(b-a)^3}{N^2} M, \quad M = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|.$$

Imponendo che $|R_T| \leq \varepsilon$, precisione prefissata, segue

$$N_\varepsilon \geq \sqrt{\frac{(b-a)^3 M}{6\varepsilon}}. \quad (5.9)$$

Nella Figura 5.1 sono evidenziate le aree che approssimano l'integrale utilizzando la formula del punto di mezzo composta.

Esempio 5.4.1 *Risolvere il problema descritto nell'esempio 5.3.1 applicando la formula del punto di mezzo composta.*

La derivata seconda della funzione integranda è maggiorata da $M = 1$. Da (5.9) risulta

$$N_\varepsilon \geq \sqrt{\frac{1}{6\varepsilon}} > 40.$$

5.5 Derivazione numerica

Il problema della derivazione numerica consiste nell'approssimazione delle derivate di una funzione in un punto del dominio utilizzando opportune combinazioni lineari tra i valori assunti dalla funzione in un insieme discreto di punti. In questo paragrafo considereremo le formule per l'approssimazione delle derivate prima e seconda di una funzione in una variabile. Tali formule potrebbero essere utilizzate anche per l'approssimazione discreta delle derivate parziali di una funzione in due variabili.

Supponiamo che $f(t) \in \mathcal{C}^k([a, b])$, per un certo valore k sufficientemente grande per il nostro obiettivo, e suddividiamo l'intervallo di variabilità di t in N sottointervalli di ampiezza h , ottenendo le ascisse

$$a \equiv t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{N-1} < t_N \equiv b.$$

Consideriamo tre punti consecutivi appartenenti a tale reticolazione, rispettivamente t_{n-1} , t_n e t_{n+1}

$$t_{n-1} = t_n - h, \quad t_{n+1} = t_n + h.$$

Scriviamo lo sviluppo in serie di Taylor di $f(t_{n+1})$ prendendo come punto iniziale t_n :

$$f(t_{n+1}) = f(t_n) + hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(t_n) + \frac{h^3}{6}f'''(t_n) + \frac{h^4}{24}f^{iv}(\xi_n), \quad \xi_n \in [t_n, t_{n+1}]$$

e procediamo in modo analogo per $f(t_{n-1})$:

$$f(t_{n-1}) = f(t_n) - hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(t_n) - \frac{h^3}{6}f'''(t_n) + \frac{h^4}{24}f^{iv}(\eta_n), \quad \eta_n \in [t_{n-1}, t_n].$$

Sommiamo ora le due espressioni

$$f(t_{n+1}) + f(t_{n-1}) = 2f(t_n) + h^2f''(t_n) + \frac{h^4}{24}[f^{iv}(\xi_n) + f^{iv}(\eta_n)]$$

ricavando

$$f''(t_n) = \frac{f(t_{n+1}) - 2f(t_n) + f(t_{n-1}))}{h^2} - \frac{h^2}{24}[f^{iv}(\xi_n) + f^{iv}(\eta_n)]$$

e, trascurando l'ultimo termine, l'approssimazione della derivata seconda è:

$$f''(t_n) \simeq \frac{f(t_{n+1}) - 2f(t_n) + f(t_{n-1}))}{h^2} \quad (5.10)$$

mentre si può provare che l'errore vale:

$$E(f''(t_n)) = -\frac{h^2}{12}f^{iv}(\xi), \quad \xi \in [t_{n-1}, t_{n+1}].$$

Per approssimare la derivata prima si procede in modo analogo ovvero scrivendo le serie di Taylor per $f(t_{n+1})$

$$f(t_{n+1}) = f(t_n) + hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(t_n) + \frac{h^3}{6}f'''(\sigma_n), \quad \sigma_n \in [t_n, t_{n+1}]$$

e per $f(t_{n-1})$:

$$f(t_{n-1}) = f(t_n) - hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(t_n) - \frac{h^3}{6}f'''(\mu_n), \quad \mu_n \in [t_{n-1}, t_n]$$

e questa volta si sottrae la seconda dalla prima:

$$f(t_{n+1}) - f(t_{n-1}) = 2hf'(t_n) + \frac{h^3}{6}[f'''(\sigma_n) + f'''(\mu_n)]$$

ottenendo

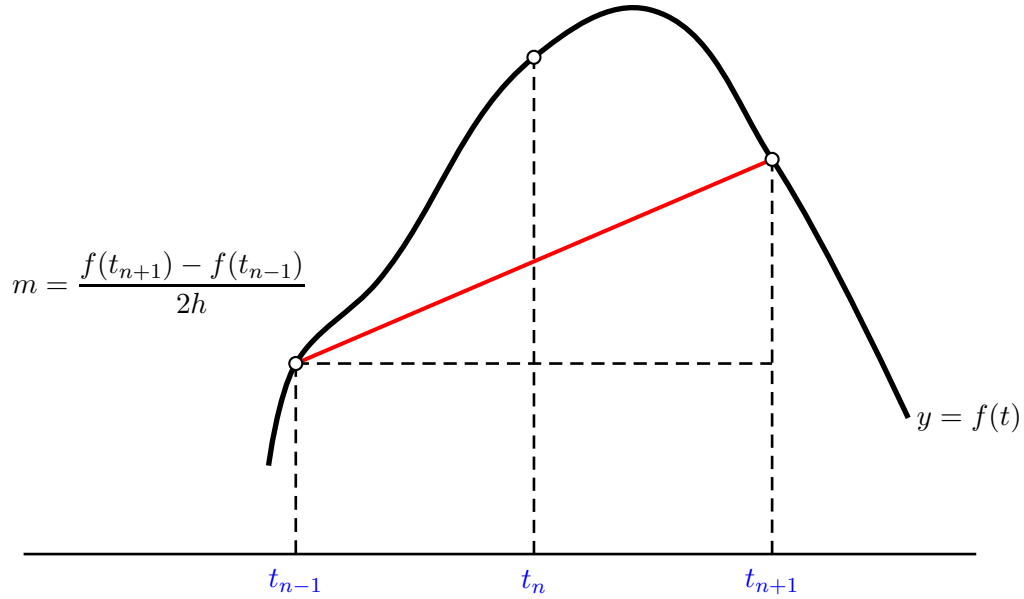
$$f'(t_n) = \frac{f(t_{n+1}) - f(t_{n-1})}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\sigma_n) + f'''(\mu_n)]$$

e, trascurando l'ultimo termine, l'approssimazione della derivata prima è:

$$f'(t_n) \simeq \frac{f(t_{n+1}) - f(t_{n-1})}{2h} \tag{5.11}$$

mentre si può provare che l'errore vale:

$$E(f'(t_n)) = -\frac{h^2}{6}f'''(\delta), \quad \delta \in [t_{n-1}, t_{n+1}].$$



La formula (5.11) prende il nome di **formula alle differenze centrali**. Osserviamo che sia per questa che per l'approssimazione numerica per la derivata seconda l'errore dipende da h^2 , sono formule cioè **del secondo ordine**. In modo analogo si possono ricavare due approssimazioni per la derivata prima: infatti possiamo anche scrivere:

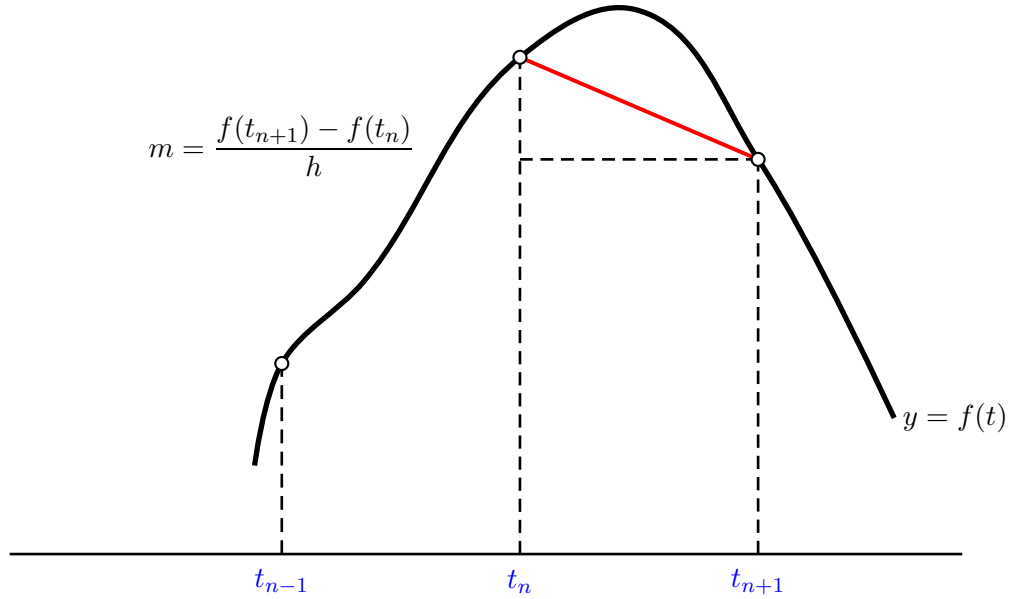
$$f(t_{n+1}) = f(t_n) + hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(\xi_n), \quad \xi_n \in [t_n, t_{n+1}]$$

da cui si ricava immediatamente la **formula alle differenze in avanti**:

$$f'(t_n) \simeq \frac{f(t_{n+1}) - f(t_n)}{h} \quad (5.12)$$

con errore

$$E(f'(t_n)) = -\frac{h}{2}f''(\xi_n).$$



Analogamente si ricava

$$f(t_{n-1}) = f(t_n) - hf'(t_n) + \frac{h^2}{2}f''(\mu_n), \quad \mu_n \in [t_{n-1}, t_n]$$

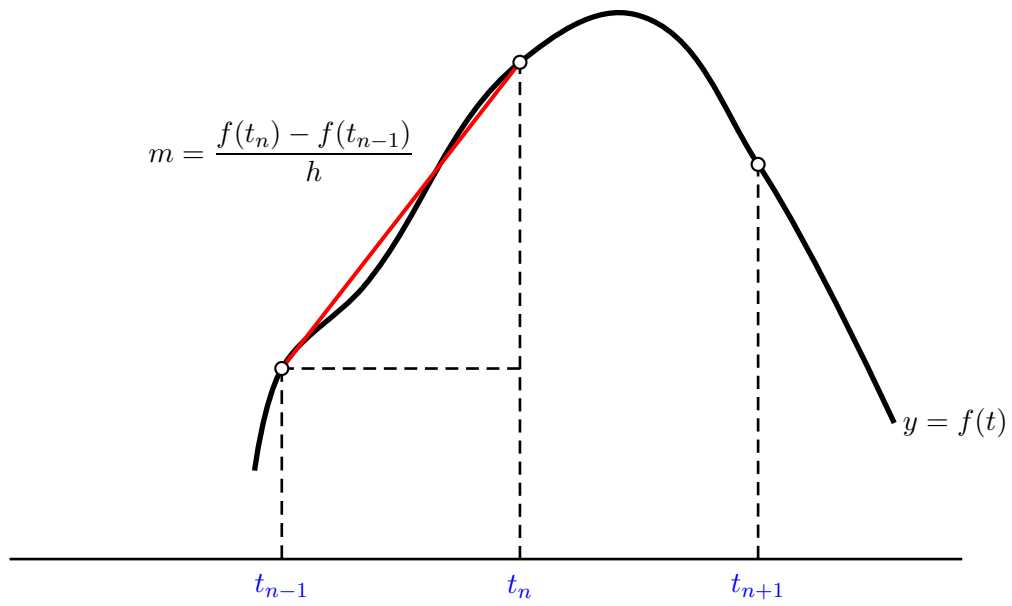
da cui si ricava immediatamente la **formula alle differenze all'indietro**:

$$f'(t_n) \simeq \frac{f(t_n) - f(t_{n-1}))}{h} \quad (5.13)$$

con errore

$$E(f'(t_n)) = -\frac{h}{2}f''(\mu_n).$$

Queste due formule hanno ordine 1, quindi sono meno precise rispetto alla formula alle differenze centrali, tuttavia hanno il pregio di poter essere applicate quando la funzione è discontinua (oppure non è definita) a destra o a sinistra di t_n .



Capitolo 6

Metodi numerici per equazioni differenziali ordinarie

6.1 Introduzione

Le equazioni differenziali rappresentano uno degli strumenti più efficaci nella costruzione di modelli matematici per la simulazione di sistemi dinamici, cioè di sistemi che evolvono nel tempo secondo determinate leggi. Esse sono utilizzate nei più svariati campi applicativi, dall'ingegneria alla chimica, alla fisica, alla biologia, alle scienze sociali, all'informatica. È superfluo, quindi, sottolineare l'importanza di un loro studio sia sotto l'aspetto teorico che numerico. Data, comunque, la vastità dell'argomento, ciò che segue non può che rappresentare una introduzione elementare. Inoltre, alcuni risultati saranno forniti in maniera intuitiva, rinviando per le necessarie giustificazioni alla consultazione di testi specifici. Incominceremo con alcune semplici definizioni e notazioni.

Supponiamo che sia assegnato il seguente problema differenziale, che viene detto [problema di Cauchy ai valori iniziali](#):

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (6.1)$$

dove $f : [t_0, T] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ è una funzione continua rispetto a t e *Lipschitziana* rispetto a y , cioè esiste una costante positiva L tale che, per ogni $x, y \in \mathbb{R}$, risulta

$$|f(t, x) - f(t, y)| \leq L|x - y|, \quad \forall t \in [t_0, T].$$

Una funzione $y(t)$ definita su un intervallo $[t_0, T]$ è una soluzione dell'equazione differenziale (6.1) se $y(t)$ è continua insieme alla derivata $y'(t)$ e l'equazione (6.1) è verificata, quando si sostituisce la funzione incognita con la funzione y , per ogni $t \in [t_0, T]$.

In questo paragrafo introdurremo, attraverso opportuni esempi, le idee che sono alla base dell'approssimazione numerica del problema a valori iniziali (6.1). I metodi che saranno descritti hanno in comune la seguente idea di partenza. Si discretizza l'intervallo di integrazione (t_0, T) mediante i nodi

$$t_n = t_{n-1} + h = t_0 + nh, \quad n = 0, \dots, N$$

dove N è un numero intero scelto opportunamente, $t_N = T$ ed h è detto [passo di discretizzazione](#) che supporremo essere costante

$$h = \frac{T - t_0}{N}$$

Esistono comunque metodi numerici basati su strategie di passo variabile in cui il valore di h può essere differente in punti diversi della discretizzazione. I metodi numerici hanno l'obiettivo di approssimare la soluzione teorica $y(t)$ nelle ascisse t_n .

Vediamo come possono essere ricavati alcuni semplici metodi numerici. Partendo dal problema di Cauchy

$$y'(t) = f(t, y(t)) \tag{6.2}$$

e supponendo di voler calcolare la soluzione in t_{n+1} , noto il valore in t_n , integriamo membro a membro (6.2) rispetto a t :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} y'(t) dt = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \tag{6.3}$$

ovvero

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt. \tag{6.4}$$

Il problema diviene quello di approssimare l'integrale a secondo membro. Un primo modo è quello di farlo utilizzando l'area del rettangolo avente come base l'intervallo $[t_n, t_{n+1}]$ e come altezza il valore assunto dalla funzione integranda in t_n (vedere figura 6.1), quindi

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = hf(t_n, y(t_n)) + \text{Errore}.$$

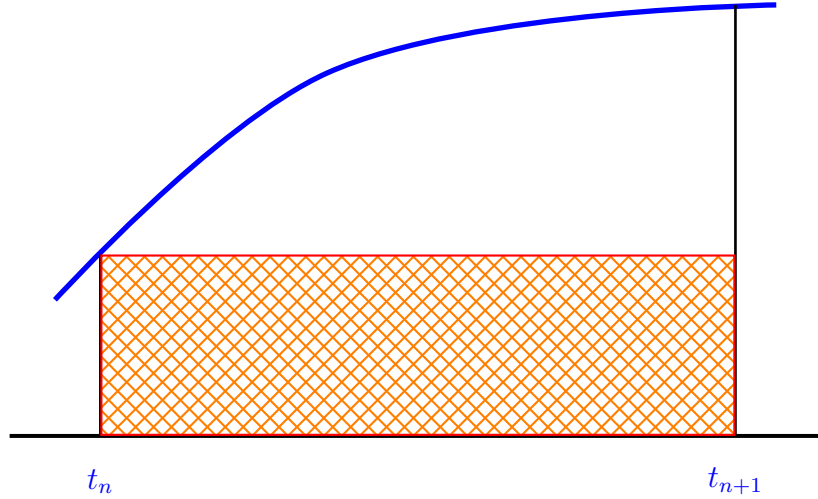


Figura 6.1:

Trascurando il termine di errore si ottiene l'uguaglianza approssimata

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) \simeq hf(t_n, y(t_n))$$

da cui, definendo le approssimazioni

$$y_n \simeq y(t_n), \quad y_{n+1} \simeq y(t_{n+1})$$

si ottiene la seguente uguaglianza tra quantità approssimate:

$$y_{n+1} - y_n = hf(t_n, y_n) \quad \Leftrightarrow \quad y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n).$$

Tale metodo viene detto **Metodo di Eulero Esplicito** in quanto consente, noto y_n , di calcolare esplicitamente l'approssimazione nel punto successivo. In modo analogo si può approssimare l'integrale in (6.3) con l'area del rettangolo avente come base lo stesso intervallo $[t_n, t_{n+1}]$ e come altezza il valore assunto dalla funzione integranda in t_{n+1} (vedere figura 6.2), ottenendo quindi:

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) \simeq hf(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$$

che fornisce il cosiddetto **Metodo di Eulero Implicito**:

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

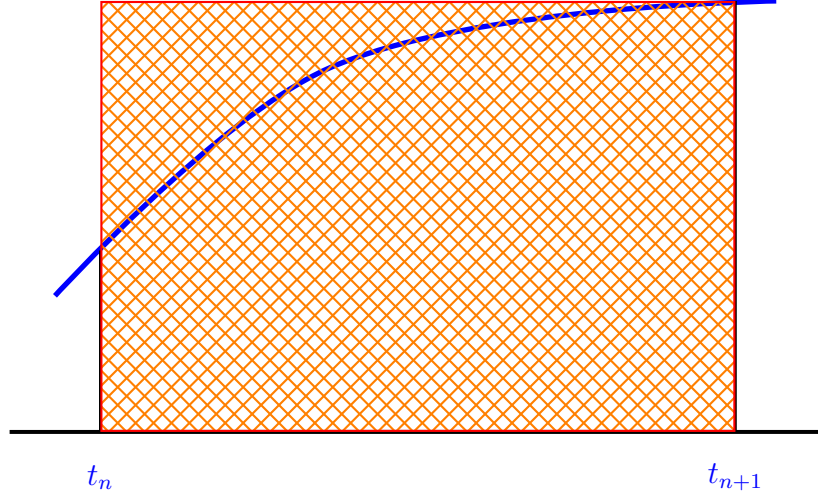


Figura 6.2:

Un'ulteriore formula per approssimare l'integrale in (6.3) è quello di usare la formula del trapezio (vedere Figura 6.3):

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) \simeq \frac{h}{2} [f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) + f(t_n, y(t_n))]$$

che dà luogo al cosiddetto **Metodo dei Trapezi**:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(t_{n+1}, y_{n+1}) + f(t_n, y_n)].$$

In modo analogo a quanto visto per i metodi appena introdotti possiamo ricavare l'espressione di altri metodi numerici integrando il problema di Cauchy in $[t_n, t_{n+2}]$,

$$y(t_{n+2}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+2}} f(t, y(t)) dt$$

e approssimando l'integrale a secondo membro applicando il metodo del punto di mezzo (ovvero con l'area del rettangolo avente come base l'intervallo $[t_n, t_{n+2}]$ e come altezza il valore assunto dalla funzione nel punto medio dell'intervallo, come riportato in Figura 6.4):

$$y(t_{n+2}) - y(t_n) \simeq 2hf(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$$

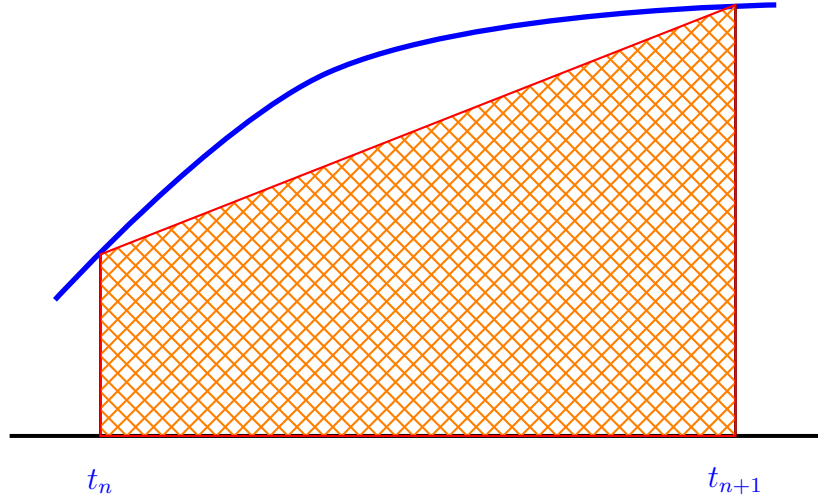


Figura 6.3:

che fornisce il **Metodo del Midpoint**:

$$y_{n+2} = y_n + 2hf(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

6.2 Classificazione dei metodi numerici

Come abbiamo visto nel precedente paragrafo i metodi numerici per equazioni differenziali possono assumere diverse espressioni e, in base a queste, possono essere classificati in diversi modi. Se la soluzione numerica nell'istante corrente t_{n+1} dipende solo dall'approssimazione nell'istante precedente t_n , ovvero il metodo assume l'espressione

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(t_n, t_{n+1}, y_n, y_{n+1}) \quad (6.5)$$

dove $\Phi(\cdot, \cdot)$ è un'opportuna funzione (che definisce il metodo numerico e che ovviamente dipende anche dalla funzione $f(t, y)$), allora il metodo si dice **ad un passo** (**one-step**) e, partendo dal valore y_0 , che coincide con la condizione iniziale assegnata, è possibile calcolare y_1 , quindi da questa y_2 e così via. I

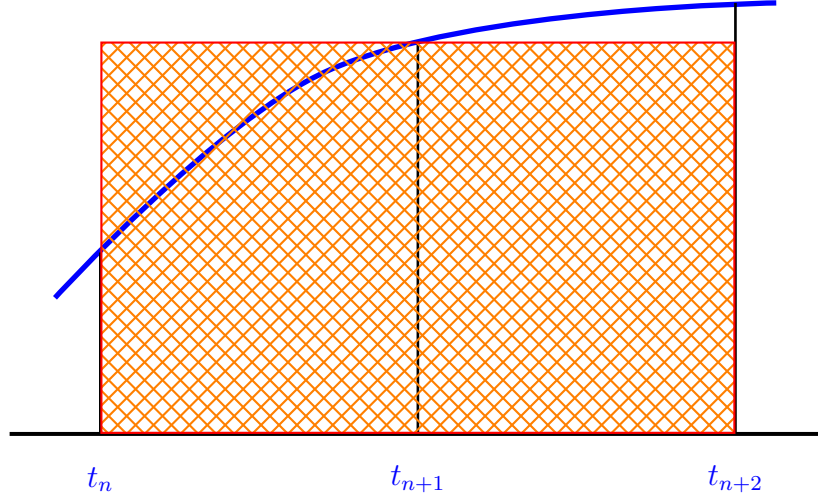


Figura 6.4:

due metodi di Eulero ed il Metodo dei Trapezi sono metodi ad un passo. Nel caso in cui la soluzione numerica nell'istante corrente dipenda da k approssimazioni negli istanti precedenti (con $k \geq 2$), cioè il metodo assume la forma

$$y_{n+k} = y_n + h\Phi(t_n, \dots, t_{n+k}, y_n, \dots, y_{n+k}) \quad (6.6)$$

allora il metodo si dice **a k passi** (**k -step**) e, partendo dal valore y_0 , non è possibile calcolare y_k poichè è necessario conoscere anche $y_1, \dots, y_{k-1}$. Per ovviare a questo problema si può applicare $k-1$ volte un metodo ad un passo fino ad ottenere tutte le approssimazioni necessarie. Il metodo del Midpoint è un esempio di metodo a due passi.

Se la funzione $\Phi(\cdot, \cdot)$ non dipende dall'approssimazione che stiamo calcolando, ovvero

$$y_{n+1} = y_n + h\Phi(t_n, y_n) \quad (6.7)$$

oppure

$$y_{n+k} = y_n + h\Phi(t_n, \dots, t_{n+k-1}, y_n, \dots, y_{n+k-1}) \quad (6.8)$$

allora il metodo viene detto **esplicito** (come sono il metodo di Eulero Esplicito ed il metodo del Midpoint), altrimenti il metodo viene detto **implicito** (per esempio il metodo di Eulero Implicito ed il Metodo dei Trapezi).

In quest'ultimo caso quando la funzione $f(t, y)$ che definisce il problema di Cauchy non è lineare rispetto al secondo argomento, per calcolare l'approssimazione y_{n+1} (oppure y_{n+k}) è necessario risolvere un'equazione non lineare (o un sistema di equazioni non lineari). Per esempio applicando il metodo di Eulero Implicito

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$$

caso l'equazione si presenta già sotto forma di equazione di punto fisso (che abbiamo introdotto nel capitolo 2):

$$x = g(x)$$

con

$$g(x) = y_n + hf(t_{n+1}, x)$$

pertanto risulta naturale definire il seguente metodo di iterazione funzionale:

$$y_{n+1}^{(m+1)} = g\left(y_{n+1}^{(m)}\right)$$

prendendo come approssimazione iniziale il valore dell'approssimazione più vicina a quella incognita, cioè:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n.$$

Il metodo iterativo è quindi

$$\begin{aligned} y_{n+1}^{(0)} &= y_n \\ y_{n+1}^{(m+1)} &= y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}^{(m)}). \end{aligned} \tag{6.9}$$

Affinchè tale metodo converga deve essere

$$|g'(x)| < 1$$

in un opportuno intorno della soluzione. Calcolando la derivata prima della funzione $g(x)$ si ha:

$$g'(x) = h \frac{\partial f}{\partial y}(t_{n+1}, x)$$

quindi la condizione per la convergenza diviene:

$$h \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < 1 \quad \Rightarrow \quad \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < \frac{1}{h}.$$

Tale condizione è sicuramente verificata se risulta

$$hL < 1,$$

dove L è la costante di Lipschitz relativa alla funzione $f(t, y)$.

Esempio 6.2.1 *Applicare il metodo di Eulero esplicito per approssimare la soluzione del problema di Cauchy:*

$$y'(t) = e^{-y^2}, \quad y(0) = 1$$

in $t = 0.1$.

Posto $h = 0.1$ si applica la formula con $n = 0$

$$y_1 = y_0 + hf(t_1, y_1), \quad t_1 = t_0 + h = h$$

cosicchè risulti

$$y_1 \simeq y(0.1).$$

Sostituendo l'espressione della funzione l'approssimazione cercata è

$$y_1 = 1 + h e^{-y_1^2}.$$

Quindi y_1 risulta essere lo zero della funzione

$$\varphi(x) = x - 1 - h e^{-x^2}.$$

Osservando, per esempio, che risulta $\varphi(0) < 0$ e $\varphi(2) > 0$ si potrebbe applicare il metodo delle bisezioni, oppure, come descritto in precedenza, un metodo iterativo di punto fisso

$$x_{k+1} = 1 + h e^{-x_k^2}, \quad x_0 = 1.$$

6.3 Il metodo di Eulero Esplicito

Il metodo di Eulero esplicito può essere interpretato anche in un modo diverso da quello introdotto nel precedente paragrafo: infatti l'equazione della retta tangente alla curva soluzione $y(t)$ nel punto (t_0, y_0) è

$$y = y_0 + f(t_0, y_0)(t - t_0)$$

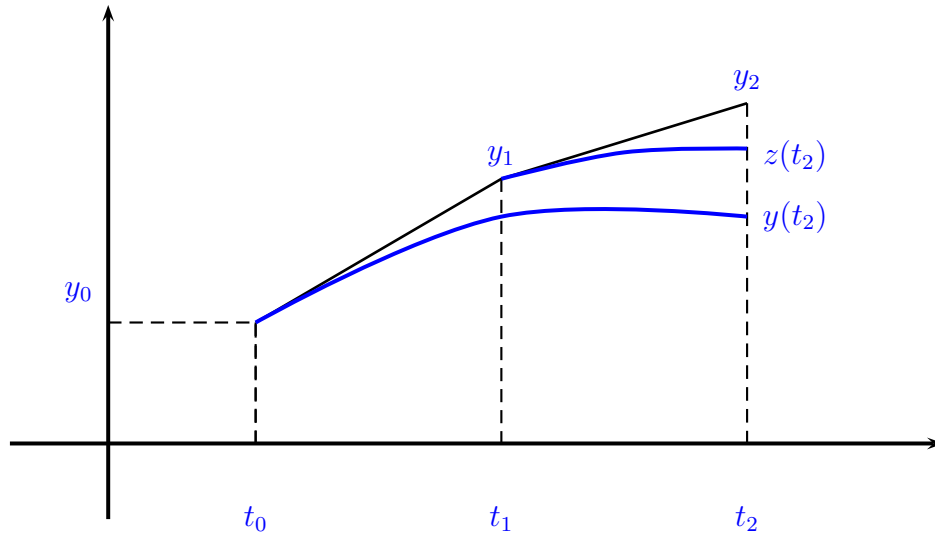


Figura 6.5:

e, per $t = t_0 + h$ fornisce il valore

$$y_1 = y_0 + hf(t_0, y_0).$$

Reiterando tale procedimento si ottiene, appunto, il metodo di Eulero esplicito. Questa interpretazione è rappresentata nella Figura 6.5. Un altro modo di interpretare il metodo di Eulero è quello di considerare l'insieme dei punti

$$t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N \equiv T$$

e di approssimare la derivata prima in un punto t_n con il metodo alle differenze in avanti:

$$y'(t_n) = f(t_n, y_n) \simeq \frac{y_{n+1} - y_n}{h}$$

da cui deriva appunto l'espressione dello schema numerico.

Come esempio illustrativo, si consideri il problema ai valori iniziali

$$\begin{cases} y'(t) = y(t) \sin(4t) \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

che ha come soluzione esatta la funzione

$$y(t) = e^{(1 \cos(4t))/4}.$$

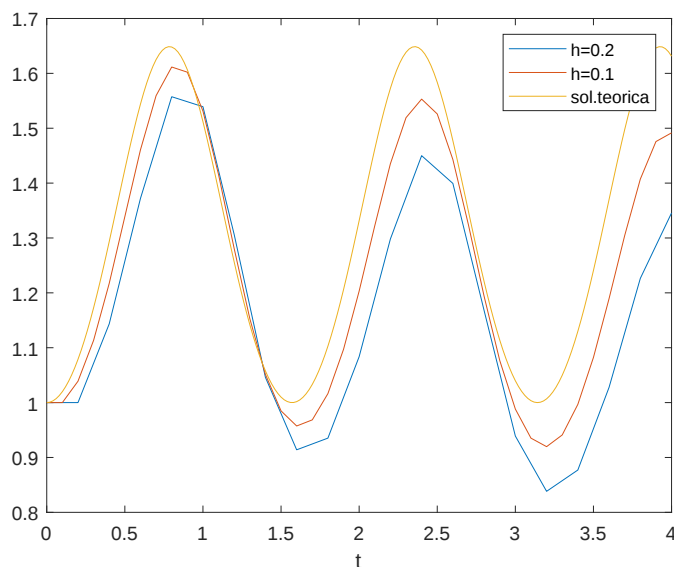


Figura 6.6:

In Figura 6.6 sono riportati i risultati ottenuti mediante il metodo di Eulero Esplicito nell'intervallo $(0, 4)$ in corrispondenza a due valori del passo h . Più precisamente, nella figura sono rappresentate le funzioni lineari a tratti che si ottengono interpolando i valori y_n forniti dal metodo di Eulero e la soluzione teorica del problema.

6.3.1 Studio della convergenza

Osservando la Figura 6.6 in cui il metodo di Eulero Esplicito è applicato ad un problema differenziale che soddisfa le ipotesi di esistenza ed unicità della soluzione ed utilizzando un valore del passo h sempre più piccolo si osserva che l'approssimazione migliora al diminuire del passo. In effetti, dal punto di vista delle applicazioni è importante che l'approssimazione possa essere migliorata fin che si vuole scegliendo opportunamente il passo h . In forma schematica, se questo avviene, si dice che lo schema è convergente.

Descriveremo brevemente alcuni dettagli di questo aspetto fondamentale.

Per ogni t_n , $n = 0, 1, \dots, N$, si definisce **errore globale in t_n** la differenza tra la soluzione esatta e la soluzione calcolata mediante il metodo numerico,

ossia la quantit a

$$e(t_n, h) := y(t_n) - y_n.$$

La **convergenza** riguarda il comportamento della funzione $e(t_n, h)$ al tendere di h a zero. Considerato, ad esempio, il punto $t = T$, per $h \rightarrow 0$ si ha che $n \rightarrow \infty$, e lo schema verr a detto convergente nel punto T quando

$$\lim_{h \rightarrow 0} e(t_n, h) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{n \rightarrow \infty} y_n = y(T).$$

Un altro aspetto importante nello studio della convergenza riguarda l'analisi della rapidit  di convergenza rispetto ad h .

Supponiamo ora di aver applicato il metodo di Eulero esplicito e di aver indicato con y_n la soluzione approssimata.

Nell'errore globale $y(t_n) - y_n$ si individuano due contributi. Il primo   l'errore introdotto dal metodo, dovuto al fatto che la soluzione   stata sostituita dalla tangente. Questo errore, definito ad ogni avanzamento del passo, dalla quantit 

$$l_n(h, f) := z(t_{n+1}) - [y_n + hf(t_n, y_n)]$$

  chiamato **errore di troncamento locale**. La quantit 

$$\tau_n(h, f) := \frac{l_n(h, f)}{h} = \frac{z(t_n + h) - z(t_n)}{h} - f(t_n, z(t_n))$$

chiamata **errore di discretizzazione locale**, fornisce una misura di come l'approssimazione, corrispondente al metodo numerico, approssima l'equazione differenziale assegnata. Quando l'errore di discretizzazione locale tende a zero per $h \rightarrow 0$, si dice che il metodo   **consistente**.

Dal momento che nelle ipotesi fatte sulla funzione f la soluzione y dell'equazione differenziale risulta derivabile, ne segue che il metodo di Eulero   un metodo consistente. In effetti, tale risultato equivale a dire che il rapporto incrementale tende alla derivata. Si pu  ulteriormente precisare tale convergenza, quando la funzione f   pi  regolare, ad esempio derivabile in t e y . Si ha, allora, che se la soluzione $z(t)$ (che rappresenta la soluzione dell'equazione differenziale che si ottiene prendendo y_n come condizione iniziale)   dotata di derivata seconda e quindi vale il seguente sviluppo in serie

$$z(t_n + h) = z(t_n) + hz'(t_n) + \frac{h^2}{2}z''(t_n + \theta_n h)$$

dove θ_n   un opportuno valore in $(0, 1)$. Ricordando che

$$z'(t_n) = f(t_n, z(t_n)) = f(t_n, y_n), \quad \text{in quanto } z(t_n) = y_n;$$

si ha pertanto

$$l_n(h, f) := z(t_{n+1}) - [y_n + hf(t_n, y_n)] = \frac{h^2}{2} z''(t_n + \theta_n h).$$

da cui

$$|\tau_n(h, f)| \leq Mh$$

dove M è un'opportuna costante. Più in generale, quando l'errore di discretizzazione di un metodo tende a zero come h^r , cioè

$$\tau(f, h) = O(h^r),$$

si dice che il metodo è **di ordine r** . In particolare il metodo di Eulero esplicito è un metodo di ordine 1. Bisogna sottolineare che la precisazione sull'ordine del metodo ha richiesto un supplemento di regolarità della soluzione; quindi, se la regolarità non è quella richiesta, la precisione dell'approssimazione può essere inferiore.

Il secondo contributo all'errore globale $y(t_{n+1}) - y_{n+1}$ è dovuto al fatto che la tangente è considerata nel punto (t_n, y_n) , anziché nel punto $(t_n, y(t_n))$ della soluzione del problema assegnato. Tale contributo non è locale, in quanto rappresenta l'accumulo di tutti gli errori di troncamento locale commessi in precedenza. A priori non è garantito che questi errori tendano a zero quando $h \rightarrow 0$. In altre parole non è detto che la consistenza di un metodo, cioè la convergenza a zero dei singoli errori locali, comporti necessariamente la convergenza a zero dell'errore globale. In realtà, affinché si abbia la convergenza, occorre che l'accumulo degli errori di troncamento locale si mantenga limitato quando h tende a zero. Quando questo avviene, si dice che il metodo è **stabile**. La denominazione sottolinea il fatto che per un metodo stabile le perturbazioni sui risultati numerici, corrispondenti a delle perturbazioni sui dati, si mantengono limitate, non *esplodono*, quando h tende a zero.

Senza scendere ulteriormente nei dettagli vale il seguente risultato generale:

$$\text{convergenza} \Leftrightarrow \text{stabilità} + \text{consistenza}.$$