APPUNTI DI CALCOLO NUMERICO

Equazioni non lineari

Premessa

Sia data una funzione $f(x)$ di variabile reale con valori in $\Re$, ossia una $f:\Re\to\Re$, non lineare e si cerchino le radici (o gli zeri) della seguente equazione $f(x)=0$.

Per prima cosa è necessario determinare il numero delle soluzioni. Non esistono regole universalmente valide che permettano il calcolo del numero delle soluzioni. In altre parole, non esistono formule risolutive generali che si possano applicare a qualunque funzione non lineare, tranne in pochi casi particolari come, ad esempio, le equazioni di secondo grado.

Esempio:

Determinare il numero di soluzioni reali delle seguenti equazioni.

Per svolgere questo semplice esercizio è possibile basarsi sulle conoscenze che provengono dai corsi di Analisi Matematica.

$x^2+1=0 \;\Rightarrow 0$ soluzioni reali (ciò non vuol dire che tale equazione non ammetta soluzioni, ma solamente che le soluzioni sono complesse e coniugate)

$2x+3=0 \;\Rightarrow 1$ soluzione reale

$x^2-4x+4=0 \;\Rightarrow 1$ soluzione reale con molteplicità $m=2$ (oppure due soluzioni reali e coincidenti)

$x^2-5x+6=0 \;\Rightarrow 2$ soluzioni reali

$\left(\frac{1}{x}+\sin(x)\right)=0 \;\Rightarrow \infty$ soluzioni reali

Dato che, come è stato detto, non esistono formule risolutive per le equazioni non lineari (tranne che in pochissimi casi), non esistono nemmeno metodi diretti per risolvere tali equazioni. Infatti i metodi diretti di basano essenzialmente su formule. Di conseguenza si parlerà solamente di metodi iterativi, con i relativi problemi legati alla loro convergenza e, se quest'ultima è garantita, alla velocità di convergenza.

Valgono le stesse regole che esistevano nella trattazione dei sistemi lineari? La risposta è negativa. Infatti non tutte le assunzioni che si erano fatte per risolvere i sistemi lineari possono essere trasferite alle equazioni lineari. In particolare non sono più valide le considerazioni fatte sulla convergenza e sulla consistenza dei metodi iterativi.

Per comprendere meglio questo aspetto è utile confrontare i due casi:

caso lineare

- convergenza indipendente dalla scelta della stima iniziale x_0;
- se il metodo converge, il limite è sicuramente una soluzione del sistema lineare (consistenza del metodo iterativo).

caso non lineare

- convergenza dipendente in modo critico dalla scelta della stima iniziale x_0;
- i metodi applicati possono convergere a punti che non sono le soluzioni cercate, specialmente in caso di più soluzioni.

In ogni caso, prima di applicare un qualsiasi metodo iterativo, è necessario effettuare uno studio di funzione, limitatamente a ciò che serve per determinare il numero delle soluzioni e per localizzarle, ossia determinare degli intervalli piccoli che contengano una e una sola soluzione.

Esempio:

Localizzare le radici dell'equazione non lineare

$$-x^3+3x-1=0\,.$$

Tenendo a mente il grafico di una generica funzione di terzo grado, il numero delle radici coincide con in numero di volte che tale grafico taglia l'asse delle ascisse. Inoltre, le soluzioni sono esattamente i punti in cui la funzione si annulla, ossia le intersezioni con l'asse delle ascisse.

Per capire quante volte la funzione taglia l'asse delle ascisse è sufficiente determinare i massimi e i minimi. Ciò significa trovare i punti stazionari annullando la derivata prima:

$$f(x)=-x^3+3x-1$$
$$f'(x)=-3x^2+3=-3(x^2-1)$$

$f'(x)=0 \Rightarrow x=\pm 1$ sono le ascisse dei punti stazionari

calcolo delle ordinate dei punti stazionari:

$f(-1)=+1-3-1=-3<0 \Rightarrow$ minimo
$f(+1)=-1+3-1=1>0 \Rightarrow$ massimo

Poiché i segni delle ordinate dei due punti stazionari sono discordi, si può concludere che gli zeri della funzione sono tre, sono reali e sono distinti. È necessario ora valutare il segno di tali soluzioni:

in base al valore della funzione per $x = 0$

$f(0) = -1$

è possibile concludere che due radici sono positive e una è negativa.

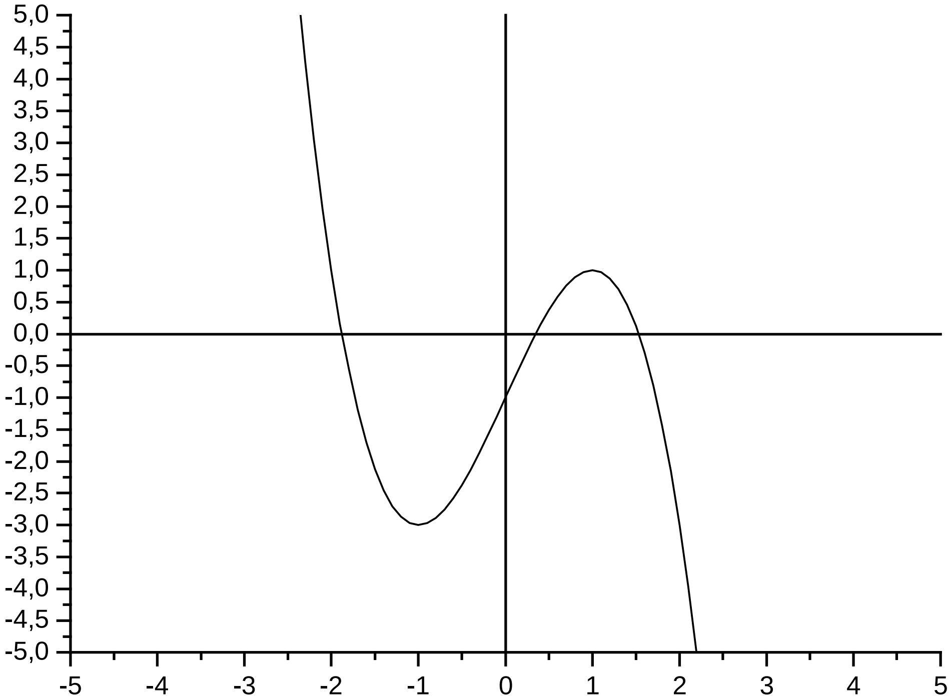
Localizzazione delle radici:

per ciò che è già noto $x_2{}^* \in (0,1)$

$f(-2) = +8 - 6 - 1 = 1 > 0 \Rightarrow x_1{}^* \in (-2,-1)$

$f(2) = -8 + 6 - 1 = -3 < 0 \Rightarrow x_3{}^* \in (1,2)$

I risultati trovati concordano con il grafico effettivo della funzione.



Metodo di bisezione

Si basa sui risultati del seguente

Teorema di esistenza degli zeri per funzioni continue: se $f \in C[a,b]$ e $f(a) \cdot f(b) < 0$, allora $\exists c \in [a,b]$ tale che $f(c) = 0$.

Sia $[a,b]$ un intervallo che contenga una ke una sola radice x^* (localizzata) e sia $m=\frac{a+b}{2}$ il punto medio di tale intervallo. Può presentarsi uno di questi casi:

- $f(m)=0$, caso fortuito che si presenta con probabilità zero;
- $f(m)$ è discorde con $f(a)$, allora $x^* \in [a,m]$;
- $f(m)$ è discorde con $f(b)$, allora $x^* \in [m,b]$.

Si ripete il procedimento dimezzando l'intervallo ad ogni passo dell'iterazione.

Algoritmo:

- dato $[a_0,b_0]$; $x_0=\frac{a_0+b_0}{2}$ stima iniziale della soluzione;
- per $k=0,1,2,\ldots,k_{MAX}$
  - o se $f(a_k)\cdot f(x_k)<0$ si pone $a_{k+1}=a_k$, $b_{k+1}=x_k$; altrimenti si pone $a_{k+1}=x_k$, $b_{k+1}=b_k$;
  - o si pone $x_{k+1}=\frac{a_{k+1}+b_{k+1}}{2}$ stima corrente della soluzione
- se $f(x_k)=0$ interrompi il ciclo (controllo).

Qual è l'errore introdotto da questo metodo?

Per ogni k, il punto x_k è il punto medio dell'intervallo corrente. L'errore può essere espresso nel seguente modo

$$e_k = |x_k - x^*| \le \frac{b_k - a_k}{2} = \frac{b_{k-1} - a_{k-1}}{4} = \ldots = \frac{b_0 - a_0}{2^{k+1}}$$

quindi $\lim_{k\to\infty} e_k = 0$ qualunque sia $[a_0,b_0]$ purché ci sia una e una sola radice in esso.

Quindi il metodo di bisezione converge per il teorema del confronto, infatti l'errore è sempre maggiore o uguale a zero ed è minore di una quantità che tende a zero, per $k\to\infty$. In particolare si dice che il metodo di bisezione è globalmente convergente, poiché la convergenza è sempre garantita, qualunque sia la stima iniziale della soluzione.

Occorre ora esprimere una stima dell'errore per il metodo di bisezione. Consideriamo una tolleranza ε, nota, per l'errore assoluto. Se si garantisce che

$$\frac{b_0 - a_0}{2^{k+1}} < \varepsilon$$

cioè che

$$k + 1 \geq \log_2\left(\frac{b_0 - a_0}{\varepsilon}\right)$$

allora si avrà sicuramente $\varepsilon_k \leq \varepsilon$.
È quindi possibile stabilire a priori il massimo numero di iterazioni da effettuare per soddisfare la richiesta.

Strettamente legata al concetto di convergenza è la velocità di convergenza.

Definizione: sia $\{x_k\}$ una successione convergente al limite x^*. Sia $e_k = |x_k - x^*|$. Se esistono due costanti $p \geq 1$ e $c > 0$ tali che $\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k{}^p} = c$, allora si dice che la successione converge con ordine p, ossia che asintoticamente (per $k \to \infty$) $e_{k+1} = O(e_k{}^p)$.

Se $p = 1$ si ha convergenza lineare e si deve imporre $c < 1$.
Se $p = 2$ si ha convergenza quadratica.
Se $1 < p < 2$ si ha convergenza superlineare.

Se c'è convergenza lineare il $\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k}$ è minore di 1. Perciò, applicando il teorema di permanenza del segno, si deduce che l'errore deve diminuire in modo monotono $(e_{k+1} < e_k)$.

Dimostrazione:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = c$$

ma $c < 1$, quindi

$$\lim_{k\to\infty}\left(\frac{e_{k+1}}{e_k} - 1\right) = c - 1 < 0$$

il limite è negativo, quindi da un certo k in avanti il termine generico della successione diventa negativo, entra in un intorno del limite e non si allontana più. Quindi da un certo k in poi

$$e_{k+1} < e_k$$

cioè l'errore diminuisce sempre.

c.v.d.

Il metodo di bisezione non è nemmeno lineare perché l'errore non diminuisce in modo monotono, anzi può anche aumentare passando dall'iterazione $k -$esima all'iterazione $(k+1)-$esima. Si dice che il metodo di bisezione ha convergenza sublineare.

Esempio:

Si supponga che la soluzione esatta x^* si trovi molto vicino alla stima x_k. Nella nuova iterazione il punto x_{k+1} sarà molto più distante da x^* di quanto lo fosse la precedente stima.

In conclusione, il metodo di bisezione è molto lento a convergere, ma converge con qualunque stima iniziale. La lentezza è dovuta principalmente al fatto che il metodo di bisezione considera solamente il segno della funzione, ma non il suo valore.

Metodo di Newton o delle tangenti

È totalmente diverso dal metodo di bisezione. Il metodo di Newton sfrutta molte informazioni ottenute dalla funzione, per questo è molto più rapido a convergere. Tuttavia il suo costo computazionale è decisamente maggiore di quello del metodo di bisezione. Inoltre la scelta della stima iniziale diventa un parametro critico per garantire la convergenza: se si sceglie male x_0 il metodo può essere non convergente.
In particolare, il metodo di Newton sfrutta informazioni sul valore della funzione $f(x)$ e sulla derivata prima $f'(x)$.

Chiamando x_k la stima corrente della soluzione, è possibile approssimare localmente la funzione con la retta tangente passante per $(x_k, f(x_k))$. L'equazione di questa retta tangente è

$$r_k = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$

la quale non è altro che un polinomio di Taylor arrestato al primo ordine, centrato in x_k. Il punto soluzione dell'equazione $r_k(x) = 0$ è la stima della soluzione per la nuova iterazione x_{k+1}, ossia si ha $r_k(x_{k+1}) = 0$. Sostituendo:

$$f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0$$

e ricavando x_{k+1}, si ha per $k = 0,1,\ldots$

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

Questa è la formula del metodo di Newton. Si nota che essa richiede di calcolare $f(x_k)$ e $f'(x_k)$ ad ogni iterata. Inoltre se per qualche k vale $f'(x_k)=0$, il metodo si blocca.

La <u>velocità di convergenza</u> del metodo di Newton si deduce dal seguente

Teorema: sia $f \in C^2$ in un intorno di x^*. SE la successione $\{x_k\}$ generata dal metodo di Newton converge a x^* e $f'(x^*) \neq 0$, allora l'ordine di convergenza è (almeno) $p=2$.

La condizione imposta da questo teorema per avere convergenza quadratica ha la seguente conseguenza: se $f'(x^*)=0$ allora la radice x^* è una radice multipla, cioè ha molteplicità maggiore di 1. In questo caso l'ordine di convergenza decade a 1 e si ha solamente convergenza lineare.
Tuttavia, se si conosce la molteplicità m della radice, si può apportare la seguente modifica al metodo di Newton:

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

e in questo modo l'ordine di convergenza è nuovamente 2.

Esempio:

Alcuni algoritmi per esprimere, in termini di operazioni elementari, le operazioni più complesse, ottenuti applicando il metodo di Newton.

radice quadrata

$$\sqrt{\alpha}:\ x^2 - \alpha = 0 \ \Rightarrow\ x_{k+1} = \frac{x_k}{2} + \frac{\alpha}{2x_k}$$

divisione

$$\frac{1}{7}:\ \frac{1}{x} - 7 = 0 \ \Rightarrow\ x_{k+1} = x_k - \frac{\frac{1}{x_k} - 7}{-\frac{1}{x_k^{\,2}}} = x_k + x_k - 7x_k^{\,2} = 2x_k - 7x_k^{\,2}$$

Esempio:

$x^2 - 2 = 0 \Rightarrow x^* = \pm\sqrt{2}$. La radice positiva è $\sqrt{2} = 1.41421356237310...$ localizzata in $[1,2]$. Confrontare il metodo di bisezione e il metodo di Newton per approssimare la radice positiva x^*, imponendo $[a_0, b_0] = [1,2]$ e $x_0 = 1$.

Per il metodo di Newton si ricava $x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^2 - 2}{2x_k} = \frac{1}{2}x_k + \frac{1}{x_k} = \frac{x_k}{2} + \frac{1}{x_k}$.

k	x_k^{BIS}	e_k^{BIS}	x_k^{NEW}	e_k^{NEW}
1	1.5	$8.6e-02$	1.5	$8.6e-02$
2	1.25	$2.5e-01$	1.41666666666667	$2.5e-03$
3	1.375	$3.9e-02$	1.41421568927451	$2.1e-06$
4	1.4375	$2.3e-02$	1.41421356237469	$1.6e-12$
5	1.40625	$7.9e-03$	1.41421356237313	"0"
...				
14	1.41424560	$3.2e-05$		

Sottolineate sono le cifre esatte ad ogni passo.

Il metodo di Newton è globalmente convergente? In generale no.

Esempio:

Sia $f(x) = \arctan(x)$. Applicare il metodo di Newton per risolvere l'equazione $f(x) = 0$ ponendo $x_0 = 1$; $x_0 = 1.3917...$; $x_0 = 1.46$.

Banalmente, $x^* = 0$ è la soluzione esatta. Le tre stime iniziali della soluzione esatta sono apparentemente tutte ragionevolmente vicine a x^*.

Con $x_0 = 1$ non ci sono problemi e in pochi passi il metodo converge alla soluzione esatta.

Con $x_0 = 1.3917...$ si genera un loop infinito fra i valori $x_0 = x_2 = x_4 = ...$ e $-x_0 = x_1 = x_3 = ...$ Il metodo chiaramente NON converge. Il valore scelto per x_0 è, infatti, esattamente quello che si ottiene risolvendo la seguente equazione:

$$x_1 = x_0 - \frac{\arctan(x_0)}{\frac{1}{1 + x_0^2}}$$

$$-x_0 = x_0 - \arctan(x_0)(x_0^2 + 1).$$

$$\arctan(x_0) = \frac{2x_0}{1 + x_0^2}$$

Con $x_0 = 1.46$ il metodo diverge oscillando fra valori positivi e negativi.

I due teoremi seguenti danno delle condizioni di convergenza per il metodo di Newton.

Teorema: sia $f \in C^2[a,b]$ chiuso e limitato. Se:

- $f(a)\cdot f(b)<0$, cioè fra a e b c'è almeno uno zero della funzione;
- $f'(x)>0 \quad \forall x\in[a,b]$ oppure $f'(x)<0 \quad \forall x\in[a,b]$, cioè la funzione è monotona;
- $f''(x)\geq 0 \quad \forall x\in[a,b]$ oppure $f''(x)\leq 0 \quad \forall x\in[a,b]$, cioè la funzione non cambia concavità in $[a,b]$;
- $\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right|<b-a$ e $\left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right|<b-a$, cioè le tangenti condotte dagli estremi dell'intervallo $[a,b]$ intersecano l'asse delle ascisse all'interno dell'intervallo stesso;

allora $f(x)=0$ ha una e una sola radice x^* in $[a,b]$ e il metodo di Newton converge a x^* $\forall x_0\in[a,b]$.

Teorema degli estremi di Fourier: sia $f\in C^2[a,b]$ chiuso e limitato. Se:

- $f(a)\cdot f(b)<0$, cioè fra a e b c'è almeno uno zero della funzione;
- $f'(x)>0 \quad \forall x\in[a,b]$ oppure $f'(x)<0 \quad \forall x\in[a,b]$, cioè la funzione è monotona;
- $f''(x)\geq 0 \quad \forall x\in[a,b]$ oppure $f''(x)\leq 0 \quad \forall x\in[a,b]$, cioè la funzione non cambia concavità in $[a,b]$;

allora $f(x)=0$ ha un'unica radice x^* in $[a,b]$ e il metodo di Newton converge a x^* $\forall x_0\in[a,b]$ tale che $f(x_0)\cdot f''(x_0)>0$.

Metodi Newton–like

Il metodo di Newton è molto costoso poiché è necessario valutare $f(x_k)$ e $f'(x_k)$ ad ogni passo. Variando il metodo è possibile approssimare la derivata prima e non calcolarla.

Uno di questi metodi "quasi–Newton" si basa sull'approssimazione della derivata prima mediante le <u>differenze in avanti o all'indietro</u>. Nel caso di approssimazione della $f'(x_k)$ con differenze in avanti si ha

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

Chiaramente questo metodo è vantaggioso in caso di sistemi di equazioni non lineari. Con una sola equazione, invece, è più costoso dal punto di vista computazionale del metodo di Newton non modificato. Con un h sufficientemente piccolo si ottiene un ordine di convergenza pari a $p=2$.

Un altro di questi metodi basati sul metodo di Newton è quello che si definisce <u>metodo delle secanti</u>. In questo caso la derivata prima viene approssimata con

$$f'(x)\cong\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}.$$

Il vantaggio principale di questo metodo è il fatto che sfrutta risultati già noti, infatti a regime si necessita di una sola valutazione di funzione, in quanto l'altra proviene dall'iterata immediatamente precedente. I due svantaggi più significativi sono il fatto che è necessario stimare due valori iniziali, x_0 e x_1, e il fatto che l'ordine di convergenza non è più tale da garantire una convergenza quadratica, ma solamente superlineare:

$$p = \frac{1+\sqrt{5}}{2}.$$

Tale valore, che si trova nell'intervallo $[1,2]$, è legato alla sezione aurea di un segmento e alla successione di Fibonacci.

Test di arresto per il metodo di Newton

Occorre stabilire quando fermare le iterazioni.

È possibile imporre una condizione di tipo relativo

$$\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} \leq \text{tolleranza}_x$$

dove la tolleranza è fissata dall'utente, come si è già visto a proposito dei sistemi lineari. Tuttavia questa condizione non funziona in caso di elevate derivate prime. Infatti, iterate vicine NON implicano la vicinanza alla soluzione cercata.

È possibile altresì considerare una condizione di tipo assoluto

$$|f(x_k)| \leq \text{tolleranza}_f$$

dove la tolleranza è fissata dall'utente. Questa condizione presenta dei problemi se la derivata prima diventa molto piccola, ossia se la funzione è molto "piatta".

Per evitare di bloccare le iterazioni in punti che non sono assolutamente la soluzione cercata, è necessario garantire di non cadere in uno dei casi critici per le condizioni sopra esposte. In altre parole, per fermarsi in sicurezza, si impone che entrambe le condizioni debbano essere verificate affinché il processo iterativo venga interrotto.