Appunti dalle lezioni di Calcolo Numerico

Mario Putti
Dipartimento di Matematica – Università di Padova

2 luglio 2016

Indice

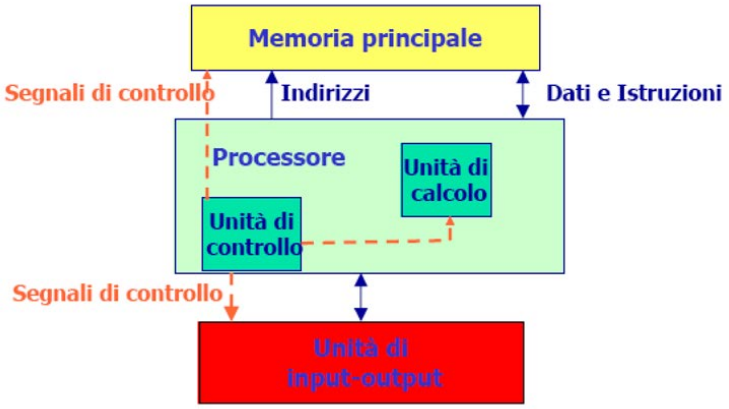


Figura 1.1: Descrizione schematica delle componenti di un computer dal punto di vista del Calcolo Numerico

1 Come sono fatti gli elaboratori

1.1 Le componenti principali di un calcolatore elettronico

Un calcolatore elettronico è formato da un grande numero di componenti integrate tra di loro in maniera assai complessa. Come sono fatte e come interagiscono le diverse componenti, pur essendo una materia importante, non è per‘ rilevante ai fini del funzionamento numerico dei sistemi di calcolo. Per cercare di semplificazione si sceglie qui di dare una descrizione assai sommaria e superficiale delle componenti principali di importanza nelle applicazioni numeriche. Dala Figura 1.1, che mostra questa descrizione schematica, possiamo individuare tre componenti fondamentali: la *Memoria*, il *Processore*, e l'unità *Input-Output* o *I/O*. Tali componenti sono collegate da frecce che indicano lo scambio di informazioni sotto forma di *Dati e Istruzioni*, *Segnali di controllo*, *Indirizzi*.

1.1.1 Il processore

Il processore (o CPU, Central Processing Unit) è il cuore del computer, ovvero la componente che controlla tutte le altre unità e che esegue i calcoli numerici; la memoria è il dispositivo che contiene tutti i dati e le istruzioni; il sistema di I/O serve per poter colloquiare con la macchina. Bisogna pensare alla CPU come un sistema che esegue ciclicamente tre passi: 1. prende dati e istruzioni dalla memoria (fase di $fetch$); 2. li interpreta secondo un linguaggio prestabilito (fase di *decode*); 3. esegue istruzioni sui dati presi (fase di *execute*). Questo insieme di passi è ripetuto a intervalli regolari scanditi da una componente chiamata il *clock* (Fig. 1.2, sinistra).

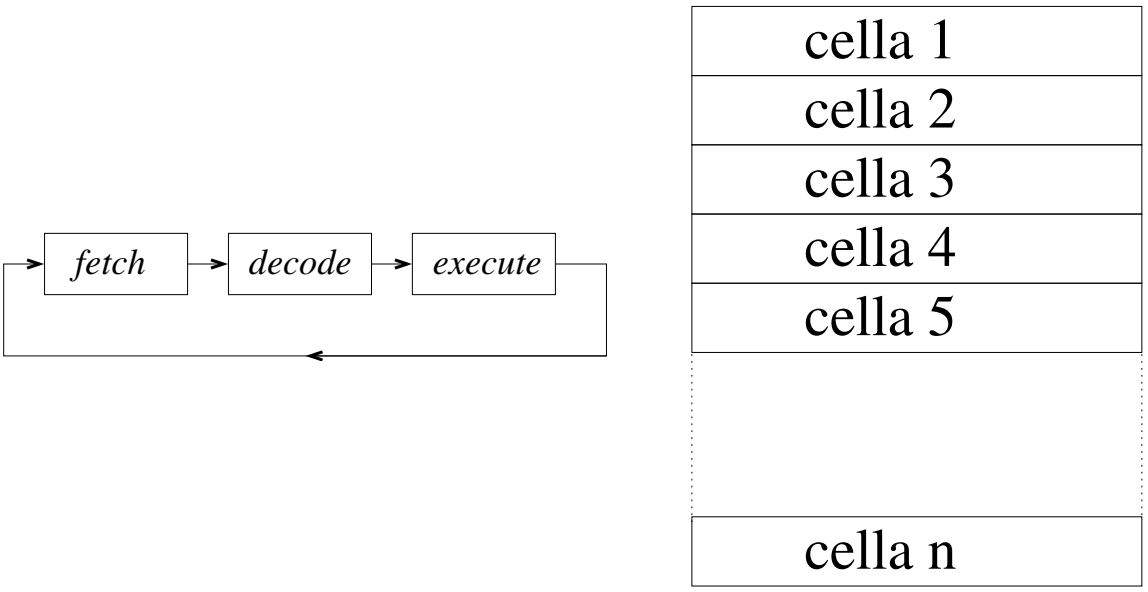


Figura 1.2: Organizzazione sequenziale del ciclo di una CPU (sinistra) e della memoria di un computer (destra)
.

Nei computer moderni il clock lavora a diversi GHz, per cui i tre passi vengono ripetuti diversi milioni di volte al secondo (1 GHz = 1×10^6 cicli/secondo), ogni volta però con dati e istruzioni che possono essere diversi.

1.1.2 La memoria

La memoria serve, come dice la parola, per memorizzare e rendere disponibile in qualsiasi istante dati e istruzioni[1]. Essa può essere pensata come un insieme di celle di dimensione costante che servono per memorizzare un singolo dato o istruzione. Ogni cella è *indirizzabile*, cioè è individuata univocamente e il suo contenuto può essere preso *fetched* e usato nella CPU oppure può essere variato per immagazzinare un nuovo dato. La rappresentazione in Figura 1.2 a destra può essere usata per immaginare come la memoria possa essere organizzata logicamente, anche se la realtà elettronica è diversa.
L'unità di misura dell'informazione è il cosidetto *bit*, che è definito come la più piccola parte di informazione che viene usato per formare il dato. Un bit può essere pensato

[1]Il primo computer moderno viene generalmente identificato dal fatto che appunto sia i dati che il programma erano memorizzati internamente. Tale idea, originale di John von Neumann [7] scaturite dalle idee teoriche di Alan Turing [6] sono alla base dell'architettura di calcolatori attuali, chiamata architettura di von Neumann.

come una cifra binaria, il cui utilizzo concreto sarà visto più avanti, che può assumere i valori binari zero o uno (0,1). Per questioni tecnologiche, i bit si raggruppano a 8 a 8 formando così il *byte* (= 8 bit). Le unità di misura successive cercano di seguire lo standard del Sistema Internazionale sostituendo però il fattore 1000 con 1024, cioè la potenza di 2 più vicina a 1000. In questo modo 1 kB (1 kilobyte) = 1024 byte, 1 MB (1 megabyte) = 1024 kB, 1 GB (1 gigabyte) = 1024 MB, 1 TB (1 Terabyte) = 1024 GB, eccetera. Bisogna stare attenti perchè per questioni commerciali alcune unità di misura sono in bit e non in bytes. Ad esempio, la velocità di trasmissione dei dati attraverso una rete si misura in Mbit = 1/8 MBytes! Bisogna quindi utilizzare le parole "bit" e "bytes" per evitare ambiguità.

Allo stesso modo, in alcuni settori (ad esempio costruttori di hard-disk) usano i prefissi "kilo", "mega", etc, come multipli di 1000 e non di 1024. Questo è il motivo per cui un disco fisso da 100 GB

Una cella di memoria è anche chiamata un *word*, o parola, ed è formata, nei computer moderni, da 64 bit, numerati da destra a sinistra da 0 a 63. Computer meno recenti hanno *word* a 32 bit, ma nella realtà si tende a dimenticare che ci sono moltissimi computer di tipo diverso in circolazione. Basti pensare ai telefoni cellulari, che altro non sono che dei computer con processori relativamente potenti che possono avere *word* anche a 32 o addiritura 16 bit. Per non parlare poi di applicazioni specializzate, quali data-loggers, eccetera. Per quello che ci riguarda, però, noi faremo sempre riferimento a computer che utilizzano *word* a 64 bit.

Ovviamente, ci manca ora un meccanismo con cui memorizzare le informazioni all'interno di ogni singola cella. Tale meccanismo verrà discusso parzialmente nel paragrafo successivo dedicato alla rappresentazione interna dei numeri.

1.1.3 Unità di Input/Output

Ai fini della nostra comprensione dell'architettura di un computer, le unità di Input/Output non sono altro che le strutture hardware necessarie per interloquire con la macchina, ad esempio lo schermo e la tastiera. Nella realtà informatica si intende per I/O anche tutte le apparecchiatura per memorizzare in maniera permanente le informazioni, e qundi i cosidetti dischi fissi, i supporti magnetici, i supporti ottici (CDROM e DVDROM), eccetera. Noi però adottiamo una visione leggermente diversa, più aderente al dettato di von Neumann, che verrà spiegata nel paragrafo successivo a quello della rappresentazione dei numeri all'elaboratora. Pertanto, continuiamo a pensare alle unità I/O come quelle unità che ci permettono di colloquiare con il computer.

1.2 Le numerazioni nondecimali

Prima di passare alla rappresentazione interna dei numeri all'elaboratore bisogna introdurre la possibilità di rappresentare numeri con basi diverse. In tutta generalità un numero "decimale" a può essere rappresentato con la seguente notazione:

$$a = a_n N^n + a_{n-1} N^{n-1} + \ldots + a_2 N^2 + a_1 N + a_0 + a_{-1} N^{-1} + \ldots + a_{-r} N^{-r}, \quad (1.1)$$

con a_j un numero intero tale che $0 \leq a_j \leq N-1$, e con $n > 0$ e $r > 0$, quest'ultimo possibilmente infinito (numero con infinite cifre decimali. Il numero intero $N > 1$ è detta la base della rappresentazione. Si può dimostrare che tale rappresentazione è univoca e può rappresentare teoricamente qualsiasi numero. Ci basti però fare un esempio per convincerci della ragionevolezza della frase precedente.

Esempio 1.1. Il numero $a = 1234.5678$ si può scrivere come:

$$a = 1 \times 10^3 + 2 \times 10^2 + 3 \times 10 + 4 + 5 \times 10^{-1} + 6 \times 10^{-2} + 7 \times 10^{-3} + 8 \times 10^{-4},$$

dove si è utilizzata la (1.1) con $N = 10$.

E' intuitibile dall'esempio precedente l'unicità della rappresentazione (1.1), come è immediato pensare che noi siamo abituati a usare e a far di conto con i numeri "decimali", cioè espressi tramite la base $N = 10$. E peró altrettanto intuibile come sia possibile usare una base diversa da quella decimale senza difficoltà teoriche [2]. Da quanto abbiamo visto in precedenza, i calcolatori usano il bit binario questioni puramente tecnologiche, per cui dobbiamo abituarci ad usare la base $N = 2$ per poter apprezzare meglio le proprietà numeriche di un elaboratore elettronico. Nel caso $N = 2$ i coefficienti del polinomio (1.1) assumono i valori $\{0, 1\}$ e quindi è ovvio pensare di usare la base binaria per la rappresentazione dei numeri all'elaboratore. Vediamo ora, con qualche esempio, come è possibile passare da una base ad un'altra. Dapprima notiamo di nuovo che noi siamo abituati a fare i conti in base $N = 10$, passare dalla base binaria alla base decimale risulta facile.

Esempio 1.2. Si trasformi il numero $(10011010010.1)_2$ in base decimale. Usiamo la (1.1) per ottenere:

$$2^{10} + 2^7 + 2^6 + 2^4 + 2^2 + 2^{-1} = 1024 + 128 + 64 + 16 + 2 + 0.5 = 1234.5.$$

[2] Ci sarebbero ovviamente difficoltà importanti per noi a utilizzare una base diversa dalla decimale, alla quale siamo stati abitutati fin da bambini. Qualcuno sostiene che il motivo della facilità dell'uso della base 10 deriva dal fatto cha abbiamo 10 dita!

Invece è più complicato passare dalla base 10 alla base 2. Vogliamo quindi ricavare una procedura per passare dalla base N alla base $M \neq N$, e cioè

$$\begin{aligned}(a)_N &= a_n N^n + a_{n-1}N^{n-1} + \ldots + a_2 N^2 + a_1 N + a_0 \\ &\quad + a_{-1}N^{-1} + \ldots + a_{-r}N^{-r} = \\ (a)_M &= b_p M^p + b_{p-1}M^{p-1} + \ldots + b_2 M^2 + b_1 M + b_0 \\ &\quad + b_{-1}M^{-1} + \ldots + b_{-s}M^{-s}\end{aligned}$$

Si noti innanzitutto che se $(a)_N$ è esprimibile in base N con un numero finito di cifre, non è detto che sia così per lo stesso numero $(a)_M$ espresso in base M. Riscriviamo ora $(a)_N$ separando la parte intera dalla parte frazionaria [3]:

$$a_{int} = a_n N^n + a_{n-1}N^{n-1} + \ldots + a_2 N^2 + a_1 N + a_0, \tag{1.2}$$

$$a_{fraz} = a_{-1}N^{-1} + \ldots + a_{-r}N^{-r}. \tag{1.3}$$

Concentriamoci dapprima su a_{int}, pensando di lavorare con un'aritmetica in base n. Dividendo a_{int} per il numero M otteniamo:

$$\begin{aligned}a_{int}/M &= (a_n N^n + a_{n-1}N^{n-1} + \ldots + a_2 N^2 + a_1 N + a_0)/M \\ &= a_n/MN^n + a_{n-1}/MN^{n-1} + \ldots + a_2/MN^2 + a_1/MN + a_0/M \\ &= a'_n N^n + a'_{n-1}N^{n-1} + \ldots + a'_2 N^2 + a'_1 N + a'_0 + \pmod{(a_0, M)},\end{aligned}$$

dove $\bmod(a_0, M)$ indica la funzione che restituisce il resto della divisione intera tra a_0 e M, che ovviamente soddisfa alla proprietà $0 \leq \bmod(a_0, M) < M$. E' quindi chiaro che tale cifra è, una volta trasformata in binario, la cifra b_0 che cerchiamo. Continuando a dividere per M si ottengono le altre cifre $b_1, b_2, \ldots, b_p$ in modo analogo. Si noti che generalmente $p \neq n$.

Al contrario, per la parte frazionaria si vede immediatamente che le cifre $b_{-1}, b_{-2}, \ldots$ si possono ottenere moltiplicando successivamente per M la parte frazionaria.

Esempio 1.3. Calcolare la rappresentazione in base 2 del numero $a = 1234.5$. Dividiamo la parte intera dalla parte frazionaria. Per la parte intera costruia-

[3] Si noti che useremo sempre il "punto decimale" per separare la parte intera da quella frazionaria, in accordo con lo standard internazionale. Non useremo invece mai la maldestra abitudine di adattarsi alle convenzioni nazionali.

mo la seguente tabella ottenuta dividendo ogni volta il numero di sinistra per 2:

parte intera	
$1234 : 2 = 617$	0
$617 : 2 = 308$	1
$308 : 2 = 154$	0
$154 : 2 = 77$	0
$77 : 2 = 38$	1
$38 : 2 = 19$	0
$19 : 2 = 9$	1
$9 : 2 = 4$	1
$4 : 2 = 2$	0
$2 : 2 = 1$	0
$1 : 2 = 0$	1

Parte frazionaria

$0.5 \times 2 = 1.0$	1

Il numero in base due viene costruito leggendo le cifre binarie (dal basso per la parte intera, e dall'alto per la parte frazionaria) ottenendo:

$$(a)_2 = 10011010010.1$$

Esempio 1.4. trasformiamo il numero $a = 0.1$ da base 10 a base 2.

$0.1 \times 2 = 0.2$	0
$0.2 \times 2 = 0.4$	0
$0.4 \times 2 = 0.8$	0
$0.8 \times 2 = 1.6$	1
$0.6 \times 2 = 1.2$	1
$0.2 \times 2 = 0.4$	0
$0.4 \times 2 = 0.8$	0
$0.8 \times 2 = 1.6$	1
$0.6 \times 2 = 1.2$	1
$\ldots$	$\ldots$

Il numero $(a)_2$ è dunque un numero periodico pari a $(a)_2 = 0.000\overline{1100}$. Questo è un esempio di un numero che in base 10 (0.1) è caratterizzato da un numero finito di cifre, mentre in base 2 ha infinite cifre.

1.3 La rappresentazione interna dei numeri all'elaboratore

Questo capitolo è preso dal manuale della SUN Microsystems intitolato Numerical Computation Guide [5], che costituisce una utile e chiara guida di riferimento per chi volesse approfondire l'argomento.
Come abbiamo visto in precedenza, un *word* può essere a 32 o 64 bits, con i 32 bit ormai in uso solo per compatibilità retroattiva. Talchè è necessario predisporre

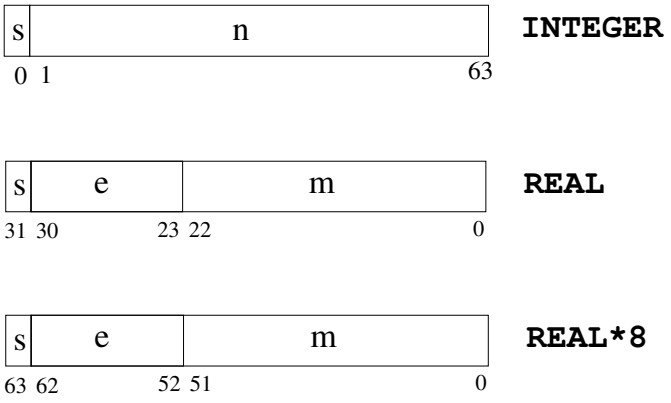


Figura 1.3: Struttura della rappresentazione dei numeri interi (`INTEGER`) e reali (`REAL`, 32 bit=4 byte, o `REAL*8`, 64 bit = 8 byte) secondo lo standard IEEE 754.

un modello di rappresentazione dei numeri (interi e reali) che usufruisca al meglio della lunghezza di un *word*. Ogni costruttore implementa i propri modelli e non esistono standards universali. Tra tutte le possibilità praticamente usate, lo standard IEEE 754 [1] è considerato da tutte le case e adottato quantomeno su richiesta dell'utente (tramite opportuni flags del compilatore). Per questo motivo descriviamo qui velocemente questo modello ricordando che eventuali variazioni e loro effetti sulla precisione numerica dell'elaboratore in uso vanno verificati di volta in volta.

1.3.1 IEEE 754: numeri interi

Un numero intero è generalmente rappresentato da b=32 o b=64 bits[4] Il numero è quindi una sequenza di bits così fatta. Il primo bit (indicato col simbolo s) è riservato al segno del numero, per cui s=0 indica un numero positivo, s=1 un numero negativo. I rimanenti n (n=31 o n=63) bits sono dedicati al numero stesso (vedi Figura 1.3). E' facile quindi calcolare il valore massimo (in modulo) rappresentabile da questo modello. Tale valore si raggiunge quando i bits da 1 a 31 sono tutti 1, e vale:

$$1 \times 2^0 + 1 \times 2^1 + \ldots + 1 \times 2^{n-1} = \sum_{i=0}^{n-1} 2^i = \frac{1-2^n}{1-2} = 2^n - 1 \qquad (1.4)$$

[4] Il valore b=32 è spesso indicato `int` nei linguaggi `C` e `C++` , é indicato `integer` in linguaggio `Fortran` . Purtroppo non esiste un vero standard e ogni produttore hardware o software può scegliere liberamente. Per evitare problemi di interoperabilitià, è quindi opportuno dichiarare ogni variabile esplicitamente a seconda che si voglia b=32 o b=64 con le istruzioni `int32` o `int64` in `C` o `C++` e le istruzioni `integer*4` e `integer*8` in `Fortran` .

che per n=31 fornisce il valore $I_{max,32} = \pm 2.147.483.648$. E' quindi impossibile la rappresentazione di valori interi maggiori di $I_{max,32}$. Un problema che potrebbe sorgere durante le operazioni con questa rappresentazione è denominato "integer overflow" e purtroppo non dà luogo a segnalazione di errori da parte del computer: l'addizione di due numeri la cui somma è maggiore di $I_{max,32}$ fornisce un risultato sbagliato e imprevedibile. Si consideri per esempio un'aritmetica a 4 bit ($s = 1$ e $n = 3$). Effettuiamo la somma tra il numero 7+2=9 in notazione binaria:

$$\begin{array}{ll} 0111 & + \\ 0010 & = \\ \hline 1001 & \end{array}$$

il cui risultato è -1 secondo la rappresentazione "integer" descritta sopra ($(1001)_2 = (-1)_{10}$). E' quindi opportuno avere sempre presente il valore massimo (o minimo) rappresentabile e lavorare sempre con valori lontani da esso. E' spesso utile lavore con interi a 64 bits (`long long` oppure `integer*8`) quando ci si avvicina al valore $I_{max,32}$ in considerazione del fatto che $I_{max,64} \approx \text{int}(9.2 \times 10^{18})$.

1.3.2 IEEE 754: numeri reali

Nel caso di numeri reali, il modello di rappresentazione (sempre in base binaria) utilizza la notazione in virgola mobile normalizzata. Secondo questa notazione, un numero in base decimale si può scrivere sempre come:

$$(a)_{10} = \pm 0.m \times 10^n$$

dove $0.1 \leq m < 1$ e il valore di n viene aggiustato in modo da soddisfare la condizione su m. Le cifre che compongono m individuano la *mantissa* e costituiscono le cifre significative della rappresentazione.

Esempio 1.5.

$$(1234.5)_{10} = 1.2345 \times 10^3 = 0.12345 \times 10^4$$
$$(0.000012345)_{10} = 1.2345 \times 10^{-5} = 0.12345 \times 10^{-4}$$

Usando la notazione binaria, un numero $\neq 0$ può essere scritto come:

$$(a)_2 = (-1)^s \times 2^{e-b} \times 1.f$$

dove s è il bit del segno del numero, $e-b$ è l'esponente con deviazione (o *bias*) b, che discuteremo più avanti, e f è la mantissa. Si noti che non si fa l'ipotesi che il numero sia sempre diverso da zero per cui si può evitare di memorizzare la cifra 1 della parte

32 bit		64 bit	
intervallo di variazione di e, f, b	Rappresentazione del numero	intervallo di variazione di e, f, b	Rappresentazione del numero
$0 < e < 255$ $b = 127$ $f > 0$	$(-1)^s \times 1.f \times 2^{e-b}$	$0 < e < 2047$ $b = 1023$	$(-1)^s \times 1.f \times 2^{e-b}$
$e = 0$ $f = 0$	$(-1)^s \times 0.0$ (zero con segno)	$e = 0$ $f = 0$	$(-1)^s \times 0.0$
$e = 255$ $s = f = 0$	+INF (infinito positivo)	$e = 2047$ $s = f = 0$	+INF
$e = 255$ $s = 1, f = 0$	-INF (infinito negativo)	$e = 2047$ $s = 1, f = 0$	-INF
$e = 255$ $s = 0, 1, f > 0$	NaN (Not-a-Number)	$e = 2047$ $s = 0, 1, f > 0$	NaN

Numeri "reali" a 32 bit			Numeri "reali" a 64 bit	
Nome	Rapp. interna	decimale	Rapp. interna	decimale
+0	0000 0...0	+0.0	0000 0...0	+0.0
-0	100 0...0	-0.0	1000 0...0	-0.0
1	0100 1111 1000 0...0	1.0	0100 1111 1111 0...0	1.0
2	0100 0...0	2.0	0100 0...0	2.0
N_{max}	0110 1111 0110 1...1	3.402E+38	0110 1111 1110 1...1	1.798e+308
N_{min}	0000 0000 0100 0...0	1.175E-38	0000 0000 0001 0...0	2.225e-308
N_{min}	0000 0000 0100 0...0	1.175E-38	0000 0000 0001 0...0	2.225e-308
$+\infty$	0011 1111 0100 0...0	Infinity	0011 1111 1111 0...0	Infinity
$-\infty$	1111 1111 0100 0...0	Infinity	1111 1111 1111 0...0	Infinity
Not-A-Number	0011 1111 1100 0...0	NaN	0011 1111 1111 0100 0...0	NaN

Tabella 1.1: Tabella in alto: schema riassuntivo dei valori che possono assumere e f e b in diversi casi. Tabella in basso: schema riassuntivo della sequenza binaria per numeri particolari secondo lo standard IEEE. Si veda Figura 1.3 per una rappresentazione grafica.

intera, e si aggiusta l'esponente opportunamente. Il bit che rappresenta la cifra 1 non memorizzata si chiama *hidden bit*. I numeri e e f sono memorizzati con formato intero senza segno (sono sempre positivi o nulli) con un numero di cifre diverso tra loro. Facciamo riferimento sempre alla Figura 1.3 per la localizzazione di s, e e f all'interno di una cella di memoria. Mentre ovviamente s vale sempre o zero o 1, bisogna distinguere i casi di *word* a 32 o 64 bit. Nel caso a 32 bit (chiamato anche *singola precisione* o `real*4` per indicare che le celle di memoria sono a 4 bytes) e è costituito da 8 bit (30÷23) e f da 23 bit (22÷0). Nel caso a 64 bit (chiamato *doppia precisione* o `real*8`) e è costituito da 11 bit e f da 53 bit.

Per avere sempre numeri positivi, e non memorizzare quindi il segno dell'esponente, si usa il cosidetto *bias*, o deviazione, che rappresenta il centro dell'intervallo di

variazione di e. Facendo i conti, nel caso a 32 bit $0 < e < 255$ e $b = 127$, mentre nel caso a 64 bit $0 < e < 2047$ e $b = 1023$. La tabella 1.1 mostra un riassunto schematico di quanto abbiamo descritto finora.

Esempio 1.6. Riprendiamo l'esempio 1.5. Per raprresentare il numero $a = (1234.5)_{10}$ nel formato previsto dallo standard IEEE-758 a 32 bit si devono calcolare i valori di s, e, e f.
Per fare questi calcoli, bisogna partire dalla rappresentazione binaria del numero, calcolata negli esempi 1.2 e 1.3, che vale $(a)_2 = 10011010010.1$. Questo numero si scrive in virgola mobile normalizzata (usando basi miste) come:

$$a = (1234.5)_{10} = (1.00110100101)_2 \times (2^{10})_{10}.$$

Si noti come nell'espressione precedente ogni numero è espresso con indicando esplicitamente la base di rappresentazione, per cui la mantissa è stata scritta in base binaria mentre la parte relativa all'esponenziale binario è stata scritta in base decimale.
Il numero a è positivo e quindi si ottiene immediatamente $s = 0$. Tenendo conto che la deviazione è $b = (127)_{10}$, l'esponente vale:

$$e - b = (10)_{10}; \qquad e = (10 + b)_{10} = (137)_{10} = (10001001)_2,$$

mentre la mantissa è data da:

$$f = (1.00110100101)_2,$$

e quindi, tenendo conto dell"'hidden bit", per cui la cifra 1 a sinistra del punto frazionario nella precedente espressione non è memorizzata, la rappresentazione completa è la seguente sequenza di bit:

s	e	f
0	10001001	00110100101000000000000

1.3.3 La precisione di macchina

Per completare la descrizione della rappresentazione di un numero all'elaboratore, bisogna considerare che il fatto di avere un numero finito di cifre per memorizzare la mantissa porta necessariamente ad approssimazioni non sempre predicibili in maniera esatta. E' quindi di fondamentale importanza studiare l'errore massimo che si può commettere nella rappresntazione, per poi andare a verificare come questo errore si propaga nelle operazioni.
Abbiamo già visto che le cifre memorizzate formano le "cifre significative". Dobbiamo ora definire la *precisione di macchina* ovvero la *machine epsilon*. Nell'aritmetica

dell'IEEE si assume che il numero viene "arrotondato" alla cifra significativa più vicina. La cifra soggetta ad arrotondamento è nella m-esima posizione della mantissa e verrà arrotondata a 1 se la $m+1$-esima cifra è 1 o a 0 se la $m+1$-sima cifra è zero. Ne consegue che l'errore massimo che si commette è:

$$\epsilon = \frac{1}{2}2^{-(f-1)}.$$

Usando questa formula, nel caso di singola precisione la precisione di macchina è $\epsilon_{32} = 2^{-24} \approx 5.96e{-}08$ mentre per la doppia abbiamo $\epsilon_{64} = 2^{-53} \approx 1.11e{-}16$. Si noti che nello scrivere questi numeri si è utilizzata la notazione tipicamente informatica detta EXP, per cui il numero $5.96e-08$ equivale a 5.96×10^{-08}. Si dice quindi che in singola precisione si hanno circa 8 cifre decimali significative, mentre in doppia precisione le cifre significative diventano 16.
Per completare la trattazione, bisogna capire quali sono i numeri massimi e minimi rappresentabili in singola e doppia precisione. Per fare questo, dobbiamo calcolare i massimi e i minimi valori assumibili dalla mantissa e dall'esponente nei due casi. Con facili conti si ottiene:

$$\begin{aligned}
|A_{max,32}| &= (2 - 2^{-23}) \times 2^{-126} \approx 3.40282E + 38 \\
|A_{min,32}| &= 2 \times 2^{-127} \approx 1.17549E - 38 \\
|A_{max,64}| &= (2 - 2^{-52}) \times 2^{-1023} \approx 1.7977E + 308 \\
|A_{min,64}| &= 2 \times 2^{-1023} \approx 2.2251E - 308
\end{aligned}$$

1.4 Algoritmo e schema numerico

Si vuole puntualizzare in questo paragrafo la nomenclatura che si utilizza normalmente in calcolo numerico. In particolare, quando si parla di *schema* numerico si intende un'equazione o un insieme di equazioni che descrivono matematicamente in maniera compiuta le operazioni che devono essere fatte dall'elaboratore elettronico per risolvere un problema matematico. Un *algoritmo* è invece un insieme di istruzioni descritte da formule matematiche che mostrano come uno schema numerico può essere "implementato" in un linguaggio di programmazione.
Per esemplificare meglio cosa intendiamo, si consideri il seguente problema matematico:

Problema 1.7. Si vuole calcolare l'integrale:

$$I_n = \frac{1}{e}\int_0^1 x^n e^x \, dx, \tag{1.5}$$

per ogni valore di n.

Per ricavare uno schema numerico, applichiamo il il teorema di integrazione per parti ottenendo:

$$I_n = \frac{1}{e}\left(x^n e^x \|_0^1 - \int_0^1 n x^{n-1} e^x \, dx\right) = 1 - n\frac{1}{e}\int_0^1 x^{n-1} e^x \, dx$$

da cui risulta:

$$I_n = 1 - nI_{n-1} \tag{1.6}$$

Quindi possiamo rappresentare lo schema numerico per il calcolo dell'integrale I_n (eq. (1.5)) con la seguente equazione:

$$\tilde{I}_0 = \frac{e-1}{e} \tag{1.7}$$

$$\tilde{I}_n = 1 - n\tilde{I}_{n-1} \qquad n = 1, 2, \ldots N \tag{1.8}$$

Si noti che in (1.7) abbiamo usato il simbolo $\tilde{I}_n$ per distinguere l'approssimazione numerica dal valore vero I_n.
Si può quindi pensare il seguente algoritmo:

ALGORITHM INT_INSTABILE

1. Porre $\tilde{I}_0 = (e-1)/e$; inizializzare $NMAX$ (ad es. 20).
2. FOR $k = 1, \ldots, NMAX$

$$\tilde{I}_k = 1 - k\tilde{I}_{k-1}$$

END FOR

1.5 Instabilità e malcondizionamento

Rappresentiamo astrattamente un problema matematico come:

$$\mathcal{F}(x, d) = 0$$

dove $\mathcal{F}$ rappresenta l'insieme di equazioni che rappresentano formalmente il problema, x rappresenta la variabile incognita che deve essere trovata, e d rappresenta l'insieme dei dati.
Uno schema numerico lo rappresentiamo nello stesso modo con:

$$\mathcal{F}_n(\tilde{x}, \tilde{d}) = 0$$

dove $\mathcal{F}_n$ rappresenta l'insieme di equazioni che rappresentano formalmente lo schema, $\tilde{x}$ rappresenta l'approssimazione della soluzione del problema matematico, e $\tilde{d}$ è la rappresentazione numerica dell'insieme dei dati.

Definizione 1.8. Si dice che il problema matematico è *ben posto* se la soluzione esiste ed è unica e se ad una variazione dei dati corrisponde una piccola variazione della soluzione. In altri termini, la soluzione deve essere una funzione continua dei dati del problema.

L'esistenza e unicità della soluzione sono condizioni ovvie per la solubilità del problema. Per quanto riguarda la proprietà di variazione continua della soluzione al variare dei dati, consideriamo che una perturbazione dei dati δ_d genera una perturbazione della soluzione δ_x. In termini matematici, il problema perturbato si traduce in:

$$\mathcal{F}(x + \delta_x, d + \delta_d) = 0$$

che è quindi *ben posto* se esiste un numero positivo ϵ tale per cui, data una variazione δ_d dei dati, la variazione della soluzione non è maggiore, in valore assoluto, di ϵ, e cioè:

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta(\epsilon) \text{ such that if } |\delta_d| < \delta \text{ then } |\delta_x| < \epsilon$$

1.5.1 Instabilità di uno schema

Definizione 1.9. Uno schema si dice *stabile* se gli errori (di rappresentazione o di arrotondamento o di qualsiasi altro tipo) che che si commettono all'aumentare del numero delle operazioni dello schema rimangono limitati, e quindi non si accumulano in maniera distruttiva per l'accuratezza del calcolo.

L'analisi numerica si occupa, tra l'altro, di studiare il comportamento degli schemi in modo da verificane le condizioni di stabilità e di accuratezza, in maniera tale da poter avere un controllo sulla bontà della soluzione numerica.

Esempio di schema instabile. Utilizzando lo schema (1.7) in un elaboratore a 32 bit (quindi con rappresentazione in singola precisione con 8 cifre decimali significative), si scopre che l'accuratezza del risultato risulta compromessa già a partire da piccoli valori di n (ad es. con n=6 l'errore è maggiore di 10^-2) e anche con un elaboratore a 64 bit (quindi con rappresentazione in doppia precisione con 16 cifre decimali significative) l'accuratezza degrada fortemente a partire da n=15 (si veda la Tabella 1.2.

	I_n	Errore	I_n	Errore	I_n a partire da I_{20}=0	Errore
0	0.63212056	1.17144E-09	0.632120559	9.99201E-16	0.632120559	6.66134E-16
1	0.3679	2.05588E-05	0.367879441	9.99201E-16	0.367879441	6.66134E-16
2	0.2642	4.11177E-05	0.264241118	9.99201E-16	0.264241118	3.33067E-16
3	0.2074	0.000123353	0.207276647	1.9984E-15	0.207276647	5.55112E-17
4	0.1704	0.000493412	0.170893412	7.99361E-15	0.170893412	2.498E-16
5	0.148	0.002467059	0.145532941	3.89966E-14	0.145532941	3.88578E-16
6	0.112	0.014802357	0.126802357	2.32009E-13	0.126802357	4.44089E-16
7	0.216	0.103616496	0.112383504	1.62101E-12	0.112383504	6.93889E-17
8	-0.728	0.828931967	0.100931967	1.2967E-11	0.100931967	4.85723E-16
9	7.552	7.460387707	0.091612293	1.16701E-10	0.091612293	6.77236E-15
10	-74.52	74.60387707	0.083877071	1.16701E-09	0.08387707	6.79595E-14
11	820.72	820.6426478	0.077352216	1.28371E-08	0.077352229	7.47263E-13
12	-9847.64	9847.711773	0.071773408	1.54045E-07	0.071773254	8.96713E-12
13	128020.32	128020.2531	0.0669457	2.00258E-06	0.066947703	1.16572E-10
14	-1792283.48	1792283.543	0.0627602	2.80362E-05	0.062732162	1.63201E-09
15	26884253.2	26884253.14	0.058596998	0.000420543	0.059017565	2.44802E-08
16	-430148050.2	430148050.3	0.062448027	0.006728681	0.055718954	3.91683E-07
17	7312516854	7312516854	-0.061616465	0.114387584	0.052777778	6.65861E-06
18	-1.31625E+11	1.31625E+11	2.109096362	2.058976507	0.05	0.000119855
19	2.50088E+12	2.50088E+12	-39.07283088	39.12055363	0.05	0.002277244
20	-5.00176E+13	5.00176E+13	782.4566175	782.4110726	0	0.04554489

Tabella 1.2: Calcolo dell'integrale (1.6) con lo schema (1.7) con calcoli in singola e doppia precisione e con lo schema (1.9) con calcoli in doppia precisione

E' possibile migliorare la situazione utilizzando uno schema diverso. Esprimiamo I_{n-1} in funzione di I_n ottenendo:

$$I_{n-1} = \frac{1 - I_n}{n} \tag{1.9}$$

Ossevando che

$$\lim_{n\to\infty} I_n = 0$$

si può pensare all'algoritmo seguente:

ALGORITHM INT_STABILE

1. Porre $I_0 = (e-1)/e$; inizializzare N (ad es. 20); porre $I_N = 0$.
2. FOR $k = N, \ldots, 1$

$$\tilde{I}_{k-1} = \frac{1 - \tilde{I}_k}{k} \tag{1.10}$$

   END FOR
3. IF $\left|I_0 - \tilde{I}_0\right| > \tau$
   aumentare il valore di N
   ripetere il ciclo 2

Analisi numerica dei due schemi Per studiare il motivo dell'instabilità dello schema si deve studiare il comportamento dell'errore ad ogni "iterazione", seguendo la definizione di stabilità data in 1.9. Per fare questo, definiamo l'errore come la differenza tra la soluzione numerica e la soluzione vera (chiamata anche analitica)[5]:

$$\epsilon_n = \tilde{I}_n - I_n.$$

Chiaramente risulterà

$$\tilde{I}_n = I_n + \epsilon_n,$$

che sostituita nello schema instabile (rappresentato da (1.9)) fornisce:

$$I_n + \epsilon_n = 1 - n(I_{n-1} + \epsilon_{n-1}).$$

[5]L'errore sarà sempre definito così, a meno di un segno che però non ci interessa perché a noi interesserà in realtà il valore assoluto dell'errore.

Notando quindi che vale la (1.6), la precedente equazione si semplifica in:

$$\epsilon_n = -n\epsilon_{n-1}$$

che fornisce una relazione per l'errore alle diverse iterazioni. Partendo da $n = 0$, si ottiene per induzione:

$$\epsilon_n = (-1)^n n!\epsilon_0,$$

da cui si vede che qualsiasi errore iniziale all'iterazione n viene amplificato di un fattore $n!$, dimostrando quindi che lo schema non verifica la condizione di stabilità 1.9. Lo schema (1.10) risulta invece stabile. Infatti, procedendo nello stesso modo, si ottiene subito la seguente sequenza di errori:

$$\begin{aligned}
\epsilon_N &= I_N \\
\epsilon_{N-1} &= -\frac{\epsilon_N}{N} \\
\epsilon_{N-2} &= \frac{\epsilon_N}{N(N-1)} \\
\epsilon_{N-3} &= -\frac{-\epsilon_N}{N(N-1)(N-2)} \\
&\dots
\end{aligned}$$

da cui si capisce immediatamente che l'errore iniziale ϵ_N diminuisce all'aumentare delle iterazioni, e quindi soddisfacendo alla definizione di schema stabile.

1.5.2 Problema malcondizionato

Definizione 1.10. Un **p**roblema si dice *malcondizionato* se piccole perturbazioni dei dati causano grandi variazioni dei risultati.

Per prima cosa, vogliamo sottolineare che mantre il concetto di stabilità si applica ad uno schema numerico, il concetto di malcondizionamento è una caratteristica di un problema matematico, non di uno schema. Esso traduce in termini numerici il concetto di "buona posizione" di un problema matematico.
Per vedere bene cosa succede ad un problema malcondizonato, si pensi ad un sistema lineare di due equazioni in due incognite, ad esempio:

$$3x + 2y = 2 \tag{1.11}$$
$$2x + 6y = -8. \tag{1.12}$$

Il problema matematico è quindi quello di trovare il punto (x, y) tale che le equazioni (1.11) e (1.12) sono simultanemante soddisfatte. La soluzione di tale problema è

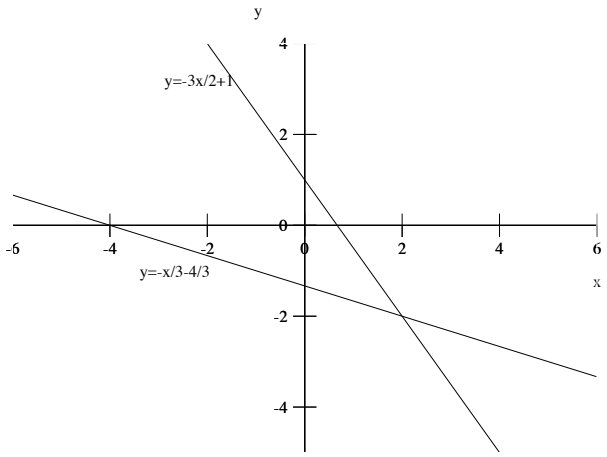


Figura 1.4: Interpretazione geometrica del sistema lineare (1.11) e (1.12)

$(x, y) = (2, -2)$. Questo sistema si può riscrivere dividendo la prima equazione per 2 e la seconda per 6:

$$y = -\frac{3}{2}x + 1 \tag{1.13}$$

$$y = -\frac{1}{3}x - \frac{4}{3}. \tag{1.14}$$

Questo sistema può essere interpretato geometricamente come il problema di trovare il punto di intersezione delle due rette rappresentate dalle equazioni (1.13) e (1.14), come si vede in Figura 1.4.
Proviamo ora a dare una perturbazione ai dati del nostro problema e vediamo come varia la soluzione. Nel piano (x, y) questo si traduce nel perturbare per esempio il termine noto della seconda equazione di un valore δ, quindi ottenendo una traslazione rigida verso il basso della retta, e vediamo che il punto di intersezione delle due rette si sposta di un valore $\epsilon \approx \delta$. Invece, se le due rette hanno pendenze non molto diverse tra di loro, rappresentate da sistema lineare ovviamente diverso, si vede che ad una perturbazione δ corrisponde uno spostamento della soluzione molto grande ($\epsilon \gg \delta$). Questo comportamento è tipico dei problemi malcondizionati, ed è visualizzato in figure 1.5.

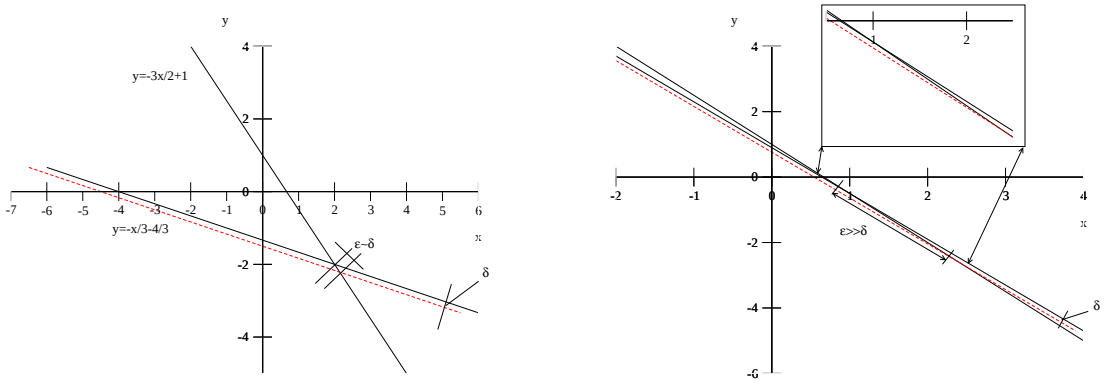


Figura 1.5: Interpretazione geometrica di un sistema lineare ben condizionato (grafico di sinistra) e di uno malcondizionato (grafico di destra)

2 La soluzione di equazioni nonlineari

Si consideri funzione algebrica o trascendente $f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$, cioè una funzione prende valori reali e ritorna valori reali ($x \in \mathbb{R}$ e $f(x) \in \mathbb{R}$). Il problema di risolvere equazioni lineari si scrive quindi:

Problema 2.1. Trovare $x \in \mathbb{R}$ tale che

$$f(x) = 0 \tag{2.1}$$

Una soluzione del problema, se esiste, è quindi il numero reale indicato in generale con $x = \xi$ tale che $f(\xi) = 0$. Quindi $x = \xi$ si dice soluzione (o radice o zero) dell'equazione nonlineare. Ci possono essere più radici di una equazione, cioè dati $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$, si avrà $f(\xi_1) = 0; f(\xi_2) = 0; \ldots; f(\xi_n) = 0$. In generale, la radice di una equazione, anche nelle condizioni più favorevoli di continuità della funzione f, non può essere trovata analiticamente se non in casi particolari (si pensi alle radici di polinomi di grado maggiore di 4). E' quindi necessario ricorrere a tecniche numeriche. In questo caso la prima cosa da verificare è che il problema sia ben posto, e cioè la soluzione esista, sia unica, e sia dipendente in maniera continua dai dati del problema. Le prime due condizioni dovranno essere verificate caso per caso, mentre si può dimostrare, ed è anche intuitivo, che l'ultima condizione per la buona posizione del problema dipende dal grado di continuità della funzione f.
Assumendo il problema ben posto, è del tutto evidente che, a causa della limitatezza della rappresentazione dei numeri reali all'elaboratore, non sarà possibile trovare la radice esatta, ma ci si dovrà accontentare di trovare un'approssimazione alla soluzione vera ξ. Si dovrà quindi cercare di trovare quel numero $\hat{x}$ che sia "sia sufficientemente vicino a ξ per i nostri scopi". In altri termini, fissata un'accuratezza del calcolo desiderata, e cioè fissata una *tolleranza tol*, vogliamo trovare quel numero $\hat{x}$ che approssimi la radice a meno di *tol*:

$$|\xi - \hat{x}| < tol$$

La grandezza $\epsilon = \xi - \hat{x}$ è chiamata l'*errore*. La conoscenza dell'errore richiede conoscenza della radice ξ. L'errore non ha quindi valore pratico, ma è molto utile nello studio delle proprietà degli schemi che andremo a studiare. Al posto della condizione sull'errore potremmo richiedere che:

$$|f(\hat{x})| < tol$$

e cioè che il *residuo nonlineare* sia minore della tolleranza. Ovviamente quest'ultima condizione non garantisce che la soluzione numerica $\hat{x}$ approssimi effettivamente la radice, ma rappresenta solamente una condizione necessaria. Si veda per esempio la

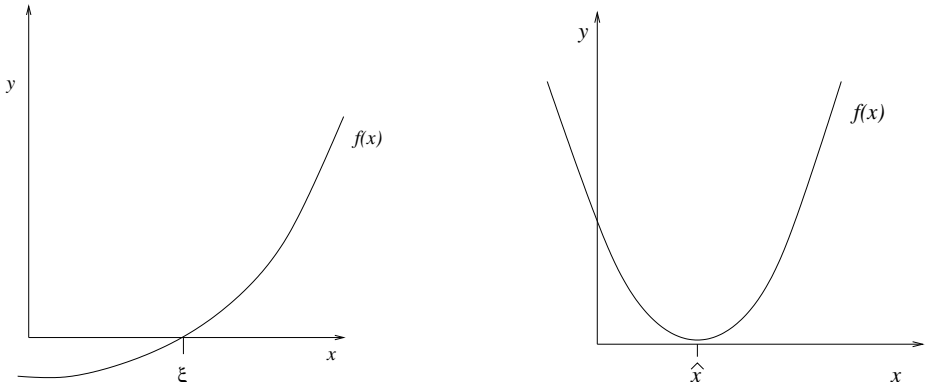


Figura 2.1: Grafico di un una funzione $f(x)$ che ammette radice ξ (sinistra) e che non ammette alcuna radice (destra).

figura 2.1 in cui nel punto $\hat{x}$ la condizione precedente potrabbe essere verificata per opportuni valori di *tol* ma la $f(x)$ non ammette alcuna radice in $\mathbb{R}$. Specificheremo meglio nei paragrafi che seguono questi concetti. In questa trattazione assumiamo che $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ sia una funzione continua e derivabile un numero opportuno di volte.

2.1 Localizzazione delle radici

In questo paragrafo ci occupiamo di verificare a priori la buona posizione del nostro problema prima di affrontare il problema della sua soluzione numerica. Assumiamo che la f sia continua quanto basta. L'analisi della buona posizione si riduce quindi alla verifica dell'esistenza e dell'unicità della soluzione. E' chiaro che possono esistere nessuna, una o più soluzioni al nostro problema. Siamo quindi interessati a studiare il comportamento della $f(x)$ in modo da individuare un intervallo I (sottoinsieme del dominio della $f(x)$) all'interno del quale esista una e una sola radice di $f(x)$.

2.1.1 Condizioni necessarie e sufficienti per l'esistenza di una unica radice

Ricordiamo che il problema che stiamo affrontando è quello di trovare una radice della funzione $f(x)$ localizzata in un dato intervallo:

Problema 2.2. Trovare $x \in \mathbb{R}$ tale che:

$$f(x) = 0$$

con $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una funzione continua.

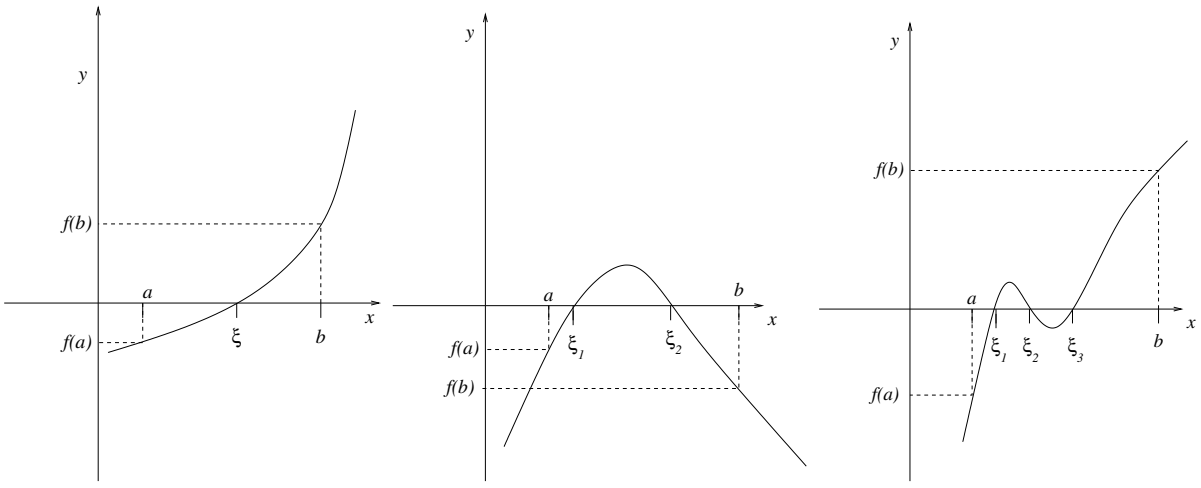


Figura 2.2: Problema di trovare la radice $x = \xi$ della funzione $f(x)$ all'interno dell'intervallo $I = [a, b]$. Figura di sinistra: caso di una unica radice; figura centrale: due radici; figura di destra: 3 radici.

Indichiamo la soluzione vera (teorica) di tale problema con la lettera greca ξ[6], per cui si ha che $f(\xi) = 0$. Ricordando che il problema è quello di cercare il punto di intersezione tra la funzione $y = f(x)$ e l'asse x (cioè la funzione $y = 0$), possiamo dire intuitivamente che esiste almeno una radice se la funzione interseca l'asse x in almeno un punto interno all'intervallo I. Avendo fatto l'ipotesi di continuità della $f(x)$, una condizione sufficiente per avere almeno una radice in I è che la funzione assuma valori opposti agli estremi dell'intervallo, e cioè:

$$f(a) < 0 \qquad \text{e} \qquad f(b) > 0$$

oppure

$$f(a) > 0 \qquad \text{e} \qquad f(b) < 0.$$

Ovviamente questa condizione non può essere necessaria e non implica l'unicità della radice, come si può facilmente vedere dalla figura 2.2. Una condizione necessaria per l'unicità è la monotonia della $f(x)$, e quindi la permanenza del segno della $f'(x)$. Pensiamo ora di trasformare la nostra funzione nella forma:

$$f(x) = x - g(x).$$

Il problema di trovare la radice della $f(x)$ si trasforma nel seguente problema:

Problema 2.3. Trovare $x \in \mathbb{R}$ tale che

$$x = g(x) \tag{2.2}$$

[6]Si legge "csi".

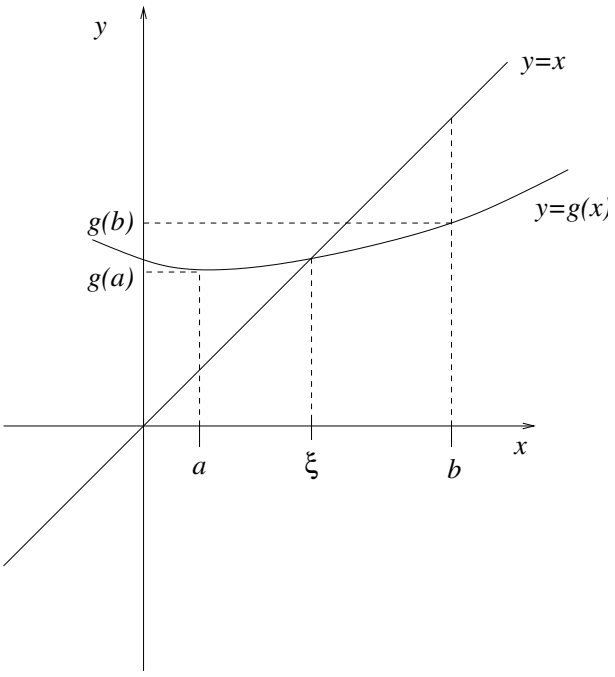


Figura 2.3: Problema di punto fisso nell'intervallo $I = [a, b]$.

che viene chiamato *Problema di Punto Fisso* (cfr. Figura 2.3). Assumendo la continuità della funzione di punto fisso $g(x)$, e quindi della $f(x)$, si ottengono allora le seguenti condizioni sufficienti per l'esistenza e l'unicità del punto fisso:

$$\begin{cases} g(a) > a \quad \text{e} \quad g(b) < b \\ g'(x) < 1 \quad \text{e} \quad g'(x) > -1, \quad \forall x \in I, \end{cases}$$

ovvero

$$\begin{cases} g(a) > a \qquad \text{e} \quad g(b) < b \\ |g'(x)| < 1, \qquad \forall x \in I. \end{cases}$$

Le equazioni precedenti, insieme alla continuità, implicano che $g(I) \subset I$, per cui si dice che la funzione g è una "contrazione". In Figura 2.3 vengono visualizzati questi concetti. In questo caso, si ha che $g(a) > a$ e $g(b) < b$, e inoltre $|g'(x)| < 1$. Si nota subito che quest'ultima condizione significa che la funzione di punto fisso in ogni punto di I potrà crescere (o decrescere) al massimo quanto la retta $y = x$, per cui non potrà esistere un secondo punto fisso.

Esempio 2.4. Data l'equazione:

$$f(x) = x^3 - x - 1 = 0$$

mostrare che essa ammette una e una sola soluzione ξ nell'intervallo $I = [1, 2]$.
La funzione f è continua, qundi applichiamo le considerazioni fatte sopra:

$$f(1) = -1 < 0, \qquad f(2) = 8 - 2 - 1 = 5 > 0,$$

quindi esiste una soluzione $\xi \in I$. La derivata prima di f vale:

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

ed è positiva per $x > \sqrt{3}/3$ e quindi per tutti gli x in $I = [1, 2]$. Pertanto la radice ξ è unica.

Esempio 2.5. Data la funzione di punto fisso:

$$x = g(x) = \sqrt[3]{1 + x}$$

si dimostri che il punto fisso coincide con la radice della funzione dell'esempio precedente, e si dimostri esistenza e unicità del punto fisso.
Dalla equazione di punto fisso sopra scritta, con semplici passaggi si ottiene:

$$x^3 - x - 1 = 0,$$

che è proprio la $f(x)$ dell'esempio precedente.
L'esistenza del punto fisso ξ deriva dal fatto che:

$$g(1) = \sqrt[3]{2} > 1, \qquad g(2) = \sqrt[3]{3} < 2.$$

Per analizzare l'unicità di ξ andiamo a vedere la derivata prima di g. Risulta:

$$g'(x) = \frac{1}{3}(1 + x)^{-2/3}.$$

Si vede immediatamente che la $g'(x)$ è una funzione positiva e sempre decrescente per $x > 0$. Il suo valore massimo in I si ottiene in $x = 1$ e vale $g'(1) = 1/(3\sqrt[3]{4}) \approx 0.21 < 1$. Quindi ξ è l'unico punto fisso in I.

2.1.2 Il metodo dicotomico

Passiamo ora a discutere il metodo "dicotomico" o di "bisezione", un metodo molto usato per localizzare un intervallo iniziale sufficientemente piccolo che contenga la radice. Il metodo dicotomico è in realtà un vero e proprio metodo iterativo per la soluzione di equazioni nonlineari, e si ricava intuitivamente sfruttando le considerazioni fatte in precedenza.
Dato un intervallo $I_0 = [a, b]$ che contiene la radice, che assumiamo unica, si costruiscono due successioni $\{s_k\}$ e $\{d_k\}$ che convergono a ξ rispettivamente da sinistra e da destra, e che individuano quindi una successione di intervalli $I_i = [s_i, d_i]$ che tende a zero mantenendo la condizione $\xi \in I_k$. Si procede con il seguente algoritmo:

ALGORITMO DICOTOMICO:

dato un intervallo iniziale $I_0 = [a, b]$ con $\xi \in I_0$ e una tolleranza $TOLL$;

$sk := a$; $dk := b$; $=SCARTO := 2 * TOLL$

FINCHÉ $SCARTO > TOLL$ esegui:

1. $xk = 0.5 * (sk + dk)$

2. IF $f(xk) * f(dk) < 0$:
   $sk = xk$; dk invariato;
   ELSE $dk = sk$; sk invariato

FINE FINCHÉ.

Si vede che ad ogni iterazione si prendono come estremi del nuovo intervallo il punto medio e uno dei due estremi dell'intervallo precedente in modo tale da garantire la permanenza della radice ξ all'interno del nuovo intervallo.

2.2 Prime prove

PROBLEMA: trovare un'approssimazione numerica delle radici dell'equazione

$$x^2 - 3x + 2 = 0 \tag{2.3}$$

Le radici vere di tale equazione sono facilmente calcolabili:

$$\xi_{1,2} = \frac{3 \pm \sqrt{9 - 8}}{2} \qquad \xi_1 = 1 \qquad \xi_2 = 2$$

Per calcolare un'approssimazione della radice ξ_2 con un metodo numerico procediamo come segue. Esplicitiamo la x dalla (2.3), per esempio:

$$x = g_1(x) = \sqrt{3x - 2} \tag{2.4}$$

Tale equazione ha evidentemente le stesse radici. Utilizzando una calcolatrice tascabile è facile quindi costruire una tabella in cui dato un valore di partenza x_0 il nuovo valore x_1 è calcolato valutando la funzione g_1 nel punto x_0 ($x_1 = g_1(x_0)$). Nella tabella seguente si riportano i risultati del procedimento partendo da $x_0 = 3$ e ripetendo il procedimento per 7 volte:

	x	$g_1(x)$
1	3	$\sqrt{7}$=2.6458
2	2.6458	2.4367
3	2.4367	2.3043
4	2.3043	2.2165
5	2.2165	2.1563
6	2.1563	2.1140
7	2.1140	2.0837

Si noti che nella prima colonna vi sono i valori della $g_1(x)$ calcolati nella riga precedente. I valori della seconda colonna approssimano via via sempre meglio il valore della radice $\xi_2 = 2$. Si dice che questo procedimento **converge** alla soluzione vera ξ_2, o in altri termini $x_{k+1}(= g(x_k)) \to \xi_2$, ove il pedice k indica le varie righe della tabella, chiamate anche **iterazioni**.
Proviamo ora a cambiare la funzione $g(x)$ esplicitando il termine lineare della (2.3) anzichè il termine quadratico. Otteniamo:

$$x = g_2(x) = \frac{x^2 + 2}{3} \tag{2.5}$$

e costruiamo la stessa tabella a partire ancora da $x_0 = 3$ ma usando ora la funzione $g_2(x)$:

	x	$g_2(x)$
1	3	3.6667
2	3.6667	5.1481
3	5.1481	9.5011

Come si verifica immediatamente il procedimento questa volta costruisce un'approssimazione che si allontana sempre più dalla soluzione ξ_2. Si dice in questo caso che il procedimento **diverge**.
Proviamo infine ad usare una terza funzione $g_3(x)$ data da:

$$x = g_3(x) = \frac{x^2 - 2}{2x - 3} \tag{2.6}$$

Si noti che tale equazione ha come radici esattamente ξ_1 e ξ_2, come si può facilmente vedere sostituendo ad ambo i membri una delle due radici arrivando così all'identità.
Costruiamo la stessa tabella di prima:

	x	$g_3(x)$
1	3	2.333333
2	2.333333	2.066667
3	2.066667	2.003922
4	2.003922	2.000015

e otteniamo una ottima approssimazione già alla quarta iterazione. Ci si domanda quindi come si fa a costruire uno schema che converga alla soluzione esatta, e,

una volta costruito lo schema, come si fa a vedere quanto velocemente converge. Collegato a questo c'è da domandarsi come si fa a decidere quante iterazioni fare, o in altri termini, qual'è l'accuratezza dei conti alla quale ci fermiamo.
Per dare un senso pratico a queste domande, costruiamo quella che si chiama la tabella degli errori ϵ, ove l'errore è definito intuitivamente dalla differenza tra la soluzione approssimata x_k e la soluzione vera ξ_2:

	ϵ	$g_1(\epsilon)$
1	1	0.6458
2	0.6458	0.4367
3	0.4367	0.3043
4	0.3043	0.2165
5	0.2165	0.1563
6	0.1563	0.1140
7	0.1140	0.0837

	ϵ	$g_2(\epsilon)$
1	1	1.6667
2	1.6667	3.1481
3	3.1481	7.5011

	ϵ	$g_3(\epsilon)$
1	1	0.333333
2	0.333333	0.066667
3	0.066667	0.003922
4	0.003922	0.000015

Dalle tabelle si nota che gli errori tendono a zero nello stesso modo con cui la soluzione approssimata tende alla soluzione vera. Nel primo caso (g_1) possiamo facilmente verificare che il rapporto di riduzione dell'errore ad ogni iterazione è pari a circa 0.73 (i.e. $\epsilon_7/\epsilon_6 \approx \epsilon_6/\epsilon_5 \approx 0.73$) e cioè:

$$\epsilon_6 \approx 0.73\epsilon_5 \qquad \text{e} \qquad \epsilon_7 \approx 0.73\epsilon_6$$

Nel caso di g_3 invece tale rapporto tende a zero mentre è una costante il rapporto fra l'errore corrente e il quadrato dell'errore precedente: $\epsilon_4/\epsilon_3^2 \approx \epsilon_3/\epsilon_2^2 \approx 1$, che significa:

$$\epsilon_3 \approx \epsilon_2^2 \qquad \text{e} \qquad \epsilon_4 \approx \epsilon_3^2$$

Per vedere meglio perché succede così calcoliamo la derivata prima della funzione g e la valutiamo nella radice:

$$\begin{aligned} g_1'(x) &= \left.\frac{3}{2\sqrt{3x-2}}\right|_{x=2} = 3/4 \qquad (<1) \\ g_2'(x) &= \left.\frac{2}{3}x\right|_{x=2} = 4/3 \qquad (>1) \\ g_1'(x) &= \left.\frac{2x^2-6x+4}{2x-3}\right|_{x=2} = 0 \qquad (<1) \end{aligned}$$

Empiricamente possiamo quindi affermare che ove la derivata prima di g è minore di 1 lo schema converge. Inoltre, $g_1'(\xi_2)$ è una buona approssimazione del fattore di riduzione dell'errore mentre ciò non è vero nel caso di g_3, ove si ha una riduzione dell'errore quadratica e una convergenza molto più veloce.
Per quanto riguarda invece il numero di iterazioni dopo il quale fermarsi, bisogna anche qui ragionare sulle tabelle degli errori. In un problema pratico uno ha già in

mente qual'è l'errore che è disposto ad accettare. In questo caso basta fissare un limite (tolleranza) per l'errore e iterare fin a che l'errore (in valore assoluto) diventa inferiore a questo limite. Per esempio se fissiamo una tolleranza $TOLL = 0.001$, pochi conti con la calcolatrice tascabile mostrano che con la g_1 ci vogliono almeno 23 iterazioni per soddisfare tale criterio di arresto ($|\epsilon_{23}| < TOLL$), mentre per g_3 il criterio è soddisfatto già alla quarta iterazione ($|\epsilon_4| < TOLL$).
Un altro modo di porsi il problema è quello di chiedersi qual'è il valore della differenza tra due soluzioni successive al di sotto del quale le due approssimazioni possono essere considerate equivalenti. In questo caso il controllo non è più fatto utilizzando l'errore ma lo scarto (la differenza tra due approssimazioni successive). Questo modo di lavorare è in realtà l'unico disponibile nella pratica, poiché la conoscenza dell'errore richiederebbe la conoscenza della soluzione vera.

2.3 Lo schema delle iterazioni successive (o di Picard)

Lo schema visto in precedenza è un ben noto algoritmo che prende il nome di schema delle iterazioni successive o di Picard. Si costruisce una successione di approssimanti della radice utilizzando la seguente formula ricorrente:

$$x_{k+1} = g(x_k) \tag{2.7}$$

dove l'indice k viene chiamato iterazione.
Lo schema precedente risolve il classico problema del "punto fisso", e cioè trovare il valore della $x \in \mathbb{R}$ tale che

$$x = g(x) \tag{2.8}$$

Graficamente questo problema consiste nel trovare il punto di intersezione ξ tra la retta $y = x$ e la curva $y = g(x)$, come evidenziato in Figura 2.4, ove si vede anche la convergenza dello schema di Picard.
Un algoritmo per lo schema di Picard implementabile all'elaboratore può essere descritto nel modo seguente. Si noti che nello scrivere un algoritmo utilizzeremo un linguaggio simile ad un linguaggio di programmazione ma utile per una descrizione "matematica" dell'algoritmo. Alcune notazioni sono tipiche della scrittura degli algoritmi. Per esempio il simbolo := denota il concetto di assegnazione, per cui prima si valuta il valore che l'espressione a destra del simbolo assume e solo successivamente tale valore viene assegnato alla variabile a sinistra del simbolo. La "keyword" FINCHÉ individua quello che in gergo informatico si chiama ciclo WHILE, per cui si ripete in successione il gruppo di righe comprese tra la "keyword" FINCHÉ e quella FINE FINCHÉ se la condizione scritta tra parentesi subito a destra del FINCHÉ è soddisfatta. Non appena tale condizione non è verificata, si esce dal ciclo e si continua con le istruzioni che seguono la "keyword" di chiusura ciclo (FINE FINCHÉ).

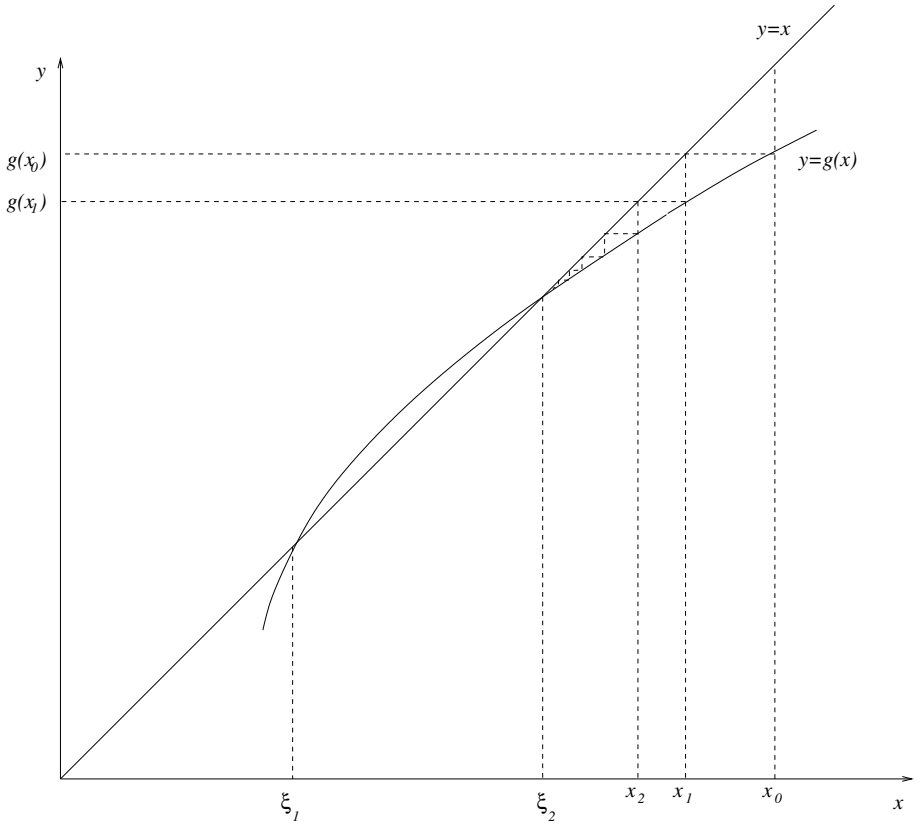


Figura 2.4: Rappresentazione grafica del problema del punto fisso e dello schema di Picard per la soluzione dell'equazione $x^2 - 3x + 2 = 0$ con funzione di punto fisso $g_1(x) = \sqrt{3x - 2}$.

ALGORITMO DI PICARD I:

data una soluzione iniziale x_0;

PER $k = 1, 2, \ldots, s$ fino a convergenza:

1. $x_{k+1} = g(x_k)$

Questo algoritmo non è però completamente implementabile, nel senso che bisogna specificare più dettagliatamente cosa significa la frase "fino a convergenza". Per fare ciò, come abbiamo visto, abbiamo bisogno di introdurre il concetto di scarto e di tolleranza. L'algoritmo seguente implementa lo schema di Picard in modo del tuto simile a quanto si fa con un linguaggio di programmazione:

ALGORITMO DI PICARD II:

data una soluzione iniziale x_0 e una tolleranza $TOLL$;

$XK := x_0$; $SCARTO := 2 * TOLL$

FINCHÉ $SCARTO > TOLL$ esegui:

1. $XKP1 = g(XK)$
2. $SCARTO = |XKP1 - XP|$
3. $XK = XKP1$

FINE FINCHÉ.

Si noti che senza l'istruzione 3 l'algoritmo non uscirebbe mai dal ciclo FINCHÉ. Infatti $XKP1$ sarebbe sempre uguale a $g(XK)$ visto che $XK = x_0$ non verrebbe mai aggiornata. Un ulteriore controllo è però necessario: nel caso in cui il metodo diverge, l'algoritmo implementa un ciclo infinito visto che $SCARTO$ aumenta ad ogni iterazione. In questo caso il computer eseguirebbe le iterazioni per un numero molto grande di iterazioni fino a che probabilmente il valore di $SCARTO$ o di $XKP1$ non diventi talmente grande da superare la capacità di rappresentazione dei numeri reali dell'elaboratore (in gergo informatico si avrebbe un "overflow"). Per guardarsi da una tale evenienza, bisogna contare le iterazioni che vengono fatte e verificare che esse non superino un numero massimo ($ITMAX$) prestabilito. Il seguente algoritmo implementa anche questo controllo:

ALGORITMO DI PICARD III:

data una soluzione iniziale x_0, una tolleranza $TOLL$ e un numero massimo di iterazioni $ITMAX$;

$XK := x_0$; $SCARTO := 2 * TOLL$; $ITER = 0$;

FINCHÉ ($SCARTO > TOLL$ e $ITER < ITMAX$) esegui:

1. $ITER := ITER + 1$;
2. $XKP1 := g(XK)$;
3. $SCARTO := |XKP1 - XP|$;
4. $XK := XKP1$;

FINE FINCHÉ.

2.4 Convergenza dei metodi iterativi

Lo studio della convergenza degli schemi iterativi è un capitolo molto importante del Calcolo Numerico e serve per trovare le condizioni che garantiscono un funzionamento corretto degli algoritmi in maniera tale da ottenere in un tempo ragionevole una buona approssimazione numerica della soluzione del problema considerato.
Nel caso di metodi iterativi, come quello di Picard precedentemente descritto, lo studio della convergenza riguarda essenzialmente lo studio della propagazione dell'errore da un'iterazione all'altra. E' utile cercare di rendere i concetti di convergenza in termini matematici, anche se non si pretende qui di riportare una trattazione formale dell'argomento, ritenendo sufficiente dare alcune spiegazioni intuitive che però sono fondamentali per la comprensione dei metodi numerici.

2.4.1 Studio della convergenza dello schema di Picard

Uno schema iterativo può essere sempre pensato come un insieme di regole per costruire una successione di numeri reali che tende alla soluzione vera del problema. In termini matematici, indichiamo la convergenza con:

$$\{x_k\} \to \xi$$

dove x_k denota la successione e ξ la soluzione analitica del problema matematico. Definiamo l'errore come la differenza tra la soluzione vera e la soluzione approssimata:

$$\epsilon_k = \xi - x_k \tag{2.9}$$

La successione $\{x_k\}$ converge alla radice ξ se $\{\epsilon_k\}$ tende a zero, e cioè:

$$\lim_{k\to\infty} |\epsilon_k| = 0 \tag{2.10}$$

Capire quanto velocemente questa successione converge a zero, significa anche capire quanto velocemente la successione x_k converge alla soluzione vera ξ. Idealmente si vorrebbe che ad ogni iterazione k l'errore diminuisse, ma questo non sempre è vero. Se l'errore diminuisce di un fattore costante ad ogni iterazione, si può scrivere:

$$|\epsilon_{k+1}| \leq M|\epsilon_k| \qquad k = 1, 2, \ldots \qquad\qquad M < 1$$

Condizioni per la convergenza Per studiare le condizioni di convergenza, bisogna quindi studiare in quali condizioni la condizione (2.10) è verificata. Dall'equazione (2.7) e dal fatto che la soluzione vera ξ soddisfa la (2.8), si ottiene immediatamente:

$$\xi - x_1 = g(\xi) - g(x_0) = g'(\xi_0)(\xi - x_0)$$

ove l'ultima espressione deriva dall'applicazione del teorema del valor medio. Continuando, possiamo evidentemente scrivere:

$$\begin{aligned} \xi - x_1 &= g(\xi) - g(x_0) = g'(\xi_0)(\xi - x_0) \\ \xi - x_2 &= g(\xi) - g(x_1) = g'(\xi_1)(\xi - x_1) = g'(\xi_1)g'(\xi_0)(\xi - x_0) \end{aligned}$$

e quindi si verifica facilmente che:

$$\epsilon_k = g'(\xi_{k-1})g'(\xi_{k-2}) \cdots g'(\xi_1)g'(\xi_0)\epsilon_0 \tag{2.11}$$

Ponendo

$$m = \max_j |g'(\xi_j)|$$

otteniamo la seguente maggiorazione per l'errore alla k-esima iterazione:

$$|\epsilon_k| \leq m|\epsilon_{k-1}| \leq m^k|\epsilon_0| \tag{2.12}$$

da cui si ricava che se $m < 1$ la condizione (2.10) è verificata. Bisogna stare attenti perché questa dimostrazione mi dice che se tutte le derivate nei punti opportuni ξ_k interni all'intervallo $[x_0, \xi]$ sono in valore assoluto minori di uno certamente lo schema converge (condizione sufficiente). E' peraltro vero che se una di queste derivate risulta avere modulo maggiore di 1, nondimeno lo schema può ancora convergere. Inoltre, il punto x_0 non è stato specificato e potrebbe essere preso "vicino" a ξ. Pertanto, la condizione di convergenza per lo schema di Picard risulta essere:

$$|g'(x)| < 1 \qquad \text{per} \quad x \in I_\xi \tag{2.13}$$

ove I_ξ indica un intorno del punto ξ. Se la g' è una funzione continua, e

$$|g'(\xi)| < 1, \tag{2.14}$$

esiste certamente un intorno di ξ per cui la (2.14) è verificata. Dalla Figura 2.4 si nota $|g'(\xi_2)| < 1$ mentre $|g'(\xi_1)| > 1$, come si può facilmente vedere confrontando le pendenze delle tangenti nei punti ξ_1 e ξ_2 con la pendenza della retta $y = x$.

Relazione tra scarto e errore Possiamo ora dare una giustificazione all'uso dello scarto al posto dell'errore nel controllo del ciclo WHILE dell'algoritmo di Picard. Definiamo quindi lo scarto come la differenza tra le soluzioni a due iterate successive:

$$e_k = x_k - x_{k-1}. \tag{2.15}$$

Possiamo quindi scrivere:

$$\epsilon_k = x_k - \xi = x_k - x_{k+1} + x_{k+1} - \xi,$$

da cui, prendendo i valori assoluti, si ottiene:

$$|\epsilon_k| \leq |x_{k+1} - x_k| + |\xi - x_{k+1}| = |e_k| + |\epsilon_{k+1}|. \tag{2.16}$$

Dalla (2.11) possiam esprimere ϵ_k in funzione di ϵ_{k+1}, ottenendo quindi:

$$|\epsilon_k| \geq \frac{1}{m}|\epsilon_{k+1}|,$$

che sostituita in (2.16), fornisce:

$$\frac{1}{m}|\epsilon_{k+1}| \leq |\epsilon_k| \leq |\epsilon_{k+1}| + |e_{k+1}|,$$

che è valida per ogni valore di k, e quindi:

$$|\epsilon_k| \leq \frac{m}{1-m}|e_k|. \tag{2.17}$$

Questa relazione mi dice che lo scarto si comporta asintoticamente (per k grande) come l'errore e quindi può essere usato come surrogato dell'errore nell'algoritmo di Picard.
Se $m \leq 1/2$, allora lo scarto è sempre una maggiorazione dell'errore.

Ordine di convergenza E' facile constatare, guardando la (2.11), che l'errore alla k-esima iterazione tenderà a zero tanto più velocemente quanto più il prodotto delle derivate sarà vicino allo zero. Per quantificare in maniera più precisa questo concetto, prendiamo l'errore cambiato di segno[7] per cui

$$x_k = \xi + \epsilon_k \tag{2.18}$$

che inserita nella (2.7) fornisce:

$$\xi + \epsilon_{k+1} = g(\xi + \epsilon_k)$$

Se lo schema converge $\{\epsilon_k\} \to 0$ per cui possiamo espandere in serie di Taylor la g attorno a ξ, ottenendo:

$$\xi + \epsilon_{k+1} = g(\xi) + \epsilon_k g'(\xi) + \frac{\epsilon_k^2}{2} g''(\xi) + \frac{\epsilon_k^3}{6} g'''(\xi) + \cdots$$

da cui, ricordandosi ancora una volta che $\xi = g(\xi)$:

$$\epsilon_{k+1} = \epsilon_k g'(\xi) + \frac{\epsilon_k^2}{2} g''(\xi) + \frac{\epsilon_k^3}{6} g'''(\xi) + \cdots \tag{2.19}$$

Si vede subito che, essendo ϵ_k^2 e ϵ_k^3 infinitesimi di ordine superiore, il termine dominante è proporzionale a $|\epsilon_k|$ con costante di proporzionalità pari proprio a $g'(\xi)$. E' chiaro inoltre che perché $|\epsilon_{k+1}| < |\epsilon_k|$ dovrà essere $|g'(\xi)| < 1$. Se $g'(\xi) \neq 0$, si ha immediatamente:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|\epsilon_{k+1}|}{|\epsilon_k|} = \lim_{k\to\infty} \left| g'(\xi) + \frac{\epsilon_k}{2} g''(\xi) + \frac{\epsilon_k^2}{6} g'''(\xi) + \cdots \right| = |g'(\xi)|$$

mentre se $g'(\xi) = 0$ si potrà scrivere:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|\epsilon_{k+1}|}{|\epsilon_k^2|} = \lim_{k\to\infty} \left| \frac{1}{2} g''(\xi) + \frac{\epsilon_k}{6} g'''(\xi) + \cdots \right| = \left| \frac{1}{2} g''(\xi) \right|$$

e in questo caso sono i termini di secondo ordine a comandare la convergenza, che risulta essere quindi più veloce. E' quindi naturale definire l'ordine p di convergenza e la costante M asintotica di convergenza (o dell'errore) con la relazione:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|\epsilon_{k+1}|}{|\epsilon_k|^p} = M \tag{2.20}$$

Per $p = 1$ la convergenza è anche detta lineare e necessariamente $M < 1$; per $p = 2$ la convergenza è detta quadratica, e così via. Si noti nel caso della $g_1(x)$ studiata in precedenza si ha $p = 1$ e $M = |g_1'(2)| = 0.75$, mentre per la $g_3(x)$ si ha $p = 2$ e $M = g_3''(\xi)/2 = 1$.

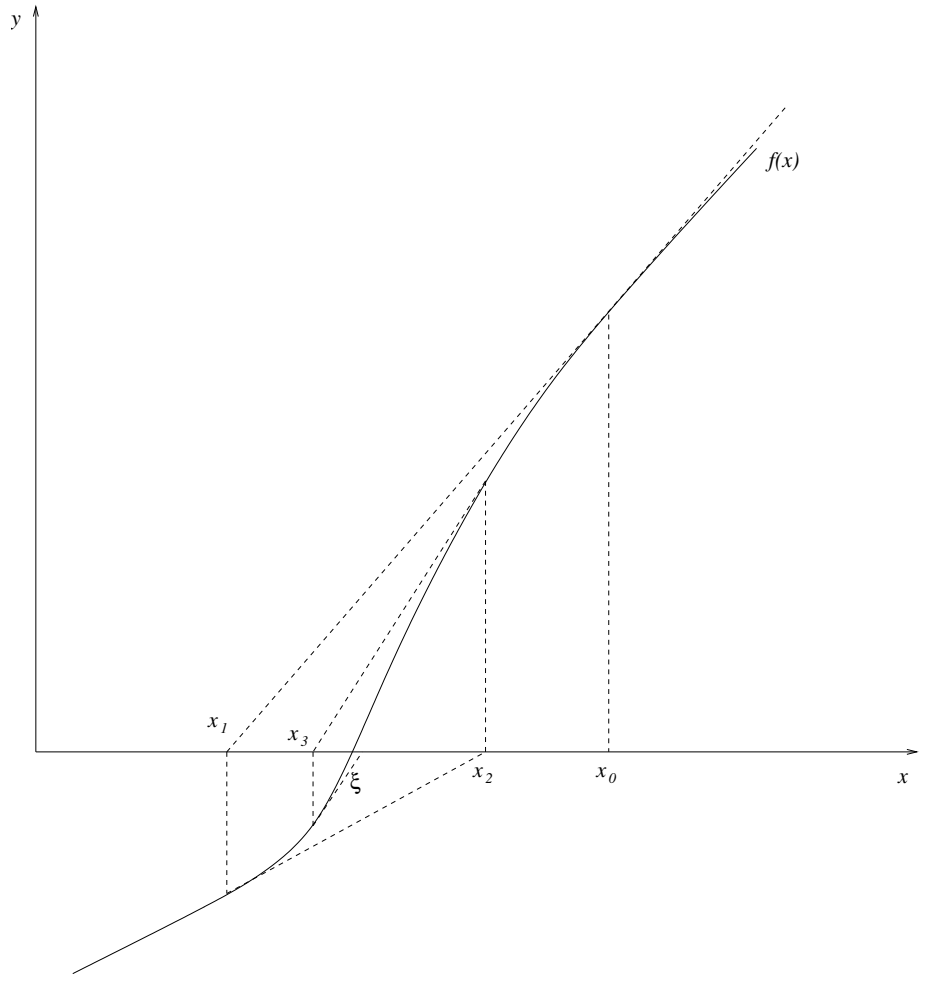


Figura 2.5: Rappresentazione grafica del funzionamento del metodo di Newton-Raphson per la soluzione dell'equazione $f(x) = 0$.

2.4.2 Lo schema di Newton-Raphson

Abbiamo visto che se $|g'(\xi)| = 0$ lo schema di Picard ha ordine di convergenza $p = 2$. Cerchiamo quindi di trovare un modo per ricavare tale schema. Partiamo dal problema (2.1) e cerchiamo di costruire una successione definita da:

$$x_{k+1} = x_k + h \tag{2.21}$$

Idealmente noi vorremmo che, partendo da una soluzione di tentativo x_k, il valore di h ci fornisca la soluzione esatta, o in formule:

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

Espandendo in serie di Taylor la precedente equazione attorno a x_k si ottiene:

$$0 = f(x_k + h) = f(x_k) + hf'(x_k) + \frac{h^2}{2}f''(x_k) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_k) + \cdots$$

Trascurando i termini di ordine superiore al primo, si ottiene un'equazione lineare in h la cui soluzione, inserita nella (2.21) definisce lo schema iterativo di Newton-Raphson, che può essere visto come uno schema di punto fisso in cui si utilizza una $g(x)$ particolare:

$$x_{k+1} = g_{nr}(x_k) = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{2.22}$$

Si vede facilmente che il valore approssimato x_{k+1} alla nuova terazione di Newton-Raphson è dato dall'intersezione della retta tangente alla $f(x)$ nel punto $(x_k, f(x_k))$, che ha dunque pendenza pari a $f'(x_k)$, con l'asse x, come evidenziato in Figura 2.5.

L'algoritmo per l'implementazione dello schema di Newton-Raphson è molto simile

[7] in questo caso ci interessano esclusivamente quantità prese in valore assoluto

a quello di Picard, con la sostituzione della generica $g(x)$ con la $g_{nr}(x)$:

ALGORITMO DI NEWTON-RAPHSON:

data una soluzione iniziale x_0, una tolleranza $TOLL$ e un numero massimo di iterazioni $ITMAX$;

$XK := x_0$; $SCARTO := 2 * TOLL$; $ITER = 0$;

FINCHÉ ($SCARTO > TOLL$ e $ITER < ITMAX$) esegui:

1. $ITER := ITER + 1$;
2. $XKP1 := g_{nr}(XK)$;
3. $SCARTO := |XKP1 - XP|$;
4. $XK := XKP1$;

FINE FINCHÉ.

...

FUNCTION $g_{nr}(X)$;

$$g_{nr}(X) = X - \frac{f(X)}{f'(X)}$$

FINE FUNCTION g_{nr}

Condizioni di convergenza Consideriamo la funzione di Newton-Raphson g_{nr} e imponiamo le condizioni di convergenza dello schema di punto fisso, e, osservando che se ξ è lo zero della funzione allora necessariamente $f(\xi) = 0$ si ottiene:

$$|g'_{nr}(\xi)| = \left|1 - \frac{[f'(\xi)]^2 - f(\xi)f''(\xi)}{[f'(\xi)]^2}\right| = \left|\frac{f(\xi)f''(\xi)}{[f'(\xi)]^2}\right| = 0$$

da cui segue immediatamente che la (2.13) è sempre verificata se si assume la continuità della f e delle sue prime due derivate. Si dice quindi che lo schema di Newton-Raphson è *generalmente* convergente. Si noti, tuttavia, che bisogna stare attenti a queste affermazioni, perché il punto iniziale x_0 non è stato specificato e la (2.13) vale in condizioni asintotiche. Si può affermare quindi che lo schema di Newton-Raphson è generalmente convergente per una soluzione iniziale x_0 sufficientemente vicina.

Nel caso di radice doppia ($f(\xi) = 0; f'(\xi) = 0; f''(\xi) \neq 0$) la condizione di convergenza è ancora soddisfatta, anche se la g'_{nr} non è piú nulla. Infatti si ha:

$$\begin{aligned}\lim_{x\to\xi} |g'_{nr}(x)| &= \lim_{x\to\xi} \left| \frac{f(x)f''(\xi)}{[f'(x)]^2} \right| = \text{(usando l'Hospital)} = \\ &= |f''(\xi)| \lim_{x\to\xi} \left| \frac{f'(x)}{2f'(x)f''(x)} \right| = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

E' quindi chiaro dalla (2.19) che in questo caso l'ordine di convergenza si riduce a lineare con costante asintotica dell'errore $M = 1/2$. Possiamo dunque concludere che lo schema di Newton-Raphson è generalmente convergente, sempre pero' in relazione ad una soluzione iniziale x_0 sufficientemente vicina alla soluzione finale ξ.

Ordine di convergenza Come abbiamo già notato indirettamente, nel caso generale l'ordine di convergenza dello schema di Newton-Raphson è $p = 2$ con costante asintotica dell'errore $M = \frac{1}{2}|g''_{nr}(\xi)|$. E' possibile però ricavare l'ordine direttamente dall'espressione (2.22) con la stessa procedura usata per lo schema di punto fisso. A tal fine, sostituiamo la (2.18) nella (2.22):

$$\xi + \epsilon_{k+1} = \xi + \epsilon_k - \frac{f(\xi + \epsilon_k)}{f'(\xi + \epsilon_k)}$$

Espandendo sia la $f(\xi + \epsilon_k))$ del numeratore e la $f'(\xi + \epsilon_k)$ del denominatore in serie di Taylor attorno ad x_k, notando che $f(\xi) = 0$ e assumendo che la radice sia singola, si ottiene:

$$\begin{aligned}\epsilon_{k+1} &= \epsilon_k - \frac{f(\xi) + \epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_k^2/2 f''(\xi) + \epsilon_k^3/3 f'''(\xi) \cdots}{f'(\xi) + \epsilon_k f''(\xi) \cdots} \\ &= \frac{\epsilon_k^2/2 f''(\xi) + \epsilon_k^3/3 f'''(\xi) \cdots}{f'(\xi) + \epsilon_k f''(\xi) \cdots} \qquad (2.23)\end{aligned}$$

per cui la definizione (2.20) è soddisfatta con $p = 2$ e $M = 1/2|f''(\xi)/f'(\xi)|$:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|\epsilon_{k+1}|}{|\epsilon_k|^2} = \frac{1}{2} \left| \frac{f''(\xi)}{f'(\xi)} \right|$$

che conferma l'ordine "quadratico" di Newton-Raphson e dalla quale si può ricavare indirettamente l'espressione della g''_{nr}.
Nel caso di radice doppia, e cioè $f(\xi) = f'(\xi) = 0$, risulta immediatamente dalla

2.4.3 Altri schemi "Newton-like"

Possiamo riscrivere il metodo di Newton nel seguente modo:

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{C_k} \\ C_k &= f'(x_k) \end{aligned}$$

E' possibile utilizzare diverse espressioni per C_k, cercando sempre che tali espressioni si avvicinino il più possibile a $f'(x_k)$, che abbiamo visto garantisce convergenze "ottimale" quadratica. In particolare si ha la seguente tabella che riassume i principali schemi:

C_k	Nome schema	Ordine
$f'(x_0)$	tangente fissa	1
$f'(x_k)$	Newton-Raphson (tangente variabile)	2
$\frac{f(x_1)-f(x0)}{x_1-x_0}$	secante fissa	1
$\frac{f(x_k)-f(xk-1)}{x_k-x_{k-1}}$	Regula Falsi (secante variabile)	1.618

Verifichiamo per esercizio l'ordine e la costante asintotica dell'errore per il metodo della tangente fissa. Tale schema approssima la derivata con la derivata prima calcolata nel punto iniziale e poi la mantiene costante. Si avrà quindi:

$$\xi + \epsilon_{k+1} = \xi + \epsilon_k - \frac{f(\xi + \epsilon_k)}{f(x_0)}$$

Espandendo $f(\xi + \epsilon_k)$ in serie di Taylor attorno alla radice ξ si ha:

$$\begin{aligned} \epsilon_{k+1} &= \epsilon_k - \frac{f(\xi) + \epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_k^2/2 f''(\xi) + \epsilon_k^3/3 f'''(\xi) \cdots}{f'(x_0)} \\ &= \frac{\epsilon_k(f'(x_0) - f'(\xi)) - \epsilon_k^2/2 f''(\xi) \cdots}{f'(x_0)} \end{aligned}$$

da cui si vede che lo schema della tangente fissa converge con $p = 1$ e $M = (f'(x_0) - f'(\xi))/f'(x_0)$.
Veniamo ora allo schema della Regula-Falsi. Tale schema approssima la derivata prima con un rapporto incrementale ottenuto con le informazioni più recentemente

calcolate (x_k, x_{k-1}, $f(x_k)$ e $f(x_{k-1})$). La formula iterativa del metodo della Regula-Falsi si può scrivere nel modo seguente:

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

L'algoritmo è innescato da due soluzioni iniziali che devono essere fornite esternamente. La prima, x_0, è come al solito arbitraria. La seconda viene generalmente calcolata con una iterazione del metodo di Newton-Raphson. Una volta note x_0 e x_1, si possono calcolare le approssimazioni successive.
L'analisi di convergenza richiede qualche calcolo in più rispetto al metodo di Newton-Raphson, ma la tecnica è la stessa. Si ha infatti, ricordando sempre che $f(\xi) = 0$:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{k+1} &= \frac{\epsilon_{k-1}f(\xi+\epsilon_k) - \epsilon_k f(\xi+\epsilon_{k-1})}{f(\xi+\epsilon_k) - f(\xi+\epsilon_{k-1})} \\
&= \frac{\epsilon_{k-1}\left[\epsilon_k f'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_k^2 f''(\xi) + \cdots\right] - \epsilon_k\left[\epsilon_{k-1}f'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_{k-1}^2 f''(\xi) + \cdots\right]}{\epsilon_k f'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_k^2 f''(\xi) + \cdots - \epsilon_{k-1}f'(\xi) - \frac{1}{2}\epsilon_{k-1}^2 f''(\xi) - \cdots} \\
&= \frac{\epsilon_{k-1}\epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_{k-1}\frac{1}{2}\epsilon_k^2 f''(\xi) + \cdots - \epsilon_k\epsilon_{k-1}f'(\xi) - \epsilon_k\frac{1}{2}\epsilon_{k-1}^2 f''(\xi) - \cdots}{\epsilon_k f'(\xi) + \frac{1}{2}\epsilon_k^2 f''(\xi) + \cdots - \epsilon_{k-1}f'(\xi) - \frac{1}{2}\epsilon_{k-1}^2 f''(\xi) - \cdots} \\
&= \frac{\frac{1}{2}f''(\xi)\epsilon_k\epsilon_{k-1}(\epsilon_k - \epsilon_{k-1}) + \cdots}{f'(\xi)(\epsilon_k - \epsilon_{k-1}) + \frac{1}{2}f''(\xi)(\epsilon_k^2 - \epsilon_{k-1}^2)\cdots} \\
&= \frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\xi)}\epsilon_k\epsilon_{k-1} + \ldots
\end{aligned}$$

per cui risulta infine

$$\epsilon_{k+1} = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\xi)}\epsilon_k\epsilon_{k-1} + \ldots = A\epsilon_k\epsilon_{k-1} + \ldots \tag{2.24}$$

Prendendo i moduli e ricordando la definizione (2.20), in condizioni asintotiche si ha in tuta generalità:

$$\frac{|\epsilon_{k+1}|}{|\epsilon_k|^p} = M \tag{2.25}$$

da cui evidentemente si ricava:

$$|\epsilon_{k-1}| = \left(\frac{|\epsilon_k|)}{M}\right)^{1/p}$$

che sostituita nella (2.24) fornisce:

$$|\epsilon_{k-1}| = AM^{-1/p}\epsilon_k^{(p+1)/p} \tag{2.26}$$

dove la costante $A = |f''(\xi)|/(2|f'(\xi)|)$ coincide con la costante asintotica dell'errore del metodo di Newton-Raphson. La coincidenza della (2.25) con la (2.26) si ha quando:

$$AM^{-1/p} = M \qquad\qquad \epsilon_k^{(p+1)/p} = \epsilon_k^p$$

che fornise $M = A^{(p+1)/p}$ e $p = (1 \pm \sqrt{(}5))/2$. Escludendo la radice negativa, la Regula Falsi risulta avere quindi convergenza superlineare pari a $p = 1.618\cdots$ e costante asintotica pari a $M = A^{0.618\cdots}$.

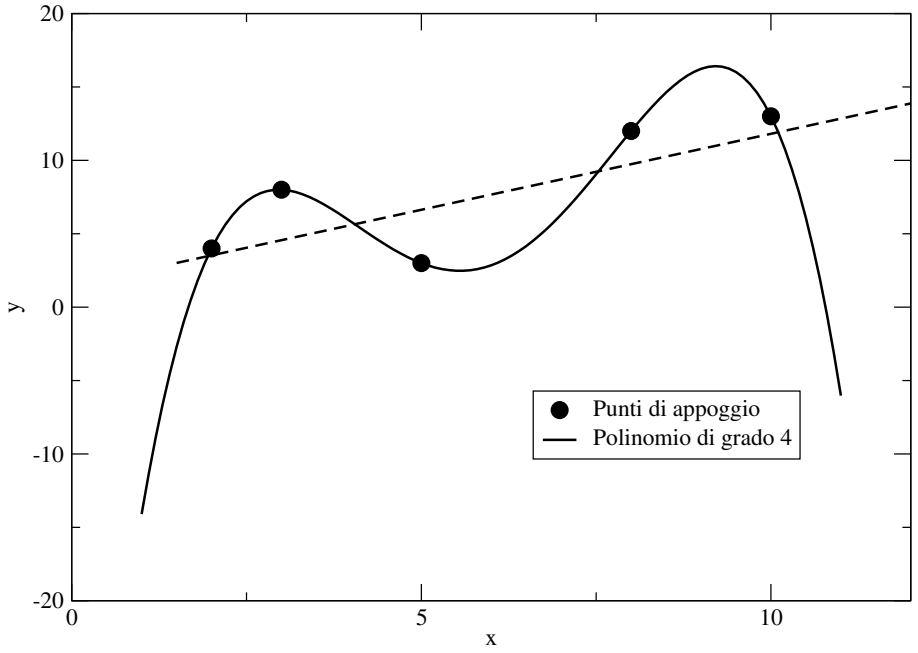


Figura 3.1: Esempio di polinomio di interpolatore e approssimatore. In questo esempio, ci sono 5 punti di appoggio, e quindi il polinomio interpolatore è di grado 4, mentre il polinomio approssimatore è di grado 1

3 Approssimazione e interpolazione di dati

In questo capitolo ci occuperemo di risolvere il problema dell'approssimazione di dati. Nella pratica ingegneristica succede molto spesso che sia nota una serie di osservazioni e si voglia trovare una forma funzionale che leghi queste osservazioni in qualche modo. As esempio, sia nota la serie della temperatura oraria misurata in un dato posto. La serie è quindi formata da n coppie ordinate [ora, temperatura] che possiamo chiamare $(x_i, y_i), i = 0, \ldots, n$. Supponiamo di scegliere come forma funzionale un polinomio di grado opportuno m. La scelta della forma polinomiale è suggerita dal fatto che qualsiasi funzione "analitica" può essere approssimata con sufficiente accuratezza da un polinomio di grado sufficientemente elevato. La classe (spazio) dei polinomi di grado m la chiamiamo $\mathcal{P}_m$, per cui:

$$\mathcal{P}_m = \left\{ P_m(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R} : \; P_m(x) = a_m x^m + a_{m-1} x^{m-1} + \ldots + a_1 x + a_0. \right\}. \quad (3.1)$$

Un polinomio di grado m è definito da m coefficienti incogniti e la loro determinazione richiede m condizioni (equazioni) linearmente indipendenti.
Ci sono due strade alternative per scegliere il grado m e definire i coefficienti. La prima, chiamata "interpolazione polinomiale", sfrutta il fatto che esiste uno e un solo polinomio di grado n che passa per $n+1$ punti, e cioè che soddisfa alle cosidette

relazioni di interpolazione: dati $n+1$ punti di appoggio $(x_i, y_i), i = 0, \ldots, n$, il polinomio soddisfa alle seguenti condizioni di interpolazione, e cioè che passa per tutti i punti di appoggio, vale a dire che per ogni i si ha $P_n(x_i) = y_i$. Ci sono quindi $n+1$ condizioni indipendenti e il polinomio interpolatore è determinato univocamente. Si noti che il polinomio interpolatore "passa" per tutti i punti di appoggio, come si vede dall'esempio di figura 3.1. Questo fatto, in particolare quando le ascisse dei punti di appoggio sono equidistanti, è molto restrittivo e, come si vedrà più avanti, porta a problemi "mal condizionati".
La seconda strada determina un polinomio di grado $m < n$, chiamato polinomio approssimatore, i cui coefficienti sono determinati in modo da minimizzare qualche misura della differenza tra i valori approssimati e i dati di appoggio.

3.1 Interpolazione polinomiale

Il problema che vogliamo risolvere è il seguente:

Problema 3.1 (Interpolazione Polinomiale)**.** Dati $n+1$ punti di appoggio (x_i, y_i), $i = 0, \ldots, n$, trovare il polinomio di grado n tale che:

$$P_n(x_i) = y_i \qquad i = 0, \ldots, n. \tag{3.2}$$

Si scriva dunque un polinomio di grado n come:

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n.$$

Imponendo le condizioni di interpolazione (3.2) si arriva al seguente sistema lineare, detto sistema di Vandermonde:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n-1} & x_{n-1}^2 & \ldots & x_{n-1}^n \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{n-1} \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix}$$

Purtroppo, questo sistema risulta molto malcondizionato e la sua soluzione numerica diventa assai inaccurata anche per piccoli valori di n, dell'ordine di 5 o 6. Per questo motivo tale tecnica non si usa quasi mai.

3.1.1 Polinomio interpolatore di Lagrange

Notiamo innanzitutto che tutti i polinomi di grado $m = n$ dell'insieme definito dalla (3.1) è uno spazio vettoriale di dimensione $n+1$ e che una base di tale spazio

è formata dalle potenze di x:

$$\mathcal{P}_n = \text{span}\{1, x, x^2, \ldots, x^n\}.$$

Questa peraltro è proprio la base definita dalla matrice di Vandermonde, per cui non va bene per i calcoli. Cerchiamo quindi una base diversa. A tal fine scriviamo il nostro polinomio come una combinazione di $n+1$ polinomi $L_i(x)$ tutti di grado n:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i L_i(x). \tag{3.3}$$

Si tratta ora di determinare la base $L_i(x)$ e i coefficienti α_i che risolvono il problema (3.1).
Si noti che perché le condizioni di interpolazione (3.2) siano soddisfatte da un polinomio della forma (3.3), basta richiedere che:

$$L_j(x_i) = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

In questo caso si vede immediatamente che $\alpha_i = y_i$, per cui:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i L_i(x). \tag{3.4}$$

Possiamo calcolare i polinomi di base a partire dai valori x_i notando che la funzione formata da tutti i monomi di x fatti con gli x_i si azzera in corrispondenza di ogni punto di appoggio:

$$F(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n) = 0 \qquad \forall x = x_i, i = 0, \ldots, n.$$

La $F(x)$ è un polinomio di grado $n+1$, e quindi dobbiamo tirare via un monomio se vogliamo avere un polinomio di grado n. Definiamo quindi il polinomio di grado n escludendo dalla precedente il monomio $(x - x_k)$:

$$F_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n}(x - x_i) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n),$$

Il polinomio che cerchiamo è dunque:

$$L_i(x) = \frac{F_k(x)}{F_k(x_k)}.$$

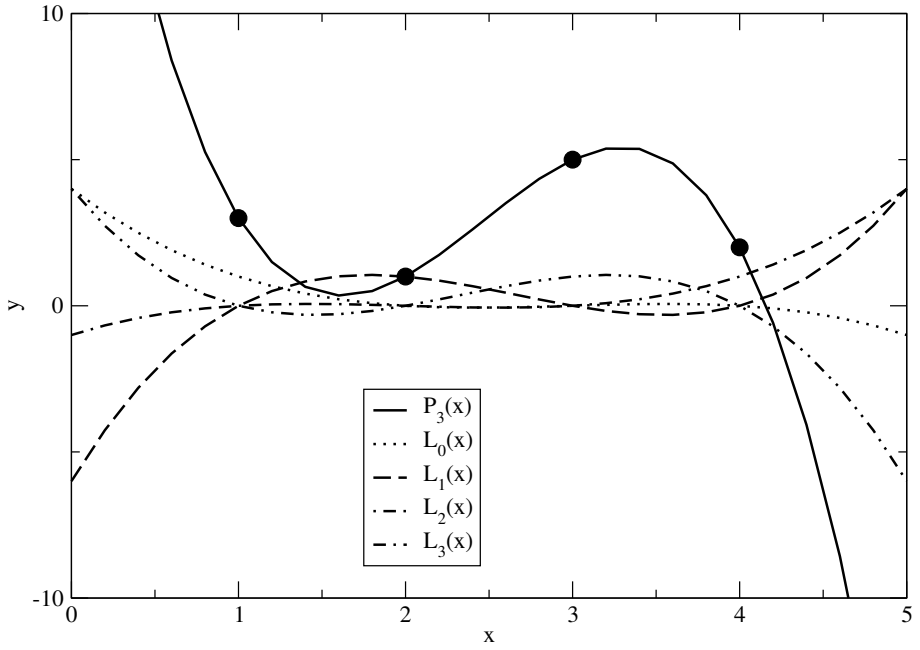


Figura 3.2: Punti di appoggio, polinomio interpolatore, e polinomi di Lagrange per l'esempio (3.2).

Esempio 3.2. Si vuole trovare il polinomio che interpola i seguenti punti:

x_i	1	2	3	4
y_i	3	1	5	2

Notiamo subito che il grado del polinomio sarà $n = 3$. Dovremo quindi calcolare $L_0(x), L_1(x), L_2(x), L_3(x)$:

$$\begin{aligned} L_0(x) &= \frac{(x-2)(x-3)(x-4)}{(1-2)(1-3)(1-4)} \\ L_1(x) &= \frac{(x-1)(x-3)(x-4)}{(2-1)(2-3)(2-4)} \\ L_2(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-4)}{(3-1)(3-2)(3-4)} \\ L_3(x) &= \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(4-1)(4-2)(4-3)}. \end{aligned}$$

Il polinomio che si ricava applicando la (3.4) è:

$$P_3(x) = y_0L_0(x)+y_1L_1(x)+y_2L_2(x)+y_3L_3(x) = 24-34.8333x+16x^2-2.16667x^3.$$

In figura 3.2 sono riportati i punti di appoggio assieme al polinomio interpolatore $P_3(x)$ e ai polinomi di base $L_0(x)$, $L_1(x)$, $L_2(x)$ e $L_3(x)$.

Per studiare la bontà della interpolazione polinomiale così ottenuta, bisogna guardare l'andamento dell'errore del modello matematico. Si assume quindi che i punti di appoggio (x_i, y_i) provengano da una funzione incognita $f(x)$. Si assume quindi che esista una funzione tale che $y_i = f(x_i)$ per $i = 0, \ldots, n$ e si vuole studiare come si comporta l'errore definito da:

$$E(x) = f(x) - P_n(x).$$

Sia $I_x = [\min_i x_i, \max_i x_i]$ l'intervallo di interpolazione, e prendiamo un punto t interno a I_x e diverso da tutti gli x_i. Se t conicide con uno degli x_i immediatamente abbiamo che $E(t) = 0$ e abbiamo finito. Altrimenti, cerchiamo una funzione $G(x)$ che si annulla in tutti i punti x_i e anche in t. Osserviamo che la (3.2) implica che $E(x)$ si annulla in tutti i punti x_i. Anche la funzione $F(x)$, per definizione, si annulla in tali punti. Costruiamo quindi la funzione:

$$G(x) = f(x) - P_n(x) + S_0(t)F(x).$$

Tale funzione, per quanto detto prima, si annulla in tutti gli x_i, e calcoliamo S_0 in maniera tale che $G(t) = 0$. Otteniamo:

$$S_0(t) = \frac{P_n(t) - f(t)}{F(t)}.$$

Siccome funzione $G(x)$ si annulla in $n + 2$ punti di appoggio ed è infintamente derivabile e quindi continua, il teorema di Rolle assicura che esistono $n + 1$ punti η_i, $i = 0, \ldots, n$ dove la derivata prima di $G(x)$ si annulla: $G'(\eta_i) = 0$. Esistono quindi n punti dove si annulla la derivata seconda, e quindi esiste un punto $\eta \in I_x$ dove si annulla la derivata $n + 1$-esima di $G(x)$. Tale punto sarà ovviamente funzione del punto t, per cui scriviamo $\eta(t)$. Un semplice calcolo mostra che:

$$G^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - S_0(t)(n + 1)!.$$

Imponendo ora $G^{(n+1)}(\eta(t)) = 0$, si identifica il valore di $S_0(t)$ in funzione della derivata $n + 1$-esima della $f(x)$:

$$S_0(t) = -\frac{f^{(n+1)}(\eta(t))}{(n + 1)!}.$$

Notando che possiamo far variare $t \in I_x$ con continuità, e riscrivendo quindi x al posto di t, si ha:

$$E(x) = f(x) - P_n(x) = F(x)\frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n + 1)!}. \tag{3.5}$$

Tale formula, chiamata formula del resto di Lagrange, ci dice che sostituendo alla funzione (incognita) f il suo polinomio interpolatore si incorre in un errore massimo che è proporzionale alla derivata $n + 1$-esima di f.

3.1.2 Interpolazione di Newton

Il polinomio di Lagrange è di difficile valutazione dal punto di vista numerico. Ogni volta che si deve aggiungere un punto nuovo di interpolazione (x_n+1, y_n+1), si deve ricalcolare tutto il polinomio. Per ovviare a questo problema si ricorre spesso ad una tecnica (detta di Newton) che permette una valutazione agevole di tale polinomio. Tale tecnica è basata su quantità chiamate *differenze divise* che si possono definire ricorsivamente:

$$f(x_0, x_1, \ldots, x_n) = \frac{f(x_1, \ldots, x_n) - f(x_0, \ldots, x_{n-1})}{x_n - x_0}, \tag{3.6}$$

con $f(x_i) = y_i$. Dati gli $n+1$ punti di appoggio (x_i, y_i), formiamo quindi la tabella (matrice):

$$\begin{array}{llllll}
x_0 & y_0 = f(x_0) & & & & \\
 & & f(x_0, x_1) & & & \\
x_1 & y_1 = f(x_1) & & f(x_0, x_1, x_2) & & \\
 & & f(x_1, x_2) & & & \\
x_2 & y_2 = f(x_2) & & & & \\
\ldots & & & & & \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & & f(x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n) \\
\ldots & & & & & \\
x_{n-1} & y_{n-1} = f(x_{n-1}) & & & & \\
 & & f(x_{n-1}, x_n) & & & \\
x_n & y_n = f(x_n) & & f(x_{n-1}, x_n, x) & & \\
 & & f(x_n, x) & & & \\
x & y = f(x) & & & &
\end{array}$$

Ad esempio, per n=2, otteniamo:

$$\begin{array}{llll}
x_0 & y_0 = f(x_0) & & \\
 & & f(x_0, x_1) & \\
x_1 & y_1 = f(x_1) & & f(x_0, x_1, x_2) \\
 & & f(x_1, x_2) & \\
x_2 & y_2 = f(x_2) & & \\
 & & f(x_2, x) & \\
x & y = f(x) & &
\end{array}$$

Dalla definizione di differenza divisa (eq. (3.6)), si ottiene:

$$\begin{aligned} f(x_1) &= f(x_0) + f(x_0, x_1)(x_1 - x_0) \\ f(x_2) &= f(x_1) + f(x_1, x_2)(x_2 - x_1) \\ f(x) &= f(x_2) + f(x_2, x)(x - x_2) \\ f(x_1, x_2) &= f(x_0, x_1) + f(x_0, x_1, x_2)(x_2 - x_0) \\ f(x_2, x) &= f(x_1, x_2) + f(x_1, x_2, x)(x - x_1) \\ f(x_1, x_2, x) &= f(x_0, x_1, x_2) + f(x_0, x_1, x_2, x)(x - x_0) \end{aligned}$$

Usando queste espressioni nelle differenze divise di ordine crescente e semplificando opportunamente, otteniamo:

$$\begin{aligned} f(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) \\ + f(x_0, x_1, x_2, x)(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2). \end{aligned}$$

Guardando a questa espressione, si vede che i primi 3 termini formano in polinomio di grado 2 che passa per i punti di appoggio $P_2(x_i) = y_i = f(x_i)$, per cui coincide con il polinomio interpolatore di ordine 2 (perché è unico). Quindi possiamo scrivere:

$$f(x) = P_2(x) + RF(x),$$

e confrontando quest'ultima con la (3.5), si vede subito che $R = f^{(3)}(\eta)/(3)!$. Generalizzando per n qualsiasi si avrà:

$$\begin{aligned} P_n(x) = f(x_0) + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) + \\ + \ldots + f(x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n)(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}) \\ = P_{n-1}(x) + f(x_0, x_1, x_2, \ldots, x_n)(x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{3.7}$$

da cui si vede che il polinomio interpolatore di grado n è facilmente costruibile ricorsivamente.

Osservazione 3.3. Si osservi che la differenza divisa di ordine 1 altro non è che un rapporto incrementale (cfr. Fig. 3.3). E' quindi ovvio che:

$$f(x_0, x_0) = \lim_{x_1 \to x_0} \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = f'(x_0)$$

e più in generale:

$$f(\overset{k+1 \text{ volte}}{x_0, x_0, \ldots, x_0}) = \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}.$$

E' possibile quindi includere come punti di appoggio alcuni valori delle derivate e costruire in maniera appropriata la tabella di Newton per ottenere il polinomio interpolatore che considera anche i valori dati delle derivate di f.

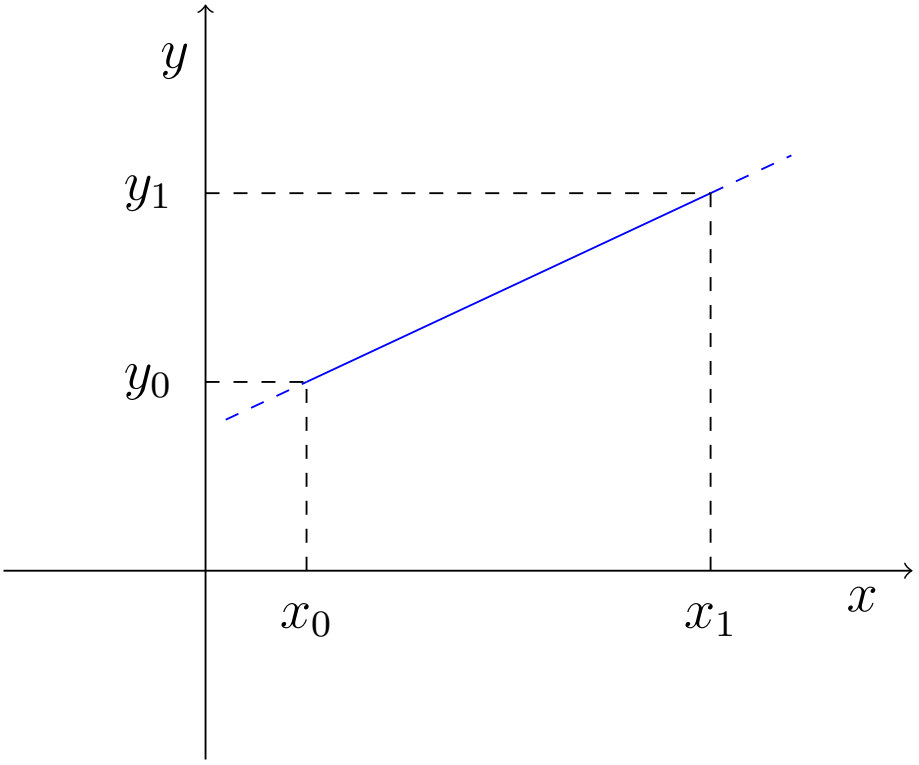


Figura 3.3: Interpolazione lineare di due punti

Osservazione 3.4. Si osservi che la tabella di Newton dipende dall'ordine con cui si considerano i punti di appoggio. In alcuni casi questo può portare in alcuni casi a instabilità numerica difficilmente risolvibile. Per garantire la stabilità dell'algoritmo bisogna impiegare un odrinamento dei punti di appoggio basato su sequenze particolari, come per esempio le sequenze di van der Corput o Leja [2].

Esempio 3.5. Siano dati i seguenti punti di appoggio:

x_i	0.1	0.5	1.1	1.8	2.5
y_i	11.0702	3.43895	3.37089	6.21211	20.3560

1. scrivere la tabella delle differenze divise di Newton;
2. determinare il polinomio di grado 4 che interpola i punti dati;
3. Sapendo che i punti di appoggio sono relativi alla funzione $f(x) = \exp(x)/\sin(x)$, dare una stima dell'errore massimo che si può commettere utilizzando il polinomio interpolatore al posto della funzione.

Svolgimento. In questo esercizio si ha $I_x = [0.1, 2.5]$.

1. La tabella delle differenze divise di Newton è:

$$\begin{array}{lllll}
0.1 & 11.0702 & & & \\
 & & -19.0780 & & \\
0.5 & 3.43895 & & 18.9646 & \\
 & & -11.3429 & & -9.26771 \\
1.1 & 3.37089 & & 3.20947 & & 5.59568 \\
 & & 4.05888 & & 4.16193 & \\
1.8 & 6.21211 & & 11.5333 & & \\
 & & 20.2055 & & & \\
2.5 & 20.3560 & & & &
\end{array}$$

2. Il polinomio interpolatore diventa quindi:

$$\begin{aligned}
P_4(x) &= 11.0702 \\
&\quad -19.0780(x-0.1) \\
&\quad +18.9646(x-0.1)(x-0.5) \\
&\quad -9.26771(x-0.1)(x-0.5)(x-1.1) \\
&\quad +5.59568(x-0.1)(x-0.5)(x-1.1)(x-1.8) \\
&= 14.9899 - 44.4959x + 55.8154x^2 - 28.8526x^3 + 5.59568x^4
\end{aligned}$$

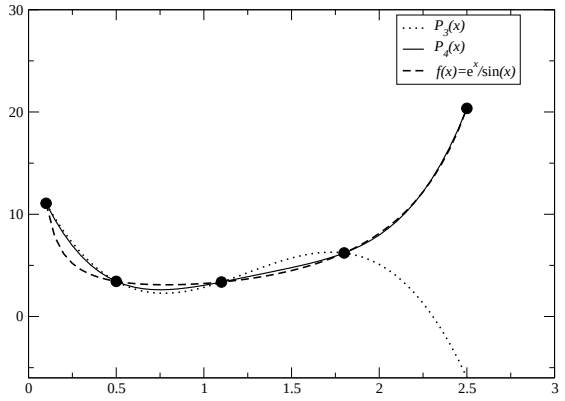


Figura 3.4:

E' agevole trovare il polinomio di grado 3 che interpola i primi 4 punti della tabella: coincide con i primi 4 termini dell'equazione precedente, e vale:

$$\begin{aligned} P_3(x) &= 11.0702 \\ &\quad -19.0780(x-0.1) \\ &\quad +18.9646(x-0.1)(x-0.5) \\ &\quad -9.26771(x-0.1)(x-0.5)(x-1.1) \\ &= 14.436 - 37.0368x + 34.7197x^2 - 9.26771x^3 \end{aligned}$$

La figura 3.4 mostra la funzione originale, i punti di appoggio e i polinomi $P_3(x)$ e $P_4(x)$.

3. La stima dell'errore massimo che si può commettere usa la formula del resto di Lagrange (eq. (3.5)). Possiamo scrivere infatti:

$$|E_n(x)| \leq \max_{x \in I_x} \left[|F(x)| \frac{\left| f^{(n+1)}(x) \right|}{(n+1)!} \right].$$

In questo esercizio $n = 4$, e quindi si ha:

$$|E_4(x)| \leq \max_{x \in I_x} \left[|F(x)| \frac{\left| f^{(5)}(x) \right|}{5!} \right].$$

Con conti lunghi ma semplici si ottiene che la derivata quinta della $f(x)$ vale:

$$f^{(5)}(x) = \frac{e^x}{\sin^6(x)} \left[-478\cos(x) - 3\cos(3x) + \cos(5x) + \right.$$
$$\left. 230\sin(x) + 85\sin(3x) - \sin(5x)\right],$$

e risulta essere una funzione crescente per $x \in I_x$, per cui il suo valore massimo si ottiene per $x = 2.5$ e vale $f^(5)(2.5) = 39793.9$. Usando Newton Raphson per trovare gli zeri di $F'(x)$ si trova che la $F(x) = (x - 0.1)(x - 0.5)(x - 1.1)(x-1.8)(x-2.5)$ assume valore massimo in $x* = 2.25569$ che vale $|F(x^*)| = 0.486952$. Mettendo tutto insieme otteniamo:

$$|E_4(x)| \leq |F(x^*)| f^{(5)}(2.5)/5! = 0.486952 * 39793.9/120 = 161.481.$$

Si noti che questo valore è assai pessimistico. Analizzando l'errore vero $E_4(x) = P_4(x) - f(x)$, e usando il metodo di Newton Raphson per trovare gli zeri della sua derivata prima, si scopre che la funzione $E_4'(x)$ ha 5 zeri in I_x che valgono $x_1 = 0.193095$, $x_2 = 0.734279$, $x_3 = 1.42398$, $x_4 = 2.03462$, $x_5 = 2.40515$, e il valore massimo è molto più piccolo e vale:

$$\max_{x \in I_x} |E_4(x)| = E_4(x_1) = 1.95803.$$

3.1.3 Fenomeno di Runge e la stabilità dell'interpolazione polinomiale

L'interpolazione polinomiale con punti equispaziati ($x_i - x_{i-1} = h = \text{cost}$, $i = 1, \ldots, n$) può diventare instabile all'aumentare di n. Questa stabilità si manifesta, in funzione della regolarità della funzione interpolanda, anche per valori piccoli di n. Prima di studiare la stabilità vediamo un esempio famoso, noto col nome di *fenomeno di Runge*.

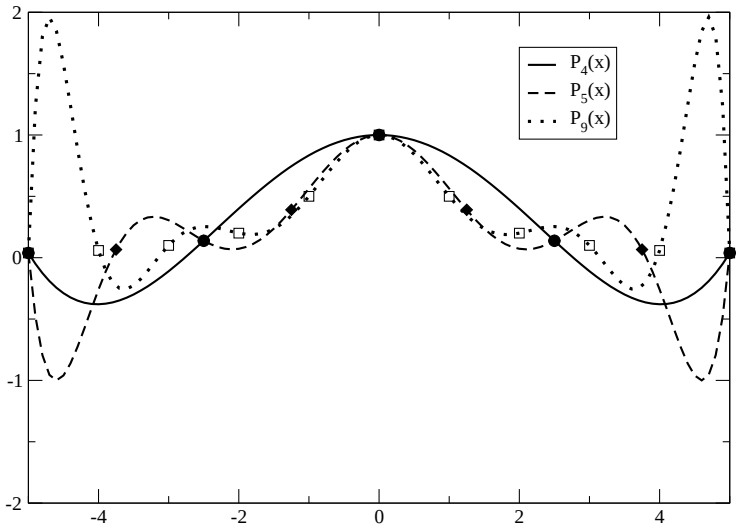


Figura 3.5: Polinomi interpolanti la funzione $f(x) = 1/(1+x^2)$ in $I = [-5, 5]$ con n punti di appoggio equispaziati per valori di n pari a 5, 6, 10.

-5	0.038462										
-2.5	0.13793	0.0397878									
0	1	0.34483	0.061008								
2.5	0.13793	-0.34483	-0.13793	-0.026525							
5	0.038462	-0.039788	0.061008	0.026525	0.0053050						

-5	$3.846E{-2}$										
-4	$5.882E{-2}$	$2.036E{-2}$									
-3	0.1	$4.118E{-2}$	$1.041E{-2}$								
-2	0.2	0.1	$2.941E{-2}$	$6.335E{-3}$							
-1	0.5	0.3	0.1	$2.353E{-2}$	$4.299E{-3}$						
0	1	0.5	0.1	0	$-5.882E{-3}$	$-2.036E{-3}$					
1	0.5	-0.5	-0.5	-0.2	$-5E{-2}$	$-8.824E{-3}$	$-1.131E{-3}$				
2	0.2	-0.3	0.1	0.2	0.1	$3E{-2}$	$6.471E{-3}$	$1.086E{-3}$			
3	0.1	-0.1	0.1	0	$-5E{-2}$	$-3E{-2}$	$-1E{-2}$	$-2.353E{-3}$	$-4.299E{-4}$		
4	$5.882E{-2}$	$-4.118E{-2}$	$2.941E{-2}$	$-2.353E{-2}$	$-5.882E{-3}$	$8.824E{-3}$	$6.471E{-3}$	$2.353E{-3}$	$5.882E{-4}$	$1.131E{-4}$	
5	$3.846E{-2}$	$-2.036E{-2}$	$1.041E{-2}$	$-6.335E{-3}$	$4.299E{-3}$	$2.036E{-3}$	$-1.131E{-3}$	$-1.086E{-4}$	$-4.299E{-4}$	$-1.131E{-4}$	$-2.262E{-5}$

Tabella 3.1: Tabelle delle differenze divise di Newton relative all'Esempio 3.6, per $n = 5$ punti di appoggio (pannello superiore) e per $n = 10$ punti di appoggio (pannello inferiore)

Esempio 3.6 (Fenomeno di Runge)**.** Proviamo ad interpolare la funzione:

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2} \qquad x \in I_x = [-5, 5]$$

con una suddivisione equispaziata dei punti di appoggio. Quindi definiamo $x_i = x_0 + ih$ con $x_0 = -5$ e $h = 10/n$. Studiamo i casi $n = 5$ e $n = 10$. Le tabelle delle differenze divise di Newton sono riprtate in 3.1, mentre l'andamento dei polinomi $P_4(x)$, $P_7(x)$ e $P_9(x)$ sono riportati in Figura 3.5. Si vede dai risultati che i polinomi interpolatori di grado crescente tendono a mostrare oscillazioni sempre più grandi, sintomo di instabilitià numerica.
Ovviamente, si potrebbe in teoria pensare di far tendere n all'infinito, in modo da coprire uniformemememente l'intervallo I_x. Il risultato fondamentale di Runge è la dimostrazione che, se le ascisse dei punti di appoggio sono equispaziate, esisterà sempre qualche punto $x \in I_x$ in cui il resto di Lagrange è diverso da zero, e cioè:

$$\lim_{n\to\infty} |f(x) - P_n(x)| \neq 0.$$

Questo fatto ci dice che il resto di Lagrange in generale non può convergere uniformemente a zero se i punti di apppoggio sono equispaziati.

Per studiare la stabilità del problema dell'interpolazione analizziamo il resto di Lagrange (eq. (3.5)) al variare del numero di punti di appoggio $n + 1$. Ovviamente in generale si possono scegliere infinte combinazioni di $n + 1$ punti di appoggio $(x_i, f(x_i))$, $x_i \in I_x$. Raccogliamo le ascisse degli $n + 1$ punti di appoggio, comunque prese, in una matrice X (la matrice di interpolazione) di dimensione $n+1 \times n+1$ in cui ogni riga corrisponde ad una precisa scelta x_i, $i = 0, \ldots, n$. Indichiamo quindi con $P_{n,X}(x)$ un polinomio di grado n ottenuto utilizzando una riga della matrice X come ascisse dei punti di appoggio, e indichiamo con $\mathcal{P}_{n,X}$ la famiglia di tali polinomi. Chiamiamo con $P^*_{n,X}(x)$ il miglior polinomio interpolatore in $\mathcal{P}_{n,X}$, cioè $P^*_{n,X}(x)$ indica quel polinomio che minimizza la differenza (massima) tra la funzione $f(x)$ e il polinomio stesso, al variare dei punti di appoggio x_i, cioè della matrice X. In altre parole, $P^*_{n,X}(x)$ soddisfa:

$$E^*_n(X) = \max_{x\in I_x} \left|f(x) - P^*_{n,X}(x)\right| \leq \max_{x\in I_x} |f(x) - P_{n,X}(x)| = E_n(X) \qquad \forall P_{n,X}(x) \in \mathcal{P}_{n,X}.$$

Esiste il seguente risultato:

Proposizione 3.1. *Sia $f \in C^0(I_x)$ e X una matrice di interpolazione in I_X. Allora:*

$$E_n(X) \leq E^*_n(X)(1 + \Lambda_n(X)), \qquad n = 0, 1, \ldots,$$

dove $\Lambda_n(X)$ è detta costante di Lebesgue di X.

Nel caso dell'esempio di Runge, si può far vedere che la costante di Lebesgue tende a infinito all'aumentare di n.
Per studiare la stabilità dell'algoritmo di interpolazionae e il malcondizionamento del problema collegato, assumiamo le ascisse dei punti di appoggio esatte e consideriamo un insieme di valori perturbati delle ordinate dei punti di appoggio (i nostri dati), che indichiamo con $(x_i, \tilde{f}(x_i))$, $i = 0, \ldots, n$. indichiamo con $\tilde{P}_n(x)$ il polinomio interpolante tali dati. Allora si ha il seguente risultato:

$$\begin{aligned}\max_{x\in I_x}\left|P_n(x)-\tilde{P}_n(x)\right| &= \max_{x\in I_x}\left|\sum_{j=0}^{n}\left(f(x_j)-\tilde{f}(x_j)\right)L_j(x)\right| \\ &\leq \Lambda_n(X)\max_{j=0,\ldots,n}\left|f(x_j)-\tilde{f}(x_j)\right|.\end{aligned}$$

La costante di Lebesgue è dunque anche il numero di condizionameno del problema di interpolazione, per cui tale problema risulta ben condizionato solo se Λ_n è piccola. Purtroppo, si può dimostrare che in generale Λ_n aumenta all'aumentare di n, dando quindi luogo a potenziali instabilità per grandi valori di n, come visto nell'esempio 3.6.

3.1.4 Ancora sul polinomio di Lagrange

E' possibile riscrivere il polinomio di Lagrange in maniera tale da ricavare una forma che permetta l'aggiunta di un nuovo punto con un costo computazionale analogo alla formula ricorsiva del polinomio di Newton (Eq. (3.7)) pari a $\mathcal{O}(() n)$. Per fare ciò definiamo i pesi w_i come

$$w_i = \frac{1}{F_k(x_k)}, \qquad i = 0, \ldots, n$$

e notiamo che l'i-esimo polinomio di base di Lagrange può quindi essere scritto:

$$L_i(x) = F(x)\frac{w_i}{x - x_i},$$

per cui il polinomio interpolatore di grado n si scrive:

$$P_n(x) = F(x)\sum_{i=0}^{n}\frac{w_i}{x - x_i}f_i. \tag{3.8}$$

Questa formula non è ricorsiva come in (3.7) ma l'aggiunta di un nuovo punto richiede un numero di operazioni proporzionale a n ($\mathcal{O}(() n)$), e quindi ha lo stesso costo computazionale $\mathcal{O}(() n^2)$ della formula di Newton. Inoltre ha il vantagio importante, rispetto alla formula di Newton, di non essere influenzata dall'ordine con cui si considerano i punti. L'algoritmo $\mathcal{O}(() n)$ per il calcolo dei pesi può essere descritto come:

ALGORITMO DI LAGRANGE BI:

$w_0^{(0)} = 1$;

PER $k = 1, 2, \ldots, n$;

1: PER $j = 0, 2, \ldots, k-1$;

1.a: $w_j^{(k)} = (x_j - x_k) w_j^{k-1}$

2: $w_k^{(k)} = \prod_{j=0}^{k-1} (x_k - x_j)$

PER $k = 0, 2, \ldots, n$;

1: $w_k^{(k)} = 1/w_k^{(k)}$

Un altro vantaggio della formula (3.8) è che tutte le quantità con complessità computazionale $\mathcal{O}\left(() n^2\right)$ sono indipendenti dai valori di $y_i = f(x_i)$, per cui è possibile valutare in maniera molto efficiente i polinomi interpolatori di diversi insiemi di punti di appoggio che abbiano le x_j in comune con lo stesso costo computazionale (molto utile per la quadratura, ad esempio).
La formula baricentrica può anche essere scritta in maniera più semplice, anche se del tutto equivalente. Si noti che ovviamente noi possiamo pensare di interpolare con un polinomio di grado n la funzione costante $f(x) = 1$. Facendo così si ottiene:

$$1 = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) = F(x) \sum_{i=0}^{n} \frac{w_i}{x - x_i}.$$

Dividendo (3.8) per la precedente, si ottiene subito:

$$P_n(x) = \frac{\sum_{i=0}^{n} \frac{w_i}{x - x_i} f_i}{\sum_{i=0}^{n} \frac{w_i}{x - x_i}} \tag{3.9}$$

che in letteratura è nota come formula di Lagrange baricentrica, per la quale vale chiaramente una formula ricorsiva simile a (3.7).

3.2 Approssimazione polinomiale

Passiamo ora al problema dell'approssimazione polinomiale. Il problema è il seguente:

Problema 3.7 (Approssimazione Polinomiale)**.** Dati $n+1$ punti di appoggio (x_i, y_i), $i = 0, \ldots, n$, trovare il polinomio di grado $m < n$ tale che una certa misura della differenza tra i valori osservati e il polinomio sia minimo:

$$\min_{P_m(x) \in \mathcal{P}_m} \left[\mathrm{d}(P_m(x_i) - y_i)_{i=0,\ldots,n} \right],$$

dove $\mathrm{d}(P_m(x_i) - y_i)_{i=0,\ldots,n}$ rappresenta la misura accennata sopra.

L'opportuna definizione della misura d distingue i vari metodi. In questo capitolo ci occuperemo dell'approssimazione "ai minimi quadrati" nella quale la misura d è definita usando gli scarti quadratici. Distingueremo tra scarti verticali e scarti orizzontali.

3.2.1 Retta ai minimi quadrati

Siano date le $n+1$ osservazioni (x_i, y_i). Vogliamo determinare un polinomio di grado $m = 1$ $P_1(x) = a_0 + a_1 x$ che minimizza la somma degli scarti quadratici S definita come:

$$\mathrm{d} = S(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{n} \left[P_1(x_i) - y_i \right]^2 = \sum_{i=0}^{n} \left[a_0 + a_1 x_i - y_i \right]^2.$$

Si noti che la somma degli scarti quadratici è funzione dei coefficienti del polinomio a_0, a_1. Una condizione necessaria perché la somma sia minima è che si annullino tutte le derivate parziali. L'esistenza e l'unicità del punto di minimo derivano dall'analisi della funzione S, che essendo quadratica garantisce tale risultato. Usando la regola della derivata di funzione composta si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a_0} &= 2 \sum_{i=0}^{n} \left[a_0 + a_1 x_i - y_i \right] = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} &= 2 \sum_{i=0}^{n} \left[a_0 + a_1 x_i - y_i \right] x_i = 0 \end{aligned}$$

Semplificando il 2 e applicando la proprietà distributiva si ottiene il seguente sistema lineare:

$$\begin{cases} (n+1) a_0 & + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i \right) a_1 & = \sum_{i=0}^{n} y_i \\ \left(\sum_{i=0}^{n} x_i \right) a_0 & + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2 \right) a_1 & = \sum_{i=0}^{n} x_i y_i. \end{cases}$$

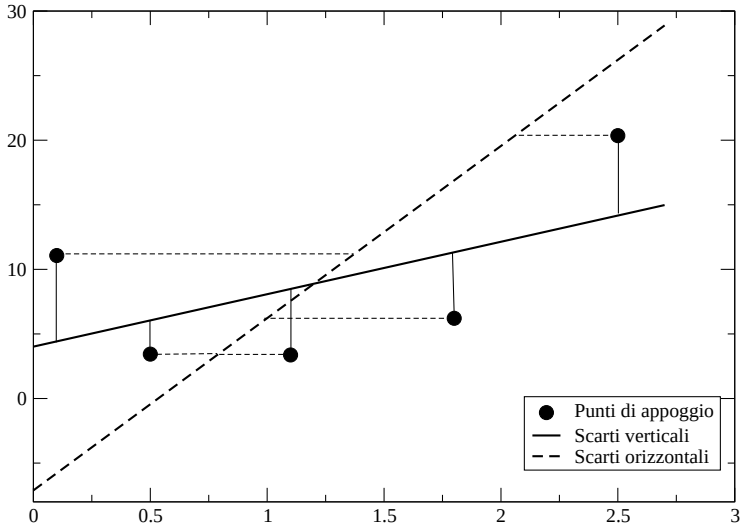


Figura 3.6: Punti di appoggio e rette ai minimi quadrati che minimizzano gli scarti verticali e gli scarti orizzontali per l'esempio 3.8.

La soluzione di tale problema fornisce i coefficienti della retta ai minimi quadrati ricercata.

Esempio 3.8. Siano dati i seguenti punti di appoggio (gli stessi dell'es. 3.5)::

x_i	0.1	0.5	1.1	1.8	2.5
y_i	11.0702	3.43895	3.37089	6.21211	20.3560

1. determinare i coefficienti della retta ai minimi quadrati che minimizza gli scarti verticali;

2. determinare i coefficienti della retta ai minimi quadrati che minimizza gli scarti orizzontali;

3. individuare quale delle due rette approssima meglio i dati nel senso dei minimi quadrati.

Svolgimento. Vogliamo quindi determinare il polinomio di grado 1 $P_1(x) = a_0 + a_1 x$ che minimizza la somma degli scarti quadratici verticali e successivamente il

polinomio di grado 1 $P_1'(x) = b_0 + b_1 x$ che minimizza la somma degl iscarti quadratici orizzontali. Impostiamo la seguente tabella:

i	x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$	y_i^2
0	0.1	11.0702	0.01	1.10702	122.549
1	0.5	3.43895	0.25	1.71948	11.8264
2	1.1	3.37089	1.21	3.70798	11.3629
3	1.8	6.21211	3.24	11.1818	38.5903
4	2.5	20.3560	6.25	50.8900	414.367
Tot	6	44.4482	10.96	68.6063	598.696

1. la somma degli scarti quadratici verticali è data da:

$$S_v(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{4} \left[a_0 + a_1 x_i - y_i\right]^2 .$$

Ripetendo gli sviluppi riportati sopra si trova che il sistema da risolvere per calcolare a_0 e a_1 è:

$$\begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 6 & 10.96 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 44.4482 \\ 68.6063 \end{bmatrix}$$

la cui soluzione è $a_0 = 4.01671$ e $a_1 = 4.06077$, per cui si ha:

$$P_1(x) = 4.01671 + 4.06077x$$

2. Per minimizzare gli scarti quadratici orizzontali, osserviamo che basta procedere come nel modo precedente ma scambiando il ruolo di x e y. Quindi scriviamo il polinomio come $P_1^*(y) = b_0^* + b_1^* y$ e andiamo a minimizzare la la somma degli scarti quadratici orizzontali data da:

$$S_o^*(b_0^*, b_1^*) = \sum_{i=0}^{4} \left[b_0^* + b_1^* y_i - x_i\right]^2 .$$

Ripetendo gli sviluppi riportati sopra si trova che il sistema da risolvere per calcolare b_0^* e b_1^* è:

$$\begin{bmatrix} n+1 & \sum y_i \\ \sum y_i & \sum y_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^* \\ b_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum x_i \\ \sum y_i x_i \end{bmatrix}$$

e quindi

$$\begin{bmatrix} 5 & 44.4482 \\ 44.4482 & 598.696 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0^* \\ b_1^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 68.6063 \end{bmatrix}$$

la cui soluzione è $b_0^* = 0.533239$ e $a_1 = 0.750044 \times 10^{-1}$, per cui si ha:

$$P_1^*(y) = 0.533239 + 0.750044 \times 10^{-1}\, y$$

e scrivendo il polinomio in forma canonica in funzione di x otteniamo:

$$P_1'(x) = -7.10944 + 13.3326\, x.$$

I grafici dei due polinomi con i punti di appoggio sono mostrati in Figura 3.6.

3. Per verificare quale delle due rette ha migliori proprietà di approssimazione, andiamo a verificare le somme degli scarti quadratici. Otteniamo:

$$S_v = \sum_{i=0}^{4} \left[4.01671 + 4.06077\, x_i - y_i\right]^2 = 141.566$$
$$S_o = \sum_{i=0}^{4} \left[-7.10944 + 13.3326\, x_i - y_i\right]^2 = 464.799$$

da cui si deduce che l'approssimazione migliore si ottiene con la retta che minimizza gli scarti verticali. Si noti che per questo confronto di ottimalità abbiamo usato il S_o e non S_o^*. Infatti il valore di S_o sopra indicato non è uguale a quello di S_o^*, mentre il punto di minimo delle due somme è lo stesso ma rappresentato in sistemi di riferimento diversi. E' quindi importante usare lo stesso sistema di riferimento quando si fanno i confronti di ottimalità, e quindi usare le somme degli scarti quadratici riferite allo stesso sistema $x - y$.

3.2.2 Polinomio ai minimi quadrati

Siano date le $n+1$ osservazioni (x_i, y_i). Vogliamo quindi determinare un polinomio di grado $m < n$ $P_m(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_m x^m$ che minimizza la somma degli scarti quadratici S definita come:

$$\mathrm{d} = S(a_0, a_1, \ldots, a_m) = \sum_{i=0}^{n} \left[P_m(x_i) - y_i\right]^2.$$

Si noti che la somma degli scarti quadratici è funzione dei coefficienti del polinomio $a_0, a_1, \ldots, a_m$. Una condizione necessaria perché la somma sia minima è che si annullino tutte le derivate parziali. L'esistenza e l'unicità del punto di minimo derivano dall'analisi della funzione S, che essendo quadratica garantisce tale risultato.

Usando la regola della derivata di funzione composta si ottiene:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial a_0} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[P_m(x_i)-y_i\right]=0\\
\frac{\partial S}{\partial a_1} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[P_m(x_i)-y_i\right]x_i=0\\
\frac{\partial S}{\partial a_2} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[P_m(x_i)-y_i\right]x_i^2=0\\
&\dots\\
\frac{\partial S}{\partial a_m} &= 2\sum_{i=1}^{n}\left[P_m(x_i)-y_i\right]x_i^m=0.
\end{aligned}$$

Semplificando il 2, utilizzando l'espressione completa di $P_m(x)$ e applicando la proprietà distributiva si ottiene il seguente sistema lineare:

$$\begin{cases}
ma_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)a_2 + \dots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} y_i\\
\left(\sum_{i=0}^{n} x_i\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^3\right)a_2 + \dots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i y_i\\
\left(\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^3\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^4\right)a_2 + \dots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2}\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i^2 y_i\\
\dots\\
\left(\sum_{i=0}^{n} x_i^m\right)a_0 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+1}\right)a_1 + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{m+2}\right)a_2 + \dots + \left(\sum_{i=0}^{n} x_i^{2m}\right)a_m = \sum_{i=0}^{n} x_i^m y_i
\end{cases}$$

che è certamente simmetrico e definito positivo. Definendo la matrice A come:

$$A=\begin{bmatrix}
1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^m\\
1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^m\\
1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^m\\
\dots & & & & \\
1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^m
\end{bmatrix}$$

si verifica che il sistema dei minimi quadrati si può scrivere in notazione matriciale come:

$$A^T A a = b$$

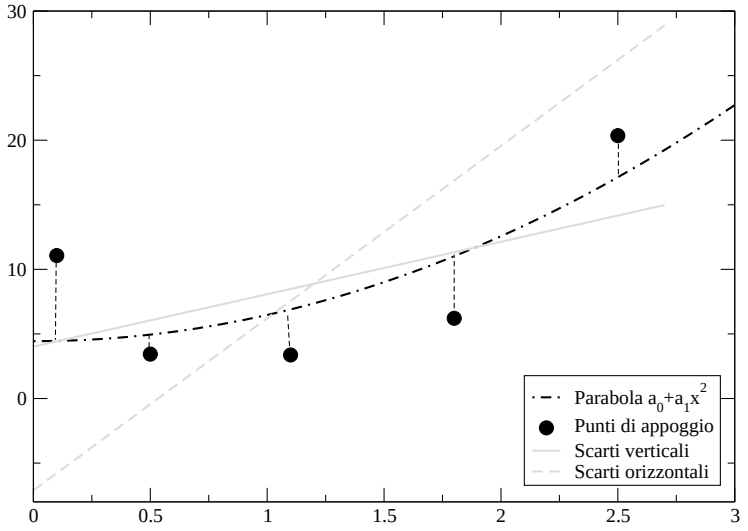


Figura 3.7: Punti di appoggio e parabola ai minimi quadrati che minimizza gli scarti verticali. In grigio sono mostrate per confronto le rette ai minimi quadrati dell'esempio 3.8.

dove il vettore incognito è $a = (a_0, a_1, \ldots, a_m)^T$ e il vettore termini noti è dato da $b = A^T y$ con $y = (y_0, \ldots, y_n)^T$. Si può notare che la matrice $A^T A$ è non singolare. Infatti, se fosse singolare esisterebbe un vettore a tale per cui $A^T Aa = 0$. Questo è vero se $Aa = 0$. Quest'ultimo sistema si può scrivere come:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \ldots + a_m x_0^m = 0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_m x_1^m = 0 \\ a_0 + a_1 x_2 + \ldots + a_m x_2^m = 0 \\ \\ \ldots \\ \\ a_0 + a_1 x_n + \ldots + a_m x_n^m = 0, \end{cases}$$

Questo sistema ha l'unica soluzione $a = 0$, perché altrimenti si avrebbe un polinomio di grado m con $n > m$ radici, e questo è impossibile.

Esempio 3.9. Siano dati i seguenti punti di appoggio (gli stessi dell'es. 3.9)::

x_i	0.1	0.5	1.1	1.8	2.5
y_i	11.0702	3.43895	3.37089	6.21211	20.3560

1. determinare i coefficienti della parabola della forma:

   $$P_2(x) = a_0 + a_1\, x^2$$

   che minimizza gli scarti verticali nel senso dei minimi quadrati;

2. verificare che tale parabola raggiunge un grado di approssimazione migliore della retta ai minimi quadrati calcolata nell'esempio 3.8.

Svolgimento.

1. Vogliamo determinare il polinomio di grado 2 $P_2(x) = a_0 + a_1 x^2$ che minimizza la somma degli scarti quadratici verticali. Notiamo che la somma è ancora funzione di due incognite a_0 e a_1:

   $$S_2(a_0, a_1) = \sum_{i=0}^{4} \left[a_0 + a_1\, x_i^2 - y_i\right]^2.$$

   Imponendo l'annullarsi delle due derivate parziali, otteniamo il seguente sistema:

   $$\begin{cases} 5a_0 & + \left(\displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right) a_1 & = \displaystyle\sum_{i=0}^{n} y_i \\ \left(\displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i^2\right) a_0 & + \left(\displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i^4\right) a_1 & = \displaystyle\sum_{i=0}^{n} x_i^2 y_i. \end{cases}$$

i	x_i^2	x_i^4	y_i	$x_i^4 y_i$
0	0.01	0.0001	11.0702	0.110702
1	0.25	0.0625	3.43895	0.859737
2	1.21	1.4641	3.37089	4.07878
3	3.24	10.498	6.21211	20.1272
4	6.25	39.063	20.3560	127.225
Tot	10.96	51.087	44.4482	152.401

   Il sistema lineare diventa quindi:

   $$\begin{bmatrix} 5 & 10.9600 \\ 10.9600 & 51.087 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 44.4482 \\ 152.401 \end{bmatrix}$$

   la cui soluzione è $a_0 = 4.43709$ e $a_1 = 2.03127$, per cui si ha:

   $$P_2(x) = 4.43709 + 2.03127\, x^2$$

   La parabola è disegnata in Figura 3.7, dove sono anche disegnate per confronto e rette dell'esercizio precedente.

4 Quadratura numerica

In questo capitolo ci occupiamo di trovare il valore dell'integrale definito:

$$I = \int_a^b f(x)\, dx. \tag{4.1}$$

Si noti che il calcolo numerico non si occupa di analisi simbolica, per cui non sarà possibile trovare primitive, ma solamente trovare approssimazioni dell'integrale definito descritto in (4.1). Ci limiteremo a considerare integrali monodimensionali per semplicità. L'estensione a più dimensioni richiede concetti di interpolazione multivariata che non abbiamo affrontato.
L'idea fondamentale che vogliamo sfruttare parte dall'osservazione che in generale conosciamo la funzione integranda in tutti i punti, per cui possiamo procedere a interpolare la funzione con un polinomio opportuno e calcolare il valore di I come integrale del polinomio interpolatore. Una seconda idea molto utile è di sfruttare la linearità dell'operatore di integrale per arrivare alla cosidette formula composte. Si tratta di sudividere l'intervallo $[a, b]$ in n sottointervalli di ampiezza h_j tali che $x_j = x_0 + jh_j$, $j = 0, 1, \ldots, n$, con $x_0 = a$ e $x_n = b$; se i sottointervalli hanno ampiezza costante $h_j = h$, allora $h = (b - a)/n$. Con queste definizioni si ha immediatamente:

$$I = \int_a^b f(x)\, dx = \sum_{j=1}^{n} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(s)\, ds. \tag{4.2}$$

4.1 Formule di quadratura con punti di appoggio equispaziati

4.1.1 Il metodo dei trapezi

Vogliamo approssimare il valore di I dell'Eq. (4.1). Scegliamo di usare un polinomio interpolatore di grado 1 (una retta) e scegliamo come punti di appoggio gli estremi dell'intervallo: $\{(a, f(a)), (b, f(b))\}$. Scriviamo la tabella del polinomio di Newton:

$$\begin{array}{ll} a & f(a) \\ b & f(b) \end{array} \quad \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

e scriviamo il polinomio di grado 1 come:

$$P_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a).$$

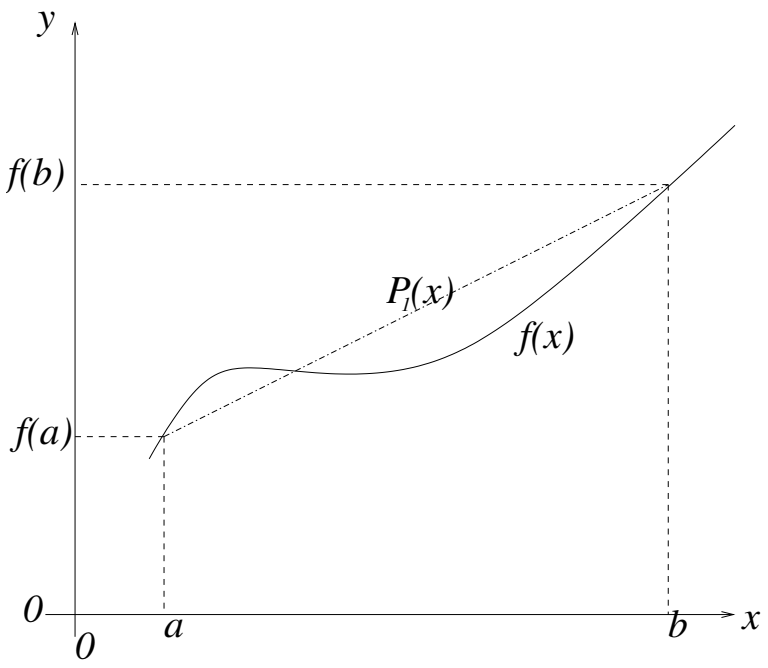


Figura 4.1: Interpretazione geometrica del metodo dei trapezi

Sostiutiamo quindi $P_1(x)$ al posto di $f(x)$ in (4.1) ottenendo:

$$\begin{aligned} I \approx I_h &= \int_a^b P_1(x)\,dx = f(a)x\Big|_a^b + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\left[\frac{x^2}{2} - ax\right]_a^b \\ &= f(a)(b-a) + \frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{(b-a)^2}{2} \\ &= (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}. \end{aligned}$$

che è la cosidetta *formula dei trapezi*. Il nome deriva dall'interpretazione geometrica dell'integrale come il valore dell'area del trapezio di Figura 4.1.

L'errore che si commette è dato dall'integrale della formula del resto di Lagrange:

$$\begin{aligned} I - I_h &= \int_a^b (f(x) - P_1(x))\,dx = \int_a^b E(x)\,dx = \int_a^b F(x)\frac{f"(\eta)}{6}\,dx \\ &= \frac{f"(\xi)}{6}\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = -\frac{(b-a)^3}{12}f"(\xi). \end{aligned}$$

Figura 4.2: Suddivisione dell'intervallo $[a, b] \in \mathbb{R}$ in punti equispaziati.

Riassumendo, la formula dei trapezi I_T e il suo errore E_T sono dati da:

$$I_T = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}; \tag{4.3}$$

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{12} f"(\xi). \tag{4.4}$$

Si osservi che, coerentemente con il grado del polinomio interpolatore, il metodo dei trapezi è esatto (errore nullo) se la funzione integranda fosse una retta. L'ordine del polinomio per cui la formula di quadratura è esatta è detto *ordine di accuratezza*.

4.1.2 Le Formule di Newton Cotes

Si può estendere il procedimento precedente a polinomi di ordine n. Ovviamente, si ha la libertà di scelta dei punti di appoggio: scegliendo punti equispaziati si ottengono le formule di Newton Cotes. Sia dunque $\{(x_j, f(x_j))\}$, $j = 0, \ldots, n$ l'insieme dei punti di appoggio distribuiti uniformemente nell'intervallo $[a, b]$, per cui $x_0 = a$, $x_n = b$, $x_j = x_0 + jh$, $h = (b-a)/n$ (si veda la Figura 4.2). Il generico punto $x \in [a, b]$ può essere descritto da una coordinata s intrinseca all'intervallo $[0, n]$ per cui:

$$x = x_0 + sh \qquad\qquad s \in \mathbb{R} \text{ e } 0 \leq s \leq n.$$

Il polinomio di Lagrange che interpola i punti di appoggio è dato da:

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

e il valore approssimato dell'integrale è dato da:

$$I_h = \int_a^b P_n(x)\, dx.$$

Il calcolo dell'integrale è effettuato tramite il cambio di variabile da x a s. Per fare ciò osserviamo che per $x = a$ si ha $s = 0$, per $x = b$, $s = n$, e lo jacobiano della trasformazione è $|J| = h$. Otteniamo dunque:

$$I_h = \int_a^b P_n(x)\, dx = h \sum_{j=0}^{n} f(x_j) \int_0^n L_j^{(n)}(s)\, ds.$$

Essendo $h = (b-a)/n$, possiamo scrivere le formule di Newton-Cotes come:

$$I_h = (b-a)\sum_{j=0}^{n} C_j^{(n)} f(x_j), \qquad C_j^{(n)} = \frac{1}{n}\int_0^n L_j^{(n)}(s)\, ds, \tag{4.5}$$

dove $L_j^{(n)}(s)$ sono i polinomi di Lagrange di grado n e valgono:

$$L_j^{(n)}(s) = \frac{s(s-1)(s-2)\dots(s-j+1)(s-j-1)\dots(s-n+1)(s-n)}{j(j-1)(j-2)\dots(1)(-1)\dots(j-n+1)(j-n)}.$$

Possiamo quindi specializzare tali formule calcolando i valori dei coefficienti $C_j^{(n)}$ una volta scelto il valore di n.
Per $n = 1$ (polinomio di grado 1) otteniamo:

$$C_0^{(1)} = \int_0^1 L_0^{(1)}(s)\, ds = \int_0^1 \frac{s-1}{-1}\, ds = s - \frac{s^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$
$$C_1^{(1)} = \int_0^1 L_1^{(1)}(s)\, ds = \int_0^1 s\, ds = \frac{s^2}{2}\Big|_0^1 = \frac{1}{2}$$

e quindi si ottiene:

$$I_T = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2},$$

che, come ci si aspettava, coincide con il metodo dei trapezi.
Per $n = 2$ si ottiene:

$$C_0^{(2)} = \frac{1}{2}\int_0^2 L_0^{(2)}(s)\, ds = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{(s-1)(s-2)}{-1(-2)}\, ds = \frac{1}{4}\left(\frac{s^3}{3} - \frac{3s^2}{2} + 2s\right)_0^2 = \frac{1}{6}$$
$$C_1^{(2)} = \frac{1}{2}\int_0^2 L_1^{(2)}(s)\, ds = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{s(s-2)}{1(-1)}\, ds = \frac{1}{2}\left(\frac{s^3}{3} - s^2\right)_0^2 = \frac{4}{6}$$
$$C_2^{(2)} = \frac{1}{2}\int_0^2 L_2^{(2)}(s)\, ds = \frac{1}{2}\int_0^2 \frac{s(s-1)}{2(1)}\, ds = \frac{1}{2}\left(\frac{s^3}{3} - \frac{s^2}{2}\right)_0^2 = \frac{1}{6},$$

da cui si ottiene la cosidetta formula di *Cavalieri-Simpson*:

$$I_{CS} = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right], \tag{4.6}$$

e la conseguente formula per l'errore che riportiamo senza dimostrazione:

$$E_{CS} = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{iv}(\xi). \tag{4.7}$$

$n = 1$ (Trapezi)	$C_0^1 = 1/2$; $C_1^1 = 1/2$	$-\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$
$n = 2$ (Cavalieri-Simpson)	$C_0^2 = 1/6$; $C_1^2 = 4/6$ $C_2^2 = 1/6$	$-\frac{(b-a)^5}{2880} f^{iv}(\xi)$
$n = 3$	$C_0^3 = 1/8$; $C_1^3 = 3/8$ $C_2^3 = 3/8$ $C_3^3 = 1/8$	$-\frac{(b-a)^5}{c_3} f^{iv}(\xi)$
$n = 4$	$C_0^4 = 7/90$; $C_1^4 = 32/90$ $C_2^4 = 12/90$ $C_3^4 = 32/90$ $C_4^4 = 7/90$	$-\frac{(b-a)^7}{c_4} f^{vi}(\xi)$

Tabella 4.1: Pesi ed errori per le formule di Newton-Cotes per $n = 1, 2, 3, 4$.

4.1.3 Errore delle formule di Newton-Cotes

Come si è visto per il caso della formula dei trapezi, è possibile esplicitare l'errore commesso dalle formule di Newton Cots a partire dal resto della Formula di Lagrange. I calcoli non sono però così agevoli come per il caso dei trapezi e non vengono riportati in queste note. Si riassumono soltanto i risultati per $n1 \div 4$ in tabella 4.1. Dalla tabella si evidenzia un comportamento particolare: a parità di punti di appoggio le formule di ordine n pari sono più accurate. Per esempio, la formula dei trapezi è esatta per funzioni integrande che sono polinomi di grado al massimo 1 (rette), in coincidenza con il fatto che il polinomio interplatore è in questi casi esatto. La formula di Cavalieri Simpson, ottenuta sostituendo alla funzione integranda il polinomio interplatore di grado 2, è esatta fino a polinomi di grado 3, e così via. Questa osservazione apparentemente contraddittoria si spiega con l'uso del punto medio dell'intervallo $((a + b)/2)$ da parte delle formule di grado pari, e quindi con questioni di simmetria. In realtà, come vedremo più avanti, il punto centrale dell'intervallo è un punto *di Gauss* e in pratica l'uso di questo punto garantisce nelle formule di quadratura un'accuratezza più elevata, come se in quel punto avessimo utilizzato anche il valore della derivata prima della funzione integranda per calcolare il polinomio interpolatore. Se le formule di Newton-Cotes non utilizzassero punti equispaziati, non si avrebbe questo fenomeno, e gli errori seguirebbero l'esattezza del polinomio interpolatore.

4.1.4 Formule composte

Nel capitolo precedente si è visto che l'interpolazione polinomiale con punti equispaziati è soggetta a problemi di stabilità e mal-condizionamento, come dimostrato nel

fenomeno di Runge (esempio 3.6 nel paragrafo 3.1.3). Per porre rimedio a questo problema bisogna mantenere n piccolo, per esempio usando la proprietà di linearità dell'operatore di integrale e quindi la formula 4.2 in maniera sistematica.

Metodo dei trapezi composto Partiamo con l'applicare la formula dei trapezi a ciascun intervallo $[x_{j-1}, x_j]$. Otteniamo:

$$I_{T,n} = \sum_{j=1}^{n} \frac{x_j - x_{j-1}}{2} \left[f(x_j) + f(x_{j-1}) \right].$$

Nel caso $h = x_j - x_{j-1} = cost = (b-a)/n$, la formula dei trapezi composta prende la forma semplificata:

$$\begin{aligned} I_{T,n} &= \frac{b-a}{2n} \left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n) \right] \\ &= \frac{b-a}{2n} \sum_{j=1}^{n} \left[f(x_j) + f(x_{j-1}) \right]. \end{aligned} \tag{4.8}$$

Per analizzare l'errore commesso da tale formula si noti che la formula precedente commette ad ogni sottointervallo un errore dato da (4.4), per cui, indicando con $\xi_j \in [x_{j-1}, x_j]$ un punto opportuno, si ottiene:

$$\begin{aligned} E_{T,n} &= -\sum_{j=1}^{n} \frac{(x_j - x_{j-1})^3}{12} f"(\xi_j) \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12n^3} \sum_{j=1}^{n} f"(\xi_j) \\ &= -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f"(\xi), \end{aligned} \tag{4.9}$$

dove l'ultima riga si è ottenuta osservando che, per il teorema del valor medio, esiste un punto $\xi \in [a, b]$ tale che:

$$f"(\xi) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} f"(\xi_j).$$

La formula dei trapezi composta con suddivisione uniforme dell'intervallo $[a, b]$ ha quindi un errore (eq. 4.9) che tende a zero quadraticamente al tendere all'infinito del numero di sottointervalli, cioè per $h \to 0$, a patto che la derivata seconda della funzione integranda sia limitata.

Esempio 4.1. Calcolare l'integrale:

$$I = \int_1^2 x \log x \; dx.$$

con il metodo dei trapezi composto.
Usiamo la formula (4.8) con suddivisione uniforme dell'intervallo $[1, 2]$. La tabella seguente riporta i valori dell'integrale approssimato ($I_{T,n}$), l'errore $|I_{T,n} - I|$, e il rapporto $E_{T,n}/E_{T,2n}$ tra errori consecutivi al variare di h da 1 a 1/512 ($n = 1 \div 512$).

n	$I_{T,n}$	$\lvert I_{T,n} - I \rvert$	$E_{T,n}/E_{T,2n}$
1	6.9315E-01	5.6853E-02	1.7589E+01
2	6.5067E-01	1.4378E-02	3.9541E+00
4	6.3990E-01	3.6061E-03	3.9871E+00
8	6.3720E-01	9.0228E-04	3.9967E+00
16	6.3652E-01	2.2561E-04	3.9992E+00
32	6.3635E-01	5.6404E-05	4.0000E+00
64	6.3631E-01	1.4098E-05	4.0008E+00
128	6.3630E-01	3.5217E-06	4.0032E+00
256	6.3630E-01	8.7757E-07	4.0130E+00
512	6.3629E-01	2.1654E-07	4.0528E+00

Dalla tabella si vede che il valore calcolato dallo schema dei trapezi composto converge al valore vero quadraticamente (rapporto tra gli errori pari a 4). L'errore si comporta come previsto dalla teoria. Infatti, se $f"(x)$ non varia di molto, per cui $f"(\xi_j)$ è circa indipendente da j, si ha:

$$\frac{E_{T,n}}{E_{T,2n}} = \frac{(b-a)^3 f"(\xi_n)}{12n^2} \cdot \frac{12(2n)^2}{(b-a)^3 f"(\xi_{2n})} \approx 2^2 = 4$$

Ovviamente, dalla tabella si notano piccole oscillazioni del rapporto tra gli errori, come conseguenza delle variazioni, comunque piccole, della derivata seconda.

Esempio 4.2. In questo esempio verifichiamo come la mancanza di limitatezza nella derivata seconda possa prevenire la convergenza teorica del metodo.
Si calcoli il valore dell'integrale:

$$I = \int_0^5 f(x) \; dx = \int_0^5 (x-3)^{-2/3} \; dx.$$

In questo caso ci aspettiamo che l'errore sia comandato dal valore della derivata seconda in un intorno del punto di discontinuità della $f(x)$ e delle sue derivate. Procedendo nello stesso modo di prima calcoliamo la seguente tabella:

n	$I_{T,n}$	$\lvert I_{T,n} - I \rvert$	$E_{T,n}/E_{T,2n}$
1	2.7768E+00	5.3297E+00	1.8763E-01
2	5.3569E+00	2.7496E+00	1.9384E+00
4	5.0535E+00	3.0530E+00	9.0062E-01
8	6.4611E+00	1.6454E+00	1.8555E+00
16	6.2061E+00	1.9004E+00	8.6582E-01
32	7.0758E+00	1.0307E+00	1.8438E+00
64	6.9108E+00	1.1957E+00	8.6201E-01
128	7.4576E+00	6.4895E-01	1.8425E+00
256	7.3533E+00	7.5317E-01	8.6163E-01
512	7.6977E+00	4.0879E-01	1.8424E+00
1024	7.6320E+00	4.7446E-01	8.6159E-01
2048	7.8490E+00	2.5752E-01	1.8424E+00
4096	7.8076E+00	2.9889E-01	8.6159E-01
8192	7.9443E+00	1.6223E-01	1.8424E+00

La tabella mostra come anche con $h = 2^{-13}$ ($n = 8192$) l'errore è estremamente elevato. Questo è l'effetto dell'errore che si commette vicino alla discontinuità della funzione integranda, che tende a $+\infty$ per $x = 3$, e della sua derivata seconda.
Si noti che lo schema dei trapezi composto funziona e non dà problemi numerici (overflow) solo perché le suddivisioni dell'intervallo di integrazione sono scelte in modo tale che nessun punto di appoggio dove la formula dei trapezi richiede di calcolare la funzione coincide con $x = 3$.

Esempio 4.3. Calcolare l'integrale:

$$I = \int_0^1 x \log x \, dx.$$

con il metodo dei trapezi composto.
In questo caso, l'estremo $x = 0$ non è un punto di discontinuità per la funzione integranda, ma il calcolo all'elaboratore richiede il calcolo di $\log x$ per $x \to 0^+$. Un modo per procedere numericamente è quello di definire un intervallo di integrazione con estremo inferiore > 0, ad esempio $[0.1, 1]$, e diminuiamo l'estremo di sinistra progressivamente verificando come varia il valore numerico ottenuto. Operativamente, definiamo l'intervallo di integrazione $[a, b]$ con $a = 0.1/10^r$ e $b = 1$, e andiamo a vedere al variare di r come varia il valore dell'integrale. Nella tabella seguente si riportano i risultati numerici ottenuti per $n = 2048$ suddivisioni. Nelle diverse colonne si mostrano rispettivamente i diversi valori dell'estremo sinistro dell'intervallo (a), del valore dell'integrale ottenuto con il metodo dei trapezi ($I_{T,2048}$), l'errore vero ($|I_{T,2048} - I|$) e il rapporto tra errori consecutivi $E_{T,1024}/E_{T,2048}$.

a	$I_{T,2048}$	$\lvert I_{T,2048} - I \rvert$	$E_{T,1024}/E_{T,2048}$
1.0000E-01	-2.3599E-01	1.4125E-07	4.1480E+00
1.0000E-03	-2.5000E-01	5.4024E-07	4.0167E+00
1.0000E-05	-2.5000E-01	7.7013E-07	3.7513E+00
1.0000E-07	-2.5000E-01	7.8769E-07	3.7212E+00
1.0000E-09	-2.5000E-01	7.8809E-07	3.7204E+00
1.0000E-11	-2.5000E-01	7.8809E-07	3.7204E+00

Si nota che lo schema converge al valore teorico dell'integrale rispettando le previsioni teoriche dell'andamento dell'errore.

Metodo di Cavalieri-Simpson composto Procedendo nello stesso modo, su si ricava il metodo di Cavalieri-Simpson composto. Applichiamo quindi lo schema (4.6) su ogni suddivisione dell'intervallo $[a, b]$. In questo caso, però, bisogna tenere conto che se si suddivide l'intervallo in n suddivisioni, il numero di punti di appoggio diventa è $m+1$ con $m = 2n$. Sommando i termini uguali e semplificando, otteniamo:

$$\begin{aligned} I_{CS,n} &= \frac{b-a}{6n}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) \ldots + 2f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m)\right] \\ &= \frac{b-a}{6n}\left[f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{m/2-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{m/2} f(x_{2j-1}) + f(x_m)\right]. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Nello stesso modo con cui si è ricavato l'errore del metodo dei trapezi composto, osservando che la (4.7) vale per ognuno degli n sottointervalli e applicando il teorema del valor medio, si arriva a:

$$E_{CS,n} = -\frac{(b-a)^5}{2880n^4} f^{iv}(\xi). \tag{4.11}$$

Si vede quindi che la convergenza del metodo di Cavalieri-Simpson è di ordine 4, e quindi raddoppia rispetto al metodo dei trapezi, sempre assumendo che le derivate quarte della funzione integranda siano limitate.

4.1.5 Metodo di estrapolazione di Richardson

Il metodo di estrapolazione di Richardson è una tecnica generale che sfrutta il calcolo di due approssimazioni diverse per dare una stima dell'errore. Nello specifico, sia I il valore vero dell'integrale, $I_{T,n}$ il valore approssimato di I calcolato con il metodo

dei trapezi suddividendo l'intervallo di integrazione $[a, b]$ in n suddivisioni di passo h. Il valore dell'integrale vero sarà pari al valore approssimato più l'errore:

$$I = I_{T,n} + E_{T,n}.$$

Scrivendo la formula precedente per n e per $2n$ e sottraendo membro a membro otteniamo:

$$\begin{aligned} I &= I_{T,2n} + E_{T,2n} && (4.12)\\ I &= I_{T,n} + E_{T,n} && (4.13)\\ \hline 0 &= I_{T,2n} - I_{T,n} + E_{T,2n} - E_{T,n}. && (4.14) \end{aligned}$$

Dalla formula dell'errore del metodo dei trapezi composto (eq. (4.9)), assumendo le derivate seconde uguali per n e per $2n$, si ha:

$$E_{T,n} = 4E_{T,2n},$$

otteniene una stima dell'errore:

$$E_{T,2n} \approx \frac{I_{T,2n} - I_{T,n}}{3},$$

potendo quindi ottenere una approssimazione dell'errore quando sostituito in (4.12), fornisce una più accurata approssimazione dell'integrale:

$$I_{R,T} = \frac{4I_{T,2n} - I_{T,n}}{3}. \tag{4.15}$$

Con un po' di conti elementari si scopre che questa approssimazione coincide con la formula di Cavalieri-Simpson.
La stessa procedura si può utilizzare partendo dal metodo di Cavalieri-Simpson, ottenendo, con uso di notazioni simile al precedente:

$$I_{R,CS} = \frac{16I_{CS,2n} - I_{CS,n}}{15}.$$

4.2 Formule di quadratura con punti di appoggio non equispaziati

In questo paragrafo affrontiamo brevemente la quadratura utilizzando interpolazioni che non utilizzano punti di appoggio equispaziati. In particolare, descriviamo sinteticamente l'idea fondamentale che sta alla base delle formule di quadratura di Gauss, senza entrare nei dettagli matematici, per i quali rimandiamo a libri specializzati.
L'idea principale è quella di definire una formula di quadratura che sia esatta per funzioni integrande che sono polinomi di grado $2n - 1$, dove n indica il numero dei punti di appoggio usati nella formula.

4.2.1 Formule di quadratura di Gauss

5 Riassunto di Algebra Lineare

Un numero (scalare) intero, reale o complesso sarà in genere indicato da una lettera minuscola dell'alfabeto greco, per esempio:

$$\alpha \in \mathbb{I} \qquad \beta \in \mathbb{R} \qquad \alpha \in \mathbb{C}.$$

Un vettore, definito come una n-upla ordinata di numeri (e.g. reali), sarà indicato con una lettera minuscola dell'alfabeto inglese, usando le seguenti notazioni del tutto equivalenti:

$$x \in \mathbb{R}^n \qquad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ . \\ . \\ . \\ x_n \end{bmatrix} \qquad x = \{x_i\}.$$

Il numero $x_i \in \mathbb{R}$ è chiamato la componente i-esima del vettore x.
Una matrice, definita da una tabella di numeri (e.g. reali) caratterizzata da n righe e m colonne, sarà indicata da una lettera maiuscola dell'alfabeto inglese, usando le seguenti notazioni del tutto equivalenti:

$$A_{[n\times m]} \qquad A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ . & \dots & \\ . & \dots & \\ . & \dots & \\ a_{n1} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix} \qquad A = \{a_{ij}\}.$$

Il numero $a_{ij} \in \mathbb{R}$ è chiamato l'elemento ij-esimo della matrice A. In realtà noi utilizzeremo quasi esclusivamente matrici quadrate, per cui in genere si avrà $m = n$. Si noti che un vettore può essere considerato come una matrice avente una colonna e cioè $m = 1$. Per convenzione (nostra) un vettore è quindi sempre un vettore colonna. Tuttavia, quando si parlerà di matrici o di vettori si farà sempre riferimento alle notazioni precedentemente definite. Tutte le proprietà che seguono sono ovviamente valide per vettori e matrici.

Somma di matrici. La matrice somma di due matrici della stessa dimensione è definita coma la matrice che si ottiene sommando ordinatamente le componenti, o in formula, date $A, B, C \in \mathbb{R}^{n\times m}$:

$$C = A \pm B := \{a_{ij} \pm b_{ij}\}.$$

Prodotto di una matrice per uno scalare. Il prodotto tra uno scalare e una matrice o un vettore è definito per componenti:

$$\alpha A = \{\alpha a_{ij}\}.$$

Matrice trasposta. La matrice $A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ si chiama la matrice trasposta di A e si ottiene cambiando le righe con le colonne:

$$A = \{a_{ij}\} \qquad A^T = \{a_{ji}\}.$$

Per una matrice in campo complesso $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, l'operazione di trasposizione deve generalmente essere accompagnata dall'operazione di coniugazione complessa:

$$A = \{a_{ij}\} \qquad A^* = \overline{A^T} = \{\overline{a_{ji}}\}.$$

Matrice nulla. La matrice nulla è quella matrice che ha tutte le componenti uguali a zero, ed è l'elemento neutro della somma:

$$A = 0 \Longleftrightarrow a_{ij} = 0 \qquad i, j = 1, \ldots, n.$$

Matrice identità. La mtrice identità I e quella matrice quadrata che ha le componenti diagonali uguali a uno e tutte le altre nulle:

$$I_{[n\times n]} \qquad I := \begin{bmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ . & . & \ldots & & . \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Matrice positiva o non negativa. Una matrice è detta positiva (o non negativa) [8] se tutti i suoi elementi sono positivi o nulli con almeno un elemento positivo:

$$A > 0 \Rightarrow a_{ij} \geq 0.$$

Prodotto scalare tra due vettori. Si definisce prodotto scalare tra due vettori la somma dei prodotti delle componenti omonime:

$$x^T y = \langle x, y\rangle = x \cdot y := \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

[8] La proprietà di una matrice di essere *positiva* non va confusa con la proprietà di essere *definita positiva* che verrà definita più avanti.

Altre notazioni che useremo per il prodotto scalare sono:

$$\langle x, y \rangle \text{ oppure } x \cdot y.$$

In modo più formale, dato uno spazio vettoriale $V \subset \mathbb{C}^n$ (o $\mathbb{R}^n$), il prodotto scalare (o interno) tra due elementi $x, y \in V$, indicato con $\langle x, y \rangle$, è la mappa:

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C} \text{ (o } \mathbb{R})$$

che soddisfa alle seguenti proprietà definenti:

- (Simmetria Hermitiana) $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$ dove $\overline{(\cdot)}$ indica l'operazione di coniugazione complessa;
- (linearità) $\langle \alpha x + \beta y, z \rangle = \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle$;
- (positività) $\langle x, x \rangle > 0$ per ogni $x \in \mathbb{C}^n$ (o $\mathbb{R}^n$) e $\langle x, x \rangle = 0$ solo per $x = 0$.

Prodotto tra matrici. Il prodotto tra due matrici, detto anche prodotto righe-colonne, è dato da quella matrice che ha per componenti i prodotti scalari tra le righe della prima matrice e le colonne della seconda matrice pensate come vettore:

$$A_{[n\times p]} = \{a_{ij}\} \qquad B_{[p\times m]} = \{b_{ij}\} \qquad C_{[n\times m]} = \{c_{ij}\}$$

$$C = AB \qquad c_{ij} := \sum_{k=1,p} a_{ik} b_{kj}, \qquad i = 1, \ldots, n \qquad j = 1, \ldots, m.$$

Il prodotto matrice vettore è un caso particolare del prodotto tra matrice, considerando il vettore come una matrice $n \times 1$. E' facile quindi verificare che il prodotto scalare gode della seguente proprietà[9]:

$$\langle x, Ay \rangle = \left\langle A^T x, y \right\rangle \qquad \langle Ax, y \rangle = \left\langle x, A^T y \right\rangle .$$

Determinante di una matrice. Data una matrice quadrata A, il suo determinante determinante, $\det A$, è definito come lo scalare dato dalla somma di tutti prodotti ottenuti prendendo come fattore un elemento di ciascuna riga ed uno di ciascuna colonna:

$$\det A := \sum \pm a_{1,i_1} a_{2,i_2} \cdots a_{n,i_n},$$

dove $i_1, i_2, \ldots, i_n$ sono permutazioni distinte dei primi n numeri interi e il segno è dato dall'ordine della permutazione.

[9]Ovviamente il prodotto scalare è commutativo e cioè: $\langle x, Ay \rangle = \langle Ay, x \rangle$ ovvero $x^T Ay = (Ay)^T x$

Inversa di una matrice quadrata. Data una matrice quadrata $A_{[n\times n]}$ se det $A \neq 0$, si definisce matrice inversa A^{-1}, se esiste, la matrice tale che:

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I.$$

Matrice singolare. Una matrice è singolare se la sua inversa non esiste. Una matrice singolare ha determinante nullo e viceversa.

Matrice unitaria o ortogonale. Una matrice si dice unitaria o ortogonale se:

$$U^T = U^{-1}.$$

Proprietà delle operazioni tra matrici quadrate.

1. $AB \neq BA$ (Le matrici per le quali la proprietà commutativa vale sono dette *commutative.*)
2. $A + B = B + A$
3. $(A + B) + C = A + (B + C)$
4. $(AB)C = A(BC)$
5. $A(B + C) = AB + BC; (A + B)C = AC + BC$
6. $(AB)^T = B^T A^T$
7. $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$
8. $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$.

Matrice simmetrica. Una matrice si dice simmetrica se è uguale alla sua trasposta:

$$A = A^T;$$

si dice antisimmetrica se è opposta alla sua trasposta:

$$A = -A^T.$$

Ogni matrice può essere decomposta secondo la somma della sua parte simmetrica e della sua parte antisimmetrica:

$$A = \frac{1}{2}(A + A^T) + \frac{1}{2}(A - A^T).$$

Matrice definita positiva. Una matrice $A_{[n\times n]}$ si dice definita positiva (semi definita positiva) se:

$$x^T Ax = \langle x, Ax\rangle > 0 \qquad (\langle x, Ax\rangle \geq 0).$$

Matrice di tipo M o M-matrice. Una matrice è detta di tipo M se gode delle seguenti proprietà:

1. è non singolare;
2. tutti gli elementi della diagonale sono positivi;
3. gli elementi extra diagonali sono negativi o nulli.

Una M-matrice ha la proprietà che la sua inversa è positiva.

5.0.2 Spazi vettoriali, vettori linearmente dipendenti, basi

Spazio vettoriale. Uno *spazio vettoriale* V (sul campo scalare $\mathbb{R}$) è un insieme di vettori dove sono definite l'operazione di addizione tra due vettori e di moltiplicazione tra uno scalare (reale) e un vettore. Tali operazioni devono soddisfare le seguenti proprietà definenti[10] per ogni $x, y \in V$ e per ogni $\alpha, \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}$:

1. $x + y = y + x$;
2. $x + (y + z) = (x + y) + z$;
3. esiste un unico elemento nullo dell'addizione (il vettore "zero") tale che $x+0 = 0 + x = x$;
4. per ogni x esiste un unico vettore $-x$ tale che $x + (-x) = 0$;
5. $1x = x$;
6. $(\alpha_1\alpha_2)x = \alpha_1(\alpha_2 x)$;
7. $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$;
8. $(\alpha_1 + \alpha_2)x = \alpha_1 x + \alpha_2 x$.

Per esempio, sono spazi vettoriali:

[10] Si noti che tali proprietà agiscono in modo tale che la maggior parte delle operazioni elementari che generalmente facciamo sul campo degli scalari possano essere fatte anche su tale spazio

- $\mathbb{R}^k$, l'insieme di tutti i vettori a k componenti con le classiche operazioni di somma e prodotto per uno scalare;

- $\mathbb{R}^\infty$ l'insieme dei vettori a infinite componenti (di nuovo con le stesse operazioni di prima);

- lo spazio delle matrici $m \times n$; in questo caso i vettori sono matrici e le operazioni sono quelle definite nei paragrafi precedenti[11];

- lo spazio delle funzioni continute $f(x)$ definite nell'intervallo $0 \leq x \leq 1$ (ad esempio appartengono a tale spazio $f(x) = x^2$ e $g(x) = \sin(x)$ per le quali si ha che $(f + g)(x) = x^2 + sin(x)$ e ogni multiplo tipo $3x^2$ oppure $-\sin(x)$ sono ancora nello spazio). I vettori in questo caso sono funzioni quindi con "dimensione" infinita.

Sottospazio vettoriale. Un sottospazio $S \subset V$ dello spazio vettoriale V è un sottoinsieme di V che soddisfa alle relazioni:

1. per ogni $x, y \in S$ la loro somma $z = x + y$ è ancora un elemento di S;

2. il prodotto di ogni $x \in S$ per uno scalare $\alpha \in \mathbb{R}$ è un elemento di S: $z = \alpha x$, $z \in S$.

Si dice anche che il sottospazio S è un sottoinsieme di V "chiuso" rispetto alle operazioni di addizione e moltiplicazione per uno scalare. Un esempio di un sottospazio vettoriale è un piano, che è affine allo spazio vettoriale $\mathbb{R}^2$ se pensato isolato ma che è contenuto in $\mathbb{R}^3$.

Indipendenza lineare. Si dice che k vettori v_k sono *linearmente indipendenti* se tutte le loro combinazioni lineari (eccetto quella triviale a coefficienti nulli) sono non-nulle:

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \cdots + \alpha_k v_k \neq 0 \qquad \text{escludendo il caso} \qquad \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_k = 0.$$

In caso contrario, i vettori si dicono linearmente dipendenti.
Si ha la seguente proprietà: un insieme di k vettori apartenenti a $\mathbb{R}^m$ devono necessariamente essere linearmente dipendenti se $k > m$.

[11] questo spazio è in qualche modo simile a $\mathbb{R}^{mn}$

Span. Se uno spazio vettoriale V è formato da tutte le combinazioni lineari dei vettori $v_1, v_2, \ldots, v_n$, si dice che questi vettori "generano" lo spazio V e si scrive:

$$V = \text{span}\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}.$$

In altre parole ogni altro vettore di V può essere scritto come combinazione lineare dei vettori generatori:

$$w \in V \Rightarrow w = \alpha_1 v_1 + \ldots \alpha_n v_n = \sum_{i=1}^{n} \alpha_1 v_1.$$

Base. Una *base* dello spazio vettoriale V è l'insieme (minimale) dei vettori che:

1. sono linearmente indipendenti;
2. generano lo spazio V.

Dimensione di uno spazio vettoriale. Le basi di uno spazio vettoriale sono infinite. Ciascuna base contiene lo stesso numero di vettori. Tale numero è chiamato *dimensione* dello spazio V ($\dim V$.
Ad esempio, una base dello spazio tri-dimensionale $\mathbb{R}^3$ è costituita dall'insieme dei vettori coordinate e_1, e_2, e_3, dove $e_1 = (1, 0, 0)^T$, $e_2 = (0, 1, 0)^T$, $e_3 = (0, 0, 1)^T$, con ovvia estensione alla generica dimensione n e si scrive:

$$n = \dim(V).$$

Ogni insieme di vettori di V linearmente dipendenti può essere esteso ad una base (se necessario aggiungendo opportuni vettori). Viceversa, ogni insieme di vettori generatori di V può essere ridotto ad una base (se necessario eliminando dei vettori).

5.0.3 Ortogonalità tra vettori e sottospazi

Introduciamo il concetto di lunghezza di un vettore x che indichiamo con $\|x\|$ (si veda più avanti il paragrafo sulle norme di vettori). Visivamente, in $\mathbb{R}^2$, scomponendo il vettore nelle sue componenti lungo gli assi principali, $x = (x_1, x_2)$, si può definire la lunghezza usando il teorema di Pitagora, da cui si ha immediatamente:

$$\|x\|^2 = x_1^2 + x_2^2,$$

e per estensione diretta a $\mathbb{R}^n$:

$$\|x\|^2 = x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_n^2.$$

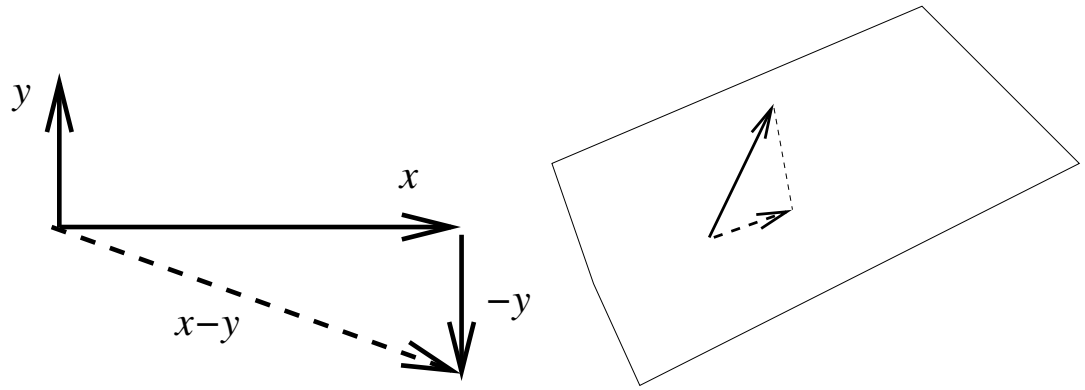


Figura 5.1: **A sinistra**: vettori ortogonali: x e y sono ortogonali. Applicando il Teorema di Pitagora alla coppia di vettori x e $-y$ che formano i cateti di un triangolo rettangolo e scrivendo l'uguaglianza (5.1) si ricava immediatamente che deve essere valida la (5.2). **A destra**: proiezione ortogonale del sottospazio V (formato da un solo vettore) nel sottospazio W (formato dal piano).

Vettori ortogonali. Sempre in $\mathbb{R}^2$, è intuitivo dire che due vettori x e y sono ortogonali se formano un tra lor un angolo rettangolo, ovvero usando il teorema di Pitagora, se (si veda Figura 5.1):

$$\|x\|^2 + \|y\|^2 = \|x - y\|^2 . \tag{5.1}$$

Dalla precedente, scritta per componenti, si verifica immediatamente che dovranno essere nulli i prodotti incrociati (somma dei doppi prodotti), da cui si ottiene la definizione generale di ortogonalità tra vettori di $\mathbb{R}^n$:

$$x^T y = \langle x, y \rangle = 0. \tag{5.2}$$

Tale quantità, il prodotto scalare, è anche chiamato prodotto interno. Si dimostra immediatamente che se n vettori sono mutuamente ortogonali, allora essi sono linearmente indipendenti.

Spazi ortogonali. due sottospazi V e W di $\mathbb{R}^n$ sono ortogonali se ogni vettore $v \in V$ è ortogonale a ogni vettore $w \in W$.

Complemento ortogonale. Dato un sottospazio $V \subset \mathbb{R}^n$, lo spazio di tutti i vettori ortogonali a tutti i vettori di V si dice complemento ortogonale di V e si denota con $V^\perp$.

Spazio nullo e spazio immagine di una matrice. L'insieme di tutti i vettori $x \in \mathbb{R}^n$ tali che $Ax = 0$ si chiama *spazio nullo* o *kernel* della matrice A e si indica con $\ker A$.
L'insieme di tutti i vettori $x \in \mathbb{R}^n$ tali che $Ax \neq 0$ si chiama *immagine* (o *Range*) della matrice A e si indica con $\mathrm{Ran}(A)$.
Si ha immediatamente che:

$$\dim(\ker(A)) + \dim(\mathrm{Ran}(A)) = n,$$

e che il rango di A è uguale alla dimensione del $\mathrm{Ran}(A)$.

5.0.4 Operatori di proiezione.

Un operatore di proiezione, o proiettore, P, è una trasformazione lineare $P : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ idempotente, cioè tale che:

$$P^2 = P. \tag{5.3}$$

Un tipico esempio di una operazione di proiezione riguarda l'operazione di proiezione di un vettore tridimensionale su un piano: dato il vettore $x = (x_1, x_2, x_3)^T$, il proiettore che lo trasforma nel vettore $\tilde{x} = (x_1, x_2, 0)^T$ è rappresentato dalla matrice:

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Evidentemente P è un proiettore. Infatti:

$$P \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

da cui immediatamente si ha $P^2 x = P(Px) = P\tilde{x} = \tilde{x}$.
Alcune proprietà di un proiettore P:

1. se P è un proiettore anche $(I - P)$ lo è;
2. $\ker(P) = \mathrm{Ran}(I - P)$;
3. $\ker(P) \cap \mathrm{Ran}(P) = 0$ (il vettore nullo).
4. $\mathbb{R}^n = \ker(P) \oplus \mathrm{Ran}(I - P)$;

Infatti, se P soddisfa (5.3), si ha immediatamente: $(I-P)(I-P)x = (I+P^2-2P)x = (I-P)x$, da cui discende la prima prorietà; la seconda è un'immediata conseguenza della prima. La terza proprietà si dimostra immediatamente dalla idempotenza di P: se $x \in \mathrm{Ran}(P)$ allora $Px = x$; se $x \in \ker(P)$ deve essere $Px = 0$, talchè $x = Px = 0$. Ovviamente ogni elemento di $\mathbb{R}^n$ può essere scritto come $x = Px + (I-P)x$, da cui si ricava immediatamente la quarta proprietà.
Siano dati due sottospazi $M \subset \mathbb{R}^n$ e $S \subset \mathbb{R}^n$, e sia $L = S^\perp$. Allora il proiettore P su M ortogonale al sottospazio L è la trasformazione lineare $u = Px$ $(\forall x \in \mathbb{R}^n)$ che soddisfa:

$$u \in M \tag{5.4}$$
$$x - u \perp L \tag{5.5}$$

Queste relazioni determinano rispettivamente il numero di gradi di libertà $m = \mathrm{Rank}(P) = \dim(M)$ e le m condizioni che definiscono Px. Si può dimostrare che queste relazioni definiscono compiutamente il proiettore, ovvero che, dati due sottospazi M e L di dimensione m è sempre possibile definire un proiettore su M ortogonale a L tramite le condizioni (5.4) e (5.5).

Lemma 5.1. *Dati due sottospazi di $\mathbb{R}^n$, M e L, aventi la stessa dimensione m, le seguenti due condizioni sono matematicamente equivalenti:*

1. *Non esistono vettori di M ortogonali a L;*

2. *per ogni $x \in \mathbb{R}^n$ esiste un unico vettore u che soddisfa* (5.4) *e* (5.5).

Dimostrazione. La prima condizione è equivalente alla condizione:

$$M \cap L^\perp = \{0\}.$$

Siccome L e $L\perp$ hanno dimensioni n e $n-m$, questo è equivalente a dire:

$$\mathbb{R}^n = M \oplus L^\perp.$$

Quindi, per ogni x esiste un unico vettore u appartenente a M tale che:

$$x = u + w \qquad\qquad w = x - u \in L^\perp.$$

□

Rappresentazione matriciale. Per poter esprimere le condizioni per definire un proiettore, Dobbiamo trovare due basi, una per M, che chiameremo $V = [v_1, \ldots, v_m]$, e una per L, che chiameremo $W = [w_1, \ldots, w_m]$. Tali basi sono bi-ortogonali se $\langle v_i, w_j \rangle = \delta_{ij}$, che scritta in forma matriciale diventa $W^T V = I$. Chiamiamo quindi Vy la rappresentazione di Px nella base V. Il vincolo di ortogonalità $x - Px \perp L$ si può tradurre nelle condizioni:

$$\langle (x - Vy), w_j \rangle = 0 \qquad \text{per } j = 1, \ldots, m,$$

ovvero:

$$W^T(x - Vy) = 0.$$

Se le due basi sono ortogonali si ha immediatamente che $y = W^T x$, e quindi $Px = VW^T x$, da cui ricaviamo la rappresentazione matriciale dell'operatore di proiezione:

$$P = VW^T.$$

Nel caso in cui le due basi non sono bi-ortogonali, l'espressione diventa invece:

$$P = V(W^T V)^{-1} W^T.$$

Sotto l'assunzione (ovvia) che non esistono vettori di M ortogonali a L, la matrice $W^T V$ di dimensione $m \times m$ è nonsingolare.

Proiezione ortogonale. Se V e W sono sottospazi di $\mathbb{R}^n$, una qualsiasi delle seguenti proprietà li caratterizza come ortogonali:

1. $W = V^\perp$ (W consiste di tutti i vettori ortogonali a V);
2. $V = W^\perp$ (V consiste di tutti i vettori ortogonali a W);
3. V e W sono ortogonali e $\dim V + \dim W = n$.

La proiezione ortogonale di un vettore $x \in V_1$ lungo la direzione del vettore $y \in V_2$ è data dal vettore:

$$y = \langle x, y \rangle \, y = yy^T v = Pv$$

In generale, un proiettore P si dice ortogonale se i due spazi M e L sono uguali, e quindi $\ker(P) = \mathrm{Ran}(P)^\perp$. Un proiettore che non è ortogonale si dice obliquo. Alla luce delle condizioni studiate in precedenza, un proiettore è caratterizzato per ogni $x \in \mathbb{R}^n$ dalle seguenti proprietà:

$$Px \in M$$
$$x - Px = (I - P)x \perp M$$

ovvero

$$Px \in M$$
$$\langle (I-P)x, y\rangle = 0 \qquad \forall y \in M$$

Si ha immediatamente il seguente:

Proposizione 5.2. *Un proiettore è ortogonale se e solo se è simmetrico (hermitiano).*

Dimostrazione. La trasformazione P^T, definita dall'aggiunto di P:

$$\left\langle P^T x, y\right\rangle = \langle x, Py\rangle \qquad \forall x, y$$

è anch'essa un proiettore. Infatti:

$$\left\langle (P^T)^2 x, y\right\rangle = \left\langle P^T x, Py\right\rangle = \left\langle x, P^2 y\right\rangle = \langle x, Py\rangle = \left\langle P^T x, y\right\rangle .$$

Di conseguenza,

$$\ker(P^T) = \mathrm{Ran}(P)^\perp$$
$$\ker(P) = \mathrm{Ran}(P^T)^\perp$$

Per definizione, un proiettore è ortogonale se $\ker(P) = \mathrm{Ran}(P)^\perp$, talchè, se $P = P^T$ allora P è ortogonale. D'altro canto, se P è ortogonale, dalle precedenti si ha che $\ker(P) = \ker(P^T)$ e $\mathrm{Ran}(P) = \mathrm{Ran}(P^T)$. Siccome P è un proiettore, ed è quindi univocamente determinato dai suoi spazi nulli e dalla sua immagine, si deduce che $P = P^T$. □

Proprietà di ottimalità di un proiettore ortogonale

Lemma 5.3. *Siano $M \subset \mathbb{R}^n$ e P on proiettore su M. Allora per ogni $x \in \mathbb{R}^n$ si ha:*

$$\|x - Px\| < \|x - y\| \, \forall y \in M.$$

Dimostrazione. Dalle condizioni di ortogonalità si ottiene:

$$\|x-y\|_2^2 = \|x - Px + (Px - y)\|_2^2 = \|x - Px\|_2^2 + \|Px - y\|_2^2 .$$

da cui si ha immediatamente $\|x - Px\|_2 \leq \|x - y\|_2$ con l'uguaglianza che si verifica per $y = Px$. □

Corollario 5.4. *Sia M un sottospazio e x un vettore di $\mathbb{R}^n$. Allora*

$$\min_{y \in M} \|x - y\|_2 = \|x - \tilde{y}\|_2$$

se e solo se le seguenti condizioni sono entrambe soddisfatte:

$$\tilde{y} \in M, \qquad\qquad x - \tilde{y} \perp M.$$

5.0.5 Autovalori ed autovettori

Uno scalare λ ed un vettore $u \neq 0$ si dicono rispettivamente autovalore ed autovettore di una matrice quadrata A se soddisfano alla seguente relazione:

$$Au = \lambda u.$$

Si ricava facilmente che

$$(A - \lambda I)u = 0 \qquad \Rightarrow \qquad P(\lambda) = \det\,(A - \lambda I) = 0.$$

Dalla prima delle precedenti si vede immediatamente che gli autovettori sono definiti a meno di una costante moltiplicativa. Dalla seconda invece si vede che gli autovalori sono le radici di un polinomio di grado n a coefficienti reali (se gli elementi di A sono reali). Da quest'ultima osservazione e usando le proprietà delle radici di un polinomio si ricavano le seguenti proprietà degli autovalori:

$$\lambda \in \mathbb{C} \qquad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = \mathrm{Tr}\ A \qquad \prod_{i=1}^{n} \lambda_i = \det\ A \qquad A^m u = \lambda^m u.$$

Se esiste $\lambda = 0$, allora la matrice è singolare ($\det A = 0$). Secondo una comune notazione, tutti gli autovalori di una matrice A si indicano con $\lambda(A)$. Si dice anche che $\lambda(A)$ è lo spettro di A. Molto spesso si ordinano gli autovalori in maniera tale che

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n|,$$

per cui in generale la notazione $\lambda_1(A)$ indica l'autovalore di A massimo in modulo, mentre $\lambda_n(A)$ indica l'autovalore minimo (in modulo). Il modulo di $\lambda_1(A)$ è anche detto raggio spettrale di A e si indica con $\rho(A) = |\lambda_1(A)|$.

Trasformazioni di similitudine. Si dice che una matrice B è ottenuta da A tramite una trasformazione di similitudine se esiste una matrice non singolare S tale che:

$$B = S^{-1}AS.$$

Si vede che B e A hanno gli stessi autovalori mentre gli autovettori sono scalati dalla matrice S. Infatti:

$$\det\,(B - \lambda I) = \det\,(S^{-1}AS - \lambda S^{-1}S) = \det\ S^{-1}\det\,(A - \lambda I)\det\ S = \det\,(A - \lambda I),$$

e quindi

$$\begin{array}{rcl} Bu &=& \lambda u \\ Av &=& \lambda v \end{array} \Rightarrow \begin{array}{rcl} S^{-1}ASu &=& \lambda u \\ ASu &=& \lambda Su \end{array} \Rightarrow v = Su.$$

E' facile verificare che

$$\lambda(A) = \lambda(A^T) \qquad \lambda(AB) = \lambda(A^{-1}ABA) = \lambda(BA).$$

E' facile anche verificare che se A è definita positiva, allora $\lambda_i > 0$ $i = 1, \ldots, n$.
Se si indica con D la matrice (diagonale) formata dagli elementi di A sulla diagonale e con tutti gli elementi extradiagonali nulli:

$$D = \{d_{ij}\} \qquad d_{ij} = \begin{cases} a_{ii}, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases};$$

si ha allora:

$$\lambda(D^{-1}A) = (\text{ponendo } S = D^{-\frac{1}{2}}) = \lambda(D^{\frac{1}{2}}D^{-1}AD^{-\frac{1}{2}}) = \lambda(D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}).$$

Inoltre, la matrice $B = D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}$ è definita positiva se lo è A. Infatti:

$$\langle x, Bx\rangle = \left\langle x, D^{-\frac{1}{2}}AD^{-\frac{1}{2}}x\right\rangle = \left\langle D^{-\frac{1}{2}}x, AD^{-\frac{1}{2}}x\right\rangle > 0.$$

Proprietà delle matrici simmetriche e diagonalizzazione.

- Gli autovalori ed autovettori di una matrice A simmetrica sono tutti reali.
- Gli autovalori ed autovettori di una matrice A antisimmetrica sono immaginari.
- Se A è definita positiva, $\lambda_i > 0$ per ogni $i = 1, \ldots, n$.
- Una matrice A si dice diagonalizzabile se esiste una matrice U non singolare tale che

  $$\Lambda = U^{-1}AU$$

  è una matrice diagonale. In questo caso è facile vedere che $\lambda_{ii} = \lambda_i$ sono gli autovalori di A e le colonne di U sono gli autovettori.
- Se A è simmetrica e definita positiva, è diagonalizzabile e la matrice U è unitaria (o ortogonale) ($U^{-1} = U^T$). Una matrice unitaria ha le colonne ortogonali tra di loro, per cui

  $$\langle u_i, u_j\rangle = \begin{cases} \neq 0, & \text{se } i = j, \\ = 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases};$$

  e poichè in questo caso gli u_i sono autovettori di A, e sono definiti a meno di una costante moltiplicativa, si ha:

  $$\langle u_i, u_j\rangle \begin{cases} = 1, & \text{se } i = j, \\ = 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}.$$

Si può concludere gli autovettori di matrici diagonalizzabili formano una base eventualmente ortonormale per lo spazio vettoriale $\mathbb{R}^n$. Questo significa che tutti i vettori di $\mathbb{R}^n$ possono essere espressi come combinazione lineare degli autovettori di A.

Localizzazione degli autovalori e teoremi di Gershgorin. Data una matrice quadrata A è possibile dare delle stime dirette degli autovalori. Tali stime vanno sotto il nome di "Teoremi di Gershgorin". Riscriviamo la definizione di autovettore u e autovalore λ:

$$Au = \lambda u.$$

Usando la definizione di prodotto matrice vettore, possiamo scrivere la precedente per componenti:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}u_j = \lambda u_i \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Separando l'elemento diagonale nella somma otteniamo:

$$a_{ii}u_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{ij}u_j = \lambda u_i \qquad i = 1, 2, \ldots, n,$$

ovvero, prendendo i moduli e utilizzando il fatto che il modulo della somma è minore o uguale alla somma dei moduli:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \left| \frac{a_{ij}u_j}{u_i} \right| \qquad i = 1, 2, \ldots, n,$$

Poichè gli autovettori sono definiti a meno di una costante moltiplicativa, possiamo sempre scegliere tale costante in maniera tale che $u_j/u_i \leq 1$, si ottiene immediatamente:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.6}$$

Nello stesso modo si dimostra l'analoga equazione per le colonne:

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ji}| \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{5.7}$$

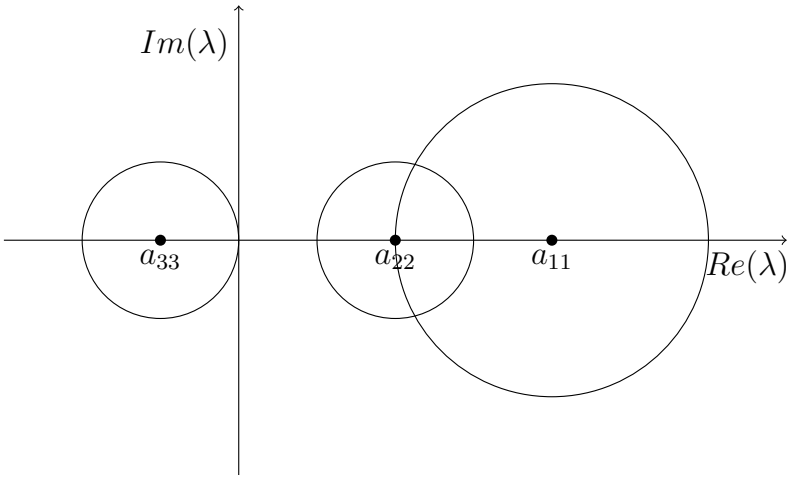


Figura 5.2: Cerchi di Gershgorin per la matrice dell'esempio 5.1.

Le equazioni (5.6) e (5.7) sono le equazioni di cerchi nel piano di Gauss ($\mathrm{Re}\,\lambda, \mathrm{Im}\,\lambda$ di centro a_{ii} e raggio $\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|$ e devono valere tutte contemporaneamente. Si individua quindi una regione del piano che è data dall'unione dell'intersezione dei due cerchi di centro a_{ii} calcolati per righe e per colonne che hanno raggio minimo. I 3 cerchi sono chiamati "cerchi di Gershgorin". Un ulteriore teorema di localizzazione ci dice che ciascuno dei 3 cerchi deve contenere almeno un autovalore.

Esempio 5.1. Sia data la matrice:

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

I cerchi di Gershgorin sono:

riga 1	$\lvert\lambda - 4\rvert \leq 2$	col. 1	$\lvert\lambda - 4\rvert \leq 2$
riga 2	$\lvert\lambda - 2\rvert \leq 3$	col. 2	$\lvert\lambda - 2\rvert \leq 1$
riga 3	$\lvert\lambda + 1\rvert \leq 1$	col. 3	$\lvert\lambda + 1\rvert \leq 3$

Quindi, facendo l'intersezione tra cerchi con lo stesso centro (e quindi prendendo quello con raggio minore) otteniamo i seguenti 3 cerchi, la cui unione fornisce la regione del piano di Gauss dove sono localizzati gli autovalori mostrata in Figura 5.2:

$$|\lambda - 4| \leq 2 \qquad |\lambda - 2| \leq 1 \qquad |\lambda + 1| \leq 1.$$

Dal disegno si può facilmente notare che esiste certamente un autovalore reale λ_r tale che $-2 \leq \lambda_r \leq 0$. Gli altri due autovalori o sono entrambi reali o sono una coppia di numeri complessi coniugati. In questo caso devono stare nella regione di intersezione del primo e secondo cerchio.

5.0.6 Norme di vettori e di matrici

Norme di vettori. Si definisce norma di un vettore x uno scalare reale che soddisfa alle seguenti relazioni:

1. $\|x\| > 0$, $\|x\| = 0$ se e solo se $x = 0$;
2. dato $\alpha \in \mathbb{R}$, $\|\alpha x\| = |\alpha| \, \|x\|$;
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$;

Un esempio di norma di vettori generica è dato dalla norma-p:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p};$$

per $p = 2$ si ha la classica norma euclidea $\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle}$; per $p = \infty$ si ha la norma massima $\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$, per $p = 1$ si ha la norma assoluta $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$. Per $p = 2$ vale la disuguaglianza di Schwarz:

$$\langle x, y \rangle \leq \|x\|_2 \, \|y\|_2 \, .$$

Un'altra norma molto usata è la norma "energia", definita come il prodotto scalare tra il vettore x e il vettore Ax, dove la matrice A è una matrice simmetrica e definita positiva (se non lo fosse la proprietà 1 sopra non sarebbe soddisfatta):

$$\|x\|_A = \sqrt{\langle x, Ax \rangle}.$$

Norme di matrici. Si definisce norma di una matrice A uno scalare reale che soddisfa alle seguenti relazioni:

1. $\|A\| > 0$, $\|A\| = 0$ se e solo se $A = 0$;
2. dato $\alpha \in \mathbb{R}$, $\|\alpha A\| = |\alpha| \, \|A\|$;
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$;
4. $\|AB\| \leq \|A\| \, \|B\|$;

Esempi di norme di matrici:

- norma di Frobenius: $\|A\|_2 = \sqrt{\text{Tr } (A^T A)} = \sqrt{\sum_{ij} |a_{ij}|^2}$;
- norma di Hilbert o norma spettrale: $\|A\| = \sqrt{\rho A^T A} = \sqrt{\left| \lambda_1 (A^T A) \right|}$.

Norme compatibili o indotte. Si dice che la norma di matrice $\|A\|$ è compatibile (o indotta da) con la norma di vettore $\|x\|$ se:

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}.$$

Dimostriamo che la norma spettrale di matrice è compatibile con (indotta da) la norma euclidea di vettore. Infatti, data una matrice non singolare $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, si costruisce la matrice simmetrica e definita positiva $H = A^T A$. Essendo H diagonalizzabile, un generico vettore $x \in \mathbb{R}^n$ può essere pensato come combinazione lineare degli autovettori u_i di H:

$$x = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \ldots + c_n u_n.$$

Poichè gli u_i sono ortonormali, si ottiene facilmente:

$$\begin{aligned} \langle x, Hx \rangle = \; & x^T H x = (c_1 u_1 + c_2 u_2 + \ldots + c_n u_n)^T H (c_1 u_1 + c_2 u_2 + \ldots + c_n u_n) \\ = \; & \lambda_1 |c_1|^2 + \ldots + \lambda_n |c_n|^2 \\ \leq \; & \lambda_1 (|c_1|^2 + \ldots + |c_n|^2) = \lambda_1 \|x\|_2^2, \end{aligned}$$

e da questa:

$$\lambda_1(A^T A) \geq \frac{\langle Ax, Ax \rangle}{\|x\|_2^2} = \frac{\|Ax\|_2^2}{\|x\|_2^2}.$$

La dimostrazione si completa prendendo la radice quadrata della precedente espressione.

Sistemi Lineari. Data una matrice A, di dimensioni $n \times n$ e non singolare, e un vettore $b \in \mathbb{R}^n$, si cerca il vettore $x \in \mathbb{R}^n$ che soddisfa:

$$Ax = b.$$

La soluzione formale di tale sistema è data da:

$$x^* = A^{-1} b.$$

Non è ragionevole trovare tale vettore, o un'approssimazione di esso, utilizzando la formula precedente, essendo il calcolo dell'inversa A^{-1} molto oneroso[12]

[12] Il modo più semplice per calcolare l'inversa è quella di risolvere n sistemi lineari, con un costo computazionale molto elevato. Ci sono altri metodi per calcolare l'inversa, ma sempre con costo molto alto rispetto alla soluzione di un sistema lineare.

In queste note si farà riferimento esclusivamente a metodi iterativi per la soluzione di sistemi lineari. In tali metodi si cerca di definire una successione di iterate (vettori) x_k $k > 0$ in maniera tale che

$$\lim_{k\to\infty} x_k = x^*. \tag{5.8}$$

Uno schema iterativo verrà terminato in pratica molto prima che la condizione precedente sia verificata. In effetti, non conoscendo x^*, sarà impossibile calcolare tale limite. Di solito si definisce il residuo come:

$$r_k = b - Ax_k,$$

per cui la condizione di convergenza (5.8) si traduce immediatamente dicendo che il residuo deve tendere a zero. L'iterazione verrà quindi terminata non appena la norma (qualsiasi) del residuo non diventi minore di una soglia predeterminata, chiamata tolleranza. In molti casi è meglio sostituire questa condizione con una relativa; l'iterazione termina quando il residuo iniziale è diminuito di un fattore τ:

$$\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} < \tau.$$

Definendo il vettore errore come la differenza tra la soluzione approssimata e la soluzione vera $e_k = x_k - x^*$ si può ricavare una relazione tra residuo ed errore:

$$\frac{\|e_k\|}{\|e_0\|} \leq \kappa(A)\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|}.$$

dove il numero $k(A) = \|A\|\,\|A^{-1}\|$ è chiamato il numero di condizionamento della matrice A. Infatti:

$$r_k = b - Ax_k = -Ae_k.$$

da cui, utilizzando norme matriciali compatibili:

$$\|e_k\| = \left\|A^{-1}Ae_k\right\| \leq \left\|A^{-1}\right\|\,\|Ae_k\| = \left\|A^{-1}\right\|\,\|r_k\|\,,$$

e:

$$\|r_0\| = \|Ae_0\| \leq \|A\|\,\|e_0\|\,,$$

quindi:

$$\frac{\|e_k\|}{\|e_0\|} \leq \left\|A^{-1}\right\|\,\|A\|\,\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|} = \kappa(A)\frac{\|r_k\|}{\|r_0\|}. \tag{5.9}$$

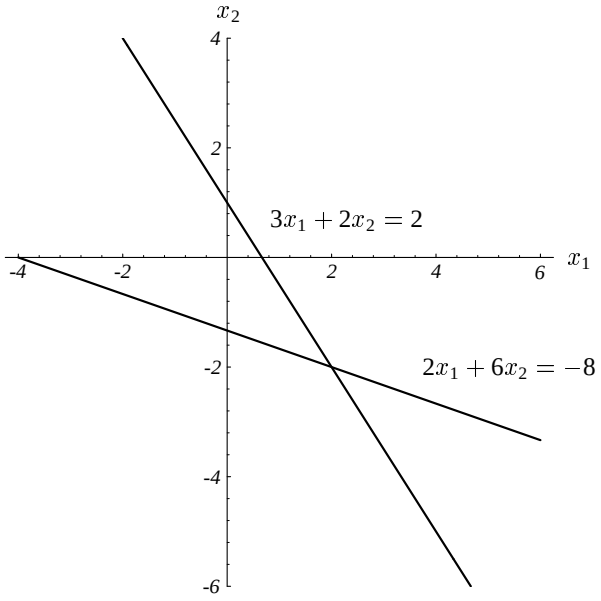


Figura 5.3: Interpretazione geometrica di un sistema lineare in $\mathbb{R}^2$. La soluzione del sistema è il punto di intersezione delle due rette e cioè il vettore $x^* = [2, -2]^T$.

La condizione di terminazione sul residuo relativo così definito è scomoda perchè dipende fortemente dalla soluzione iniziale x_0. Si preferisce quindi rapportare la norma del residuo corrente alla norma del termine noto b, e cioè utilizzare la condizione:

$$\frac{\|r_k\|}{\|b\|} < \tau.$$

Le due condizioni sono equivalenti qualora si scelga come soluzione iniziale $x_0 = 0$ (e quindi $r_0 = b$), una scelta molto diffusa.
Nel seguito faremo spesso riferimento al seguente esempio:

$$Ax = b \qquad \text{ove} \qquad A = \begin{bmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 6 \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \qquad b = \begin{bmatrix} 2 \\ -8 \end{bmatrix} \tag{5.10}$$

che ha soluzione

$$x^* = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}.$$

In $\mathbb{R}^2$ l'interpretazione geometrica è facile: la soluzione del sistema è il punto di intersezione delle due rette le cui equazioni formano il sistema lineare, situazione che è disegnata in Fig. 5.3.

6 Metodi per la soluzione di sistemi lineari

Sia dato un sistema lineare:

$$Ax = b, \tag{6.1}$$

dove A è una matrice quadrata non singolare di dimensini $n \times n$ e x e b sono vettori in $\mathbb{R}^n$. Il problema che si vuole affrontare è quello di trovare il vettore x noti A e b.

6.1 Metodi lineari e stazionari

Si considerano in questo capitolo metodi iterativi della forma:

$$x_{k+1} = Ex_k + q, \tag{6.2}$$

dove $x_{k+1}, x_k, q \in \mathbb{R}^n$ e E è la matrice $(n \times n)$ di iterazione. In pratica, si vuole costruire una successione di vettori approssimanti $\{x_k\}$ che converga per $k \to \infty$ alla soluzione del problema (6.1):

$$x^* = A^{-1}b. \tag{6.3}$$

I metodi oggetto di studio in questo capitolo, rappresentati dalla (6.2), si dicono lineari e stazionari in quanto la matrice di iterazione E è stazionaria (costante) durante il processo iterativo e l'approssimazione x_k compare linearmente.
Per studiare la convergenza di questi schemi verifichiamo dapprima la loro consistenza. Sostituiamo quindi la (6.3) al posto di x_{k+1} e x_k in (6.2), ottenendo:

$$x^* = Ex^* + q \qquad\qquad q = (I - E)x^* = (I - E)A^{-1}b, \tag{6.4}$$

e osserviamo che tale espressione per q garantisce la consistenza forte dello schema (6.2).

Osservazione 6.1. Osserviamo che in un certo senso la matrice $I - E$ deve essere una approssimazione dell'inversa di A. Infatti, una matrice B si dice *inversa approssimata* di A se $\|I - BA\| < 1$.

Sotto la condizione $\|E\| < 1$, il lemma seguente ci garantisce che lo schema converge alla soluzione del sistema lineare.

Lemma 6.1 (Lemma di Banach)**.** *Sia E una matrice di dimensioni $n \times n$ con $\|E\| < 1$; allora $I - E$ è non singolare e*

$$\left\|(I - E)^{-1}\right\| \leq \frac{1}{1 - \|E\|}.$$

Dimostrazione. Per prima cosa dimostriamo che la serie di Neumann[13] $(I + E + E^2 + \ldots)$ converge a $(I - E)^{-1}$, cioè:

$$\sum_{i=0}^{\infty} E^i = (1 - E)^{-1}.$$

Infatti, definiamo la somma parziale S_k come:

$$S_k = \sum_{i=0}^{k} E^i.$$

Poichè $\|E^i\| \leq \|E\|^i$ e $\|E\| < 1$ per ipotesi, risulta immediatamente che, per $k < m$:

$$\|S_k - S_m\| \leq \sum_{i=k+1}^{m} \|E\|^i = (\text{serie geometrica}) = \|E\|^{k+1} \frac{1 - \|E\|^{m-k}}{1 - \|E\|},$$

che evidentemente converge a zero per $k, m \to \infty$. Quindi, per un noto teorema sulle successioni di Cauchy in spazi vettoriali, la successione S_k converge ad una matrice $n \times n$ che chiameremo S. Ora, siccome $S_{k+1} = ES_k + I$, al limite si ottiene $S = ES + I$, da cui immediatamente si ha $S = (I - E)^{-1}$.
La dimostrazione si completa osservando che

$$\left\|(I - E)^{-1}\right\| \leq \sum_{i=1}^{\infty} \|E\|^i = (1 - \|E\|)^{-1}.$$

□

Conseguenza diretta del lemma precedente è il seguente:

Corollario 6.2. *Se $\|E\| < 1$, lo schema* (6.2) *converge a $x = (I - E)^{-1}q$.*

Quindi, se $\|E\| < 1$, e poiché per la consistenza $q = (I - E)A^{-1}b$, lo schema (6.2) converge a $x^* = A^{-1}b$, la soluzione vera del sistema lineare.
La condizione necessaria e sufficiente per la convergenza dello schema (6.2) è specificata in tutta generalità nel seguente:

Teorema 6.3. *Data una matrice reale E di dimensioni $n \times n$. L'iterazione* (6.2) *converge per ogni $q \in \mathbb{R}^n$ se e solo se $\rho(E) = |\lambda_1(E)| < 1$.*

[13] La serie di Neumann è un'Estensione alle matrici della serie di Taylor $1+x+x^2+\ldots = 1/(1-x)$

Matrici la cui potenza k-esima tende ad annullarsi all'infinito si dicono *matrici convergenti*.
La condizione di convergenza specificata nel teorema precedente è indipendente dalle proprietà della matrice di iterazione, che non deve necessariamente essere ne' simmetrica ne' diagonalizzabile. Per brevità, e per capire fino in fondo il ruolo che autovalori e autovettori della matrice di iterazione giocano nella convergenza dello schema, dimostriamo il teorema 6.3 facendo delle assunzioni sulla matrice di iterazione E.
Procediamo nel modo classico andando ad analizzare la "stabilità" dello schema (6.2), essendo la consistenza garantita da (6.4). A tale scopo, definiamo il vettore errore $e_k = x^* - x_k$. La stabilità dello schema implica che l'errore deve rimanere limitato o meglio ancora tendere a zero all'aumentare di k, e cioè:

$$\lim_{k\to\infty} e_k = 0.$$

Per verificare questa condizione, dobbiamo ricavare una relazione tra gli errori a iterazioni successive. Dalla consistenza e linearità dello schema si ricava immediatamente che:

$$e_{k+1} = Ee_k = E^{k+1}e_0. \tag{6.5}$$

Prendendo la norma (ad es. la norma euclidea) dell'espressione precedente e usando la disuguaglianza di Schwartz, si ottiene immediatamente:

$$\|e_k\| \leq \|E\|^k \|e_0\|,$$

dove $\|E\|$ è la norma indotta da $\|e_0\|$. La convergenza del metodo è assicurata se $\|E\| < 1$, risultato uguale a quello ricavato con il lemma di Banach 6.1. Assumendo simmetrica la matrice di iterazione, e osservando che usando la norma euclidea dei vettori e la norma spettrale per le matrici si ha che $\|E\| = \sqrt{\lambda(E^TE)} = |\lambda(E)| = \rho(E)$, la condizione necessaria e sufficiente per la convergenza dello schema (6.2) è:

$$\rho(E) < 1. \tag{6.6}$$

Alternativamente, tala condizione si può dimostrare assumendo che la matrice di iterazione E sia diagonalizzabile[14], e cioè assumendo che gli autovettori di E possano essere usati come base per $\mathbb{R}^n$:

$$E = U\Lambda U^{-1},$$

[14] Assunzione anche questa molto forte: in generale le matrici di iterazione non solo non saranno ne' diagonalizzabili ne' simmetriche ma saranno addirittura singolari!

con U la matrice le cui colonne sono gli autovettori di E e Λ la matrice diagonale contenente gli autovalori di E. In questo caso, il vettore errore iniziale si può espandere come combinazione lineare degli autovettori di E:

$$e_0 = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i u_i = Ug \qquad U = [u_1, \ldots, u_n] \qquad g = \{\gamma_i\}.$$

Sostituendo in (6.5), si ottiene dunque:

$$e_k = E^k e_0 = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \lambda_i^k u_i = \lambda_1^k \sum_{i=1}^{n} \gamma_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k u_i,$$

avendo assunto l'ordinamento classico di autovalori e corrispondenti autovettori in ordine crescente in valore assoluto $|\lambda_1| < |\lambda_2| \leq |\lambda_3| \leq \ldots \leq |\lambda_n|$ prendendo la norma e notando che $|\lambda_i/\lambda_1| < 1$ per $i > 1$:

$$\|e_k\| \leq |\lambda_1|^k \sum_{i=1}^{n} \left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|^k \|u_i\| \leq |\lambda_1|^k \|u_1\|, \tag{6.7}$$

da cui segue subito la (6.6).

Osservazione 6.2. Notiamo che lo schema (6.2) può essere pensato come un'estensione multidimensionale dello schema di Picard visto in precedenza, per cui ci aspettiamo convergenza lineare e condizionata al fatto che la costante asintotica di convergenza sia minore di 1. Infatti, calcolando $\|e_{k+1}\| / \|e_k\|$ tramite l'equazione (6.7), e ricordando la definizione di ordine e costante asintotica di convergenza, si ricava subito che lo schema (6.2) converge con ordine 1 (lineare) e costante asintotica di convergenza $M = \rho(E)$:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{\|e_{k+1}\|}{\|e_k\|} = \rho(E), \tag{6.8}$$

che evidentemente converge se (6.6) è verificata.

Osservazione 6.3. Il raggio spettrale di una matrice quadrata A è definito dalle due condizioni equivalenti:

$$\rho(A) = \max_{\lambda\in\sigma_A} |\lambda(A)| = \lim_{n\to\infty} \|A^n\|^{\frac{1}{n}}$$

6.1.1 Metodi lineari e stazionari classici

Ritorniamo ora a studiare i metodi di tipo (6.2) nella loro forma più classica. Un modo intuitivo per ricavare schemi lineari e stazionari è il seguente. Data una matrice

non singolare P, chiamata "precondizionatore", si sommi a primo e secondo membro di (6.1) il vettore Px:

$$Px = Px - Ax + b = (P - A)x + b,$$

da cui si può ricavare il seguente schema iterativo:

$$Px_{k+1} = Mx_k + b \tag{6.9}$$

dove $M = P - A$, ovvero:

$$x_{k+1} = (I - P^{-1}A)x_k + P^{-1}b. \tag{6.10}$$

che ha matrice di iterazione $E = I - P^{-1}A$ e che verifica la (6.4). Lo schema si può anche scrivere come:

$$x_{k+1} = x_k + P^{-1}r_k \qquad r_k = b - Ax_k.$$

Intuitivamente, guardando quest'ultima equazione, è immediato arguire che prendendo (idealmente) come precondizionatore $P = A$ si otterrebbe la soluzione x^* con una sola iterazione. Ovviamente questo non è concepibile in quanto il calcolo di A^{-1} corrisponde in termini di costo computazionale alla soluzione di n sistemi lineari. Cercheremo quindi di trovare delle matrici P "vicine" alla matrice A, che siano computazionalmente efficienti da calcolare e per le quali il prodotto $P^{-1}u$ (u vettore generico di $\mathbb{R}^n$) sia computazionalmente efficiente.
Un esempio semplice ma istruttivo di metodo lineare e stazionario è il metodo di Richardson, ottenuto da (6.10) prendendo $P = I$:

$$x_{k+1} = (I - A)x_k + b. \tag{6.11}$$

Si osservi che applicando il metodo di Richardson (6.11) al sistema "precondizionato":

$$P^{-1}Ax = P^{-1}b \tag{6.12}$$

si ottiene proprio il metodo riportato in (6.10). Dalla condizione di convergenza (6.6) il metodo di Richardson con $E = I - P^{-1}A$ converge se $\rho(I - P^{-1}A) < 1$, o equivalentemente $\rho(P^{-1}A) < 1$.
Vediamo ora alcuni classici esempi di matrici P. Tutti gli schemi seguenti si ricavano dallo "splitting" additivo della matrice del sistema $A = L + D + U$ con:

$$l_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & \text{if } i < j, \\ 0, & \text{if } i \geq j. \end{cases} \qquad d_{ij} = \begin{cases} a_{ii}, & \text{if } i = j, \\ 0, & \text{if } i \neq j. \end{cases} \qquad u_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{if } i \leq j, \\ a_{ij}, & \text{if } i > j. \end{cases}$$

Abbiamo i seguenti schemi:

Metodo di Jacobi. Prendendo $P = D$ e $M = D - A$, si ottiene il metodo di Jacobi:

$$x_{k+1} = (I - D^{-1}A)x_k + D^{-1}b = -D^{-1}(L+U)x_k + D^{-1}b = x_k + D^{-1}r_k.$$

Indicando con $x_{k+1,i}$ l'i-esimo elemento del vettore x_{k+1}, il metodo può essere scritto per componenti::

$$x_{k+1,i} = x_{k,i} + \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{n} a_{i,j}x_{k,j}\right) = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{i,j}x_{k,j}\right). \quad (6.13)$$

Metodo di Gauss-Seidel. Prendendo $P = L + D$ e $M = L + D - A = U$, si ottiene

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= \left[I - (L+D)^{-1}A\right]x_k + (L+D)^{-1}b = \\ &= -(L+D)^{-1}Ux_k + (L+D)^{-1}b = x_k + (L+D)^{-1}r_k. \end{aligned}$$

Indicando con $x_{k+1,i}$ l'i-esimo elemento del vettore x_{k+1}, il metodo scritto per componenti diventa:

$$x_{k+1,i} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_{k+1,j} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}x_{k,j}\right). \quad (6.14)$$

Esempio 6.4. Si vuole risolvere il sistema lineare $Ax = b$ con:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -12 & \end{bmatrix}, \qquad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$$

prima con il metodo di Jacobi e poi con il metodo di Gauss Seidel.
Riscriviamo il sistema lineare in maniera esplicita:

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 3 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 = 4 \\ -x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases}$$

e esplicitiamo da ognuna delle tre equazioni l'elemento diagonale:

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{1}{2}(3 + x_2) \\ x_2 = \dfrac{1}{2}(4 + x_1 + x_3) \\ x_3 = \dfrac{1}{2}(3 + x_2) \end{cases}$$

Lo schema di Jacobi si ottiene mettendo l'indice di iterazione $k+1$ alle componenti del vettore x a sinistra del simbolo di uguale e l'indice k a destra:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \frac{1}{2}\left(3 + x_2^k\right) \\ x_2^{k+1} = \frac{1}{2}\left(4 + x_1^k + x_3^k\right) \\ x_3^{k+1} = \frac{1}{2}\left(3 + x_2^k\right) \end{cases}$$

mentre lo schema di Gauss-Seidel si ottiene mettendo $k+1$ a destra nelle componenti che sono già state coalcolate. Ad esempio, nella seconda equazione si metterà l'indice $k+1$ nella componente x_1 visto che tale valore è appena stato calcolato, mentre si metterà l'indice k inella componente x_3. Si ottiene quindi:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \frac{1}{2}\left(3 + x_2^k\right) \\ x_2^{k+1} = \frac{1}{2}\left(4 + x_1^{k+1} + x_3^k\right) \\ x_3^{k+1} = \frac{1}{2}\left(3 + x_2^{k+1}\right) \end{cases}$$

Partendo quindi dal vettore iniziale nullo ($x_1 = 0; x_2 = 0; x_3 = 0$) abbiamo le seguenti prime tre iterate per Jacobi:

$$\begin{cases} x_1^1 = \frac{3}{2} & x_1^2 = \frac{3}{2} & x_1^3 = \frac{3}{2} \\ x_2^1 = 2 & x_2^2 = 2 & x_2^3 = 2 \\ x_3^1 = \frac{3}{2} & x_3^2 = \frac{3}{2} & x_3^3 = \frac{3}{2} \end{cases}$$

mentre per Gauss-Seidel si ha:

$$\begin{cases} x_1^1 = \frac{3}{2} & x_1^2 = \frac{3}{2} & x_1^3 = \frac{3}{2} \\ x_2^1 = 2 & x_2^2 = 2 & x_2^3 = 2 \\ x_3^1 = \frac{3}{2} & x_3^2 = \frac{3}{2} & x_3^3 = \frac{3}{2} \end{cases}$$

6.2 Metodi di rilassamento

La convergenza dei metodi studiati fino a qui può essere migliorata introducendo un parametro (detto di rilassamento) che dovrà essere identificato in modo da minimizzare il raggio spettrale della matrice di iterazione. A tal fine, riscriviamo il

metodo (6.2) nel seguente modo:

$$x_{k+1} = (I - \alpha_k P^{-1} A)x_k + \alpha_k P^{-1} b = x_k + \alpha_k P^{-1} r_k, \tag{6.15}$$

con $\alpha_k \in \mathbb{R}$ parametro reale. Se $\alpha_k = \alpha$ è indipendente dall'iterazione k, lo schema è classificabile nell'ambito dei metodi stazionari (la matrice di iterazione non dipende da k). Altrimenti il metodo è "non stazionario". In questo caso la matrice di iterazione è:

$$E_k = I - \alpha_k P^{-1} A$$

L'algoritmo non stazionario può essere scritto nel modo seguente:

ALGORITHM RICHARDSON NON STAZIONARIO
Input: $x_0, nimax, toll$; $k = 0$;
$r_0 = b - Ax_0$.
FOR $k = 0, 1, \ldots$ fino a convergenza:

1. $z_k = P^{-1} r_k$ (6.16)
2. $\alpha_k = \ldots$ (6.17)
3. $x_{k+1} = x_k + \alpha_k z_k$ (6.18)
4. $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A z_k$ (6.19)

END FOR

dove il passo in (6.16), chiamato "applicazione del precondizionatore", si esegue in pratica risolvendo il sistema

$$P z_{k+1} = r_k,$$

e il passo in (6.17) dipende dal metodo.
Nel caso stazionario ($\alpha_k = \alpha$), si può studiare qual'è il valore ottimale del parametro, cioè il valore di α che minimizza il raggio spettrale della matrice di iterazione $\rho(E) = \rho(I - P^{-1}A)$. Infatti, notando che $\lambda(I - \alpha P^{-1}A) = 1 - \alpha\lambda(P^{-1}A)$ la condizione necessaria per la convergenza si può scrivere $|1 - \alpha\lambda_i| < 1$ per $i = 1, \ldots, n$, dove λ_i, l'i-esimo autovalore della matrice (nonsimmetrica) $P^{-1}A$, è in generale un mumero complesso. Questa disuguaglianza equivale a

$$(1 - \alpha \operatorname{Re}\lambda_i)^2 + \alpha^2 (\operatorname{Im}\lambda_i)^2 < 1,$$

da cui si ricava

$$\frac{\alpha|\lambda_i|^2}{2\operatorname{Re}\lambda_i} < 1 \qquad \forall i = 1, \ldots, n.$$

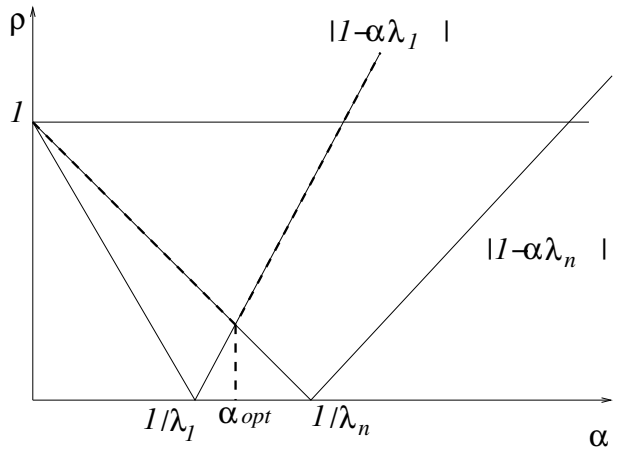


Figura 6.1: La curva $\rho(E_\alpha)$ in funzione di α

Nel caso in cui $\lambda_i(P^{-1}A) \in \mathbb{R}$ per ogni i, si ottiene che la condizione su α per la convergenza dello schema è:

$$0 < \alpha < \frac{2}{\lambda_{max}},$$

e si può ricavare il valore di α_{opt}, cioè il valore di α che minimizza il raggio spettrale della matrice di iterazione. Infatti si ha:

$$\rho(E_\alpha) = \max\left[|1 - \alpha\lambda_{min}|, |1 - \alpha\lambda_{max}|\right],$$

e il valore di α che minimizza la precedente è dato da:

$$\alpha_{opt} = \frac{2}{\lambda_{min} + \lambda_{max}}$$

Infatti, si può vedere facilmente dalla Figura 6.1 che il valore ottimale di α si trova nel punto di incontro delle curve $|1 - \alpha\lambda_{min}|$ e $|1 - \alpha\lambda_{max}|$, da cui il valore precedente. Il valore ottimale del raggio spettrale della matrice di iterazione si ricava immediatamente per sostituzione, ottenendo:

$$\rho_{opt} = \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{\lambda_{max} + \lambda_{min}} = \frac{\kappa(P^{-1}A) - 1}{\kappa(P^{-1}A) + 1} = \frac{\kappa(P^{-1}A) - 1}{\kappa(P^{-1}A) + 1}$$

Attualmente, tali schemi vengono raramente usati per la soluzione di sistemi lineari, ma sono assai utili come precondizionatori, come vedremo nel prossimo paragrafo, per il metodo del gradiente coniugato.

6.2.1 Metodo SOR

Il metodo SOR (Successive Over Relaxation) si ottinene partendo dal metodo di Gauss-Seidel e usando un fattore di rilassamento ω. L'equazione dello schema si puó scrivere per componenti come:

$$x_{k+1,i} = \omega x^{(s)}_{k+1,i} + (1-\omega)x_{k,i}$$

e cioè come la media pesata tra l'iterazione di Gauss-Seidel e l'iterazione precedente. Sostituendo l'espressione di $x^{(s)}_{k+1,i}$ data dalla (6.14) otteniamo:

$$\begin{aligned} x_{k+1,i} &= \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_{k+1,j} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}x_{k,j}\right) + (1-\omega)x_{k,i} \\ &= x_{k,i} + \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}x_{k+1,j} - \sum_{j=i}^{n} a_{i,j}x_{k,j}\right) \end{aligned}$$

Andando a riscrivere l'equazione precedente in forma matriciale, troviamo:

$$Dx_{k+1} = \omega\left(b - Lx_{k+1} - Ux_k\right) + (1-\omega)Dx_k$$

da cui si vede che lo schema può essere scritto come:

$$x_{k+1} = (\omega L + D)^{-1}\left[(1-\omega)D - \omega U\right]x_k + (\omega L + D)^{-1}b.$$

Quindi la matrice di iterazione dello schema SOR è data da:

$$E_\omega = (\omega L + D)^{-1}\left[(1-\omega)D - \omega U\right]$$

La domanda ovvia a questo punto è come dare un valore ottimale al parametro ω. Si vuole quindi cercare qual'è il valore di ω che minimizza il numero di iterazioni per il raggiungimento della convergenza data una specificata tolleranza. Possiamo riformulare il problema in quello equivalente di determinare il parametro ω che minimizza il raggio spettrale della matrice di iterazione.
Per arrivare alla risposta, dapprima verifichiamo in che intervallo cercare il valore di ω. O meglio, determiniamo qual'è l'intervallo ammissibile di ω, al di fuori del quale il metodo certamente non converge. Per fare ciò, calcoliamo il determinante di E_ω.

$$\det(E_\omega) = \frac{1}{\det(\omega L + D)}\det\left((1-\omega)D - \omega U\right) = \frac{1}{\prod_{i=1}^{n} a_{ii}}(1-\omega)^n \prod_{i=1}^{n} a_{ii} = (1-\omega)^n.$$

Notando che il determinante di una matrice è uguale al prodotto dei suoi autovalori, possiamo scrivere:

$$|1-\omega|^n = \prod_{i=1}^{n} |\lambda_{i,\omega}| \leq |\lambda_{1,\omega}|^n,$$

dove $\lambda_{1,\omega}$ è l'autovalore di modulo massimo di E_ω. Abbiamo quindi che se $|\lambda_{1,\omega}| > |1-\omega|$ e quindi se $|1-\omega| > 1$ lo schema di SOR non converge. Abbiamo quindi dimostrato il seguente:

Lemma 6.4. *Condizione necessaria (non sufficiente) perchè lo schema SOR converga è che* $0 < \omega < 2$.

Per trovare il parametro di rilassamento ottimale, bisogna rifarsi alla teoria di Young-Varga (cfr. [4]). Qui esponiamo solo alcuni risultati utili per le nostre applicazioni. Si ha la seguente definizione:

Definizione 6.5. Una matrice A gode della *proprietà A* (o è *biciclica e coerentemente ordinata*) se è trasformabile con permutazioni di righe e colonne in una matrice della forma:

$$\begin{pmatrix} D_1 & M_1 \\ M_2 & D_2 \end{pmatrix} \tag{6.20}$$

con D_1 e D_2 blocchi diagonali.

Esempio 6.6. La matrice:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

è biciclica e coerentemente ordinata. Infatti si ha:

$$PAP^T = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \qquad P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

che è nella forma richiesta (eq. (6.20)).

E' da menzionare il fatto che tutte le meatrici tridiagonali o tridiagonali a blocchi sono bicicliche e coerentemente ordinate. Esiste il seguente teorema:

Teorema 6.5 (Young-Varga)**.** *Sia A una matrice biciclica e coerentemente ordinata e sia $0 < \omega < 2$. Allora, se μ è un autovalore della matrice di iterazione di Jacobi, allora vale la relazione:*

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda_\omega \omega^2 \mu^2$$

dove λ_ω è un autovalore della matrice di iterazione di SOR.

Da questa relazione si ricava ponendo $\omega = 1$ che per matrici bicicliche e coerentemente ordinate il raggio spettrale della matrice di iterazione di Gauss-Seidel è pari al quadrato del raggio spettrale della matrice di iterazione di Jacobi ($\lambda = \mu^2$):

$$\rho(E_{GS}) = \rho(E_J)^2$$

Inoltre si può, dopo qualche passaggio, calcolare il fattore ottimo di rilassamento e il raggio spettrale della matrice di iterazione di SOR:

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(E_{GS})}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(E_J)^2}} \qquad \rho(E_{\omega,opt}) = |\lambda_{1,\omega}| = \omega_{opt} - 1.$$

da cui si ricava che $1 < \omega_{opt} < 2$, da cui il nome SOR (SOvra Rilassamento).

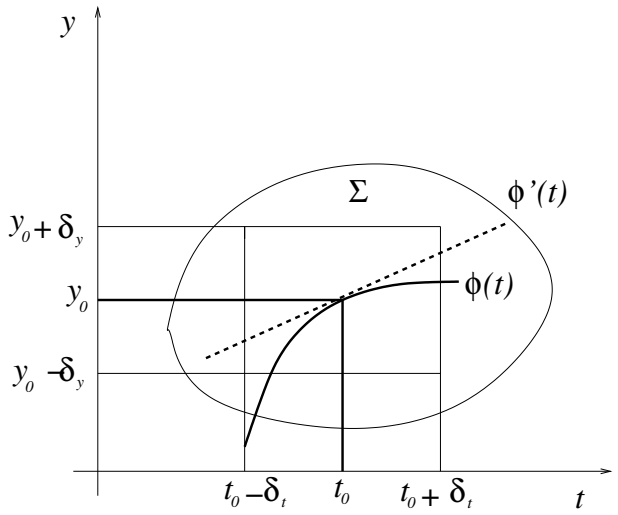


Figura 7.1: Interpretazione geometrica della soluzione $y := \phi(t)$ del problema di Cauchy (7.1).

7 Soluzione numerica di equazioni differenziali

7.1 Il problema di Cauchy

In questo capitolo ci occupiamo della soluzione numerica di equazioni differenziali alle derivate ordinarie (ODE, Ordinary Differential Equations). Il materiale qui presentato è una personale ri-elaborazione e sintesi del materiale presentato nel libro [3].

Il problema di Cauchy cerca di trovare una funzione $y(t)$ la cui derivata è uguale punto per punto ad un'altra funzione $f(t, y(t))$, funzione della variabile indipendente t e della funzione $y(t)$ stessa. La funzione trovata deve anche soddisfare certe condizioni iniziali.

Consideriamo il seguente:

Problema 7.1 (Problema di Cauchy)**.** Trovare la funzione $y(t) \in C^1(I)$, $I = [t_0, T]$ $(0 < T < \infty)$, tale che

$$\begin{aligned} y'(t) &= f(t, y(t)) \qquad t \in I, \\ y(t_0) &= y_0, \end{aligned} \tag{7.1}$$

dove $f(t, y) : S \to \mathbb{R}$, $S = I \times (-\infty, +\infty)$.

La soluzione di (7.1) è una funzione $y(t) : I \to \mathbb{R}$ che si può scrivere in forma integrale nel seguente modo:

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^{t} f(\tau, y(\tau))\, d\tau. \tag{7.2}$$

Possiamo dare la seguente interpretazione "locale" del problema di Cauchy. Siano δ e η due numeri reali positivi, e siano $t_0 \in I$ e $y_0 \in \mathbb{R}$. Formiamo gli intervalli $K = [t_0 - \delta, t_0 + \delta]$ e $J = [y_0 - \eta, y_0 + \eta]$, e sia $I \times J \subseteq \Sigma \subset \mathbb{R}$. Una funzione $f : \Sigma \to \mathbb{R}$ si dice lipschitziana in Σ se esiste $L > 0$ tale che:

$$|f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|$$

per ogni $t \in I$ e per ogni y_1 e $y_2 \in J$. Si noti che una funzione f lipschitziana è continua in J, mentre non tutte le funzioni continue sono lipschitziane. Ad esempio $g(y) = y^{1/3}$ è continua ma non lipschitziana in $[-1, 1]$. In particolare, una funzione g di classe $C^1(J)$ e tale per cui esiste una costante $K > 0$ tale che $|g'(y)| \leq K$ per ogni $y \in J$ è lipschitziana in J. Infatti:

$$|g(y_1) - g(y_2)| = |g'(\xi)(y_1 - y_2)| \leq K|y_1 - y_2|.$$

La funzione $g(y) = |y| \notin C^1(I)$ ma è evidentemente lipschitziana in I.
Sia $M = \max_{t \in I, y \in J} |f(t, y)|$ e sia $M\delta < \eta$. Allora esiste una ed una sola funzione $\phi : K \to \mathbb{R}$ tale che:

1. $\phi(t)$ e $\phi'(t)$ sono continue per ogni t in I;
2. $\phi(t_0) = y_0$;
3. $\phi(t)$ appartiene a J per ogni $t \in I$;
4. $\phi'(t) = f(t, \phi(t))$ per ogni t appartenente a I.

La funzione $\phi(t)$ si chiama soluzione o integrale del problema di Cauchy (7.1), per cui $y(t) := \phi(t)$. L'interpretazione geometrica è mostrata in Figura 7.1. Per ogni punto $t \in I$, la derivata della funzione $\phi(t)$ è uguale al valore che la f assume in quel punto.

Definizione 7.2 (Buona posizione)**.** Il problema di Cauchy (7.1) si dice *ben posto* se esiste una soluzione unica, la quale dipende in maniera condinua dai dati iniziali e dal secondo membro dell'equazione differenziale.

Possiamo rendere più precisa la definizione di dipendenza continua dai dati definendo la *stabilità* del problema di Cauchy:

Definizione 7.3 (Problema stabile (alla Liapunov))**.** il problema di Cauchy (7.1) è *stabile* se per ogni perturbazione $(\delta_0, \delta(t))$, tali che $\delta(t)$ funzione continua in I, e $|\delta_0| < \epsilon$ e $|\delta(t)| < \epsilon$ per ogni $t \in I$, la soluzione $z(t)$ del problema perturbato:

$$\begin{aligned} z'(t) &= f(t, z(t)) + \delta(t) \qquad t \in I, \\ z(t_0) &= y_0 + \delta_0, \end{aligned}$$

è tale che:

$$|y(t) - z(t)| < K\epsilon \qquad \forall t \in I,$$

con la costante K indipendente da ϵ e funzione dei dati del problema, e cioè t_0, y_0, f.

Dato il problema di Cauchy (7.1), se la $f(t, y)$ è continua e uniformemente lipschitziana in y per $t \in I$ e $y \in \mathbb{R}$, allora il problema è ben posto. Infatti, sia $w(t) = y(t) - z(t)$ da cui $w'(t) = f(t, y(t)) - f(t, z(t)) + \delta(t)$. Applicando la (7.2) e il lemma di Gronwall[15],
otteniamo:

$$\begin{aligned} w(t) &= \delta_0 + \int_{t_0}^{t} [f(\tau, y(\tau)) - f(\tau, z(\tau))] \; d\tau + \int_{t_0}^{t} \delta(\tau) \; d\tau \\ |w(t)| &\leq (1 + |t - t_0|)\, \epsilon + L \int_{t_0}^{t} |w(\tau)| \; d\tau \\ &\leq \epsilon\, (1 + |t - t_0|)\, e^{L|t - t_0|}, \qquad \forall t \in I \\ &\leq C\epsilon, \qquad C = (1 + M_t) e^{M_t L}, \qquad M_t = \max_t |t - t_0|. \end{aligned}$$

[15]Il lemma di Gronwall risulta molto importante, e vale la pena ricordarlo.

Lemma 7.1 (di Gronwall)**.** *Sia $g(t)$ una funzione integrabile non negativa nell'intervallo I, e siano $\varphi(t)$ e $\psi(t)$ due funzioni continue in I, con ψ funzione non decrescente. Se $\varphi(t)$ soddisfa la disuguaglianza:*

$$\varphi(t) \leq \psi(t) + \int_{t_0}^{t} g(\tau)\varphi(\tau) \; d\tau, \qquad \forall t \in I,$$

allora

$$\varphi(t) \leq \psi(t) exp\left(\int_{t_0}^{t} g(\tau) \; d\tau \right) \qquad \forall t \in I.$$

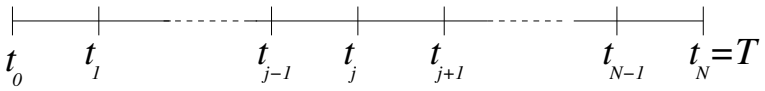


Figura 7.2: Discretizzazione dell'intervallo $I = [t_0, T]$ in N sottointervalli di passo h

Esempio 7.4.

$$\begin{aligned} y'(t) &= -y(t) + t \qquad t \in I = [0,1], \\ y(t_0) &= 1, \end{aligned}$$

la cui soluzione è: $y(t) = 2e^{-t} + t - 1$.

$$\begin{aligned} z'(t) &= -z(t) + t + \delta \qquad t \in I = [0,1], \\ z(t_0) &= 1 + \delta_0, \end{aligned}$$

la cui soluzione è: $z(t) = (2 + \delta_0 - \delta)e^{-t} + t + \delta - 1$. Allora:

$$|y(t) - z(t)| = |(\delta - \delta_0)e^{-t} - \delta| \leq |\delta|(1 - e^{-t}) + |\delta_0|e^{-t} \leq 2\epsilon,$$

per ogni $t \in I$.

7.2 Metodi a un passo

La soluzione del problema di Cauchy (7.1) in forma chiusa è possibile solo per particolari $f(t, y)$. In generale, si dovrà ricorrere alla risoluzione numerica; si vuole quindi ricavare un algoritmo che permetta di approssimare la $y(t)$ per $t \in I$. A tal fine, si *discretizza* l'intervallo I, e cioè si suddivide l'intervallo in sotto-intervalli di passo h, e si indica con t_j il generico punto individuato da $t_j = t_0 + jh$, $j = 0, 1, \ldots, N$, con $h = (T - t_0)/N$ (cf. Figura 7.2). Si indichi con y_j la soluzione numerica al passo t_j: $y_j \approx y(t_j)$. Intuitivamente, andremo a ricavare metodi numerici per il calcolo di y_j, $j = 1, \ldots, N$; tali metodi approssimeranno per punti la nostra soluzione.

Metodo di Eulero in avanti o esplicito. Si pensi quindi l'equazione differenziale scritta nel punto t_j:

$$y'(t_j) = f(t_j, y(t_j)). \tag{7.3}$$

Dobbiamo trovare una approssimazione di $y'(t_j)$. A tal fine, scriviamo l'espansione in serie di Taylor della $y(t_{j+1}) = y(t_j + h)$:

$$y(t_{j+1}) = y(t_j + h) = y(t_j) + hy'(t_j) + \frac{h^2}{2}y''(t_j) + O(h^3), \tag{7.4}$$

dove $O(h^3) \propto Ch^3$ ("O" grande). Trascurando i termini $O(h^2)$ otteniamo l'approssimazione:

$$y'(t_j) \approx y'_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{h}.$$

Sostituendo in (7.3), si arriva al cosiddetto metodo di Eulero in avanti (o esplicito):

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_j, y_j) \qquad j = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{7.5}$$

E' quindi possibile scrivere il seguente algoritmo:

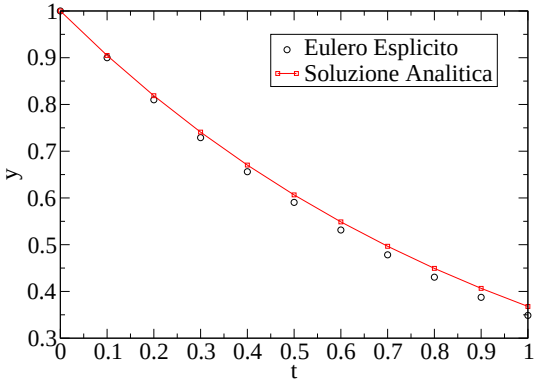
ALGORITHM EULERO_ESPLICITO
Input: t_0, y_0, N, h;
FOR $j = 0, 1, \ldots, N-1$
1. $t_j = t_0 + jh$
2. $f_j = f(t_j, y_j)$
3. $y_{j+1} = y_j + hf_j$
END FOR

Esempio 7.5. Proviamo ad applicare il metodo nel caso semplice di $f(t, y) = -y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 1$ e $y_0 = 1$, che ammette soluzione $y(t) = e^{-t}$. Sostituendo $f = -y$ in (7.5), otteniamo:

$$y_{j+1} = (1 - h)y_j$$

Utilizzando un passo di integrazione $h = 0.1$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.1	0.9	0.904837418
0.2	0.81	0.818730753
0.3	0.729	0.740818221
0.4	0.6561	0.670320046
0.5	0.59049	0.60653066
0.6	0.531441	0.548811636
0.7	0.4782969	0.496585304
0.8	0.43046721	0.449328964
0.9	0.387420489	0.40656966
1.0	0.34867844	0.367879441



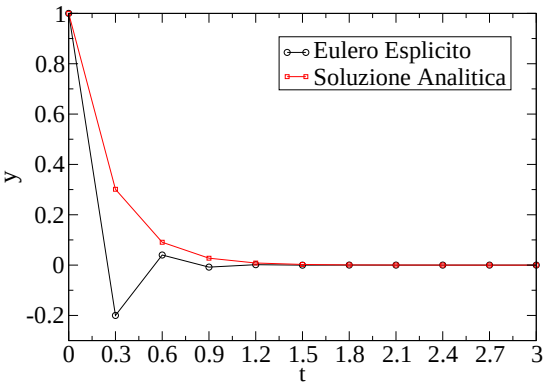
Come si vede il metodo fornisce buone approssimazioni della soluzione analitica agli estremi dei sottointervalli.

Esempio 7.6. Proviamo ora ad applicare il metodo nel caso di $f(t, y) = -5y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 3$ e $y_0 = 1$, che ammette soluzione $y(t) = e^{-5t}$. Sostituendo $f = -5y$ in (7.5), otteniamo:

$$y_{j+1} = (1 - 5h)y_j$$

Utilizzando $h = 0.3$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.3	-0.2	0.301194212
0.6	0.04	0.090717953
0.9	-0.008	0.027323722
1.2	0.0016	0.008229747
1.5	-0.00032	0.002478752
1.8	6.4E-05	0.000746586
2.1	-0.0000128	0.000224867
2.4	0.00000256	6.77287E-05
2.7	-5.12E-07	2.03995E-05
3	1.024E-07	6.14421E-06



In questo caso il metodo produce delle stime molto meno accurate e si notano delle oscillazioni importanti nella soluzione numerica. Infatti, come vedremo più avanti, lo schema è stabile solo sotto certe condizioni su h, ancorchè il problema di Cauchy si stabile secondo Liapunov. E' dunque necessario andare a studiare il comportamento dell'errore e stabilire la convergenza dello schema, e cioè la sua consistenza e stabilità.

Metodo di Eulero all'indietro o implicito. Si pensi ora l'equazione differenziale scritta nel punto t_{j+1}:

$$y'(t_{j+1}) = f(t_{j+1}, y(t_{j+1})). \tag{7.6}$$

Dobbiamo trovare una approssimazione di $y'(t_{j+1})$. A tal fine, scriviamo l'espansione in serie di Taylor della $y(t_j) = y(t_{j+1} - h)$:

$$y(t_j) = y(t_{j+1} - h) = y(t_{j+1}) - hy'(t_{j+1}) + \frac{h^2}{2}y''(t_{j+1}) + O(h^3).$$

Di nuovo trascurando i termini $O(h^2)$ possiamo ricavare:

$$y'(t_{j+1}) \approx y'_{j+1} = \frac{y_{j+1} - y_j}{h}.$$

Sostituendo in (7.6), otteniamo il cosiddetto metodo di Eulero all'indietro (o implicito):

$$y_{j+1} = y_j + hf(t_{j+1}, y_{j+1}) \qquad j = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{7.7}$$

Si noti che la nostra incognita, y_{j+1}, appare in maniera implicita sia a sinistra che a destra del simbolo di uguale, in maniera implicita come argomento della $f(t, y)$, che in generale non potrà più essere calcolata esplicitamente. Infatti, nel caso in cui y_{j+1} non sia esplicitabile, dovremmo ricorrere ad un metodo di tipo Newton-Raphson per il calcolo di y_{j+1} in ogni passo temporale (punto 2. dell'algoritmo seguente). Questo fatto dà ragione dei nomi *esplicito* e *implicito*. Possiamo quindi scrivere il seguente algoritmo:

ALGORITHM EULERO_IMPLICITO
Input: t_0, y_0, N, h;
FOR $j = 0, 1, \ldots, N-1$
1. $t_{j+1} = t_j + h$
2. *Risolvere* $y_{j+1} - y_j - hf(t_{j+1}, y_{j+1}) = 0$
END FOR

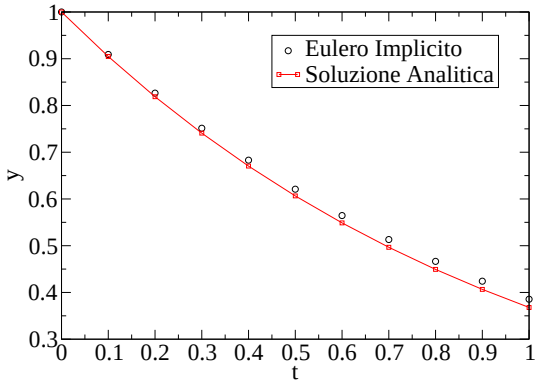
Riproduciamo gli stessi esempi riportati sopra, ma con il metodo di Eulero all'indietro. Si noti che in questo caso, essendo la $f(t, y)$ lineare in y, anche tale schema diventa esplicito.

Esempio 7.7. Caso di $f(t, y) = -y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 1$ e $y_0 = 1$. Sostituendo $f = -y$ in (7.7), otteniamo:

$$y_{j+1} = \frac{1}{1+h} y_j.$$

Utilizzando $h = 0.1$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.1	0.909090909	0.904837418
0.2	0.826446281	0.818730753
0.3	0.751314801	0.740818221
0.4	0.683013455	0.670320046
0.5	0.620921323	0.60653066
0.6	0.56447393	0.548811636
0.7	0.513158118	0.496585304
0.8	0.46650738	0.449328964
0.9	0.424097618	0.40656966
1	0.385543289	0.367879441



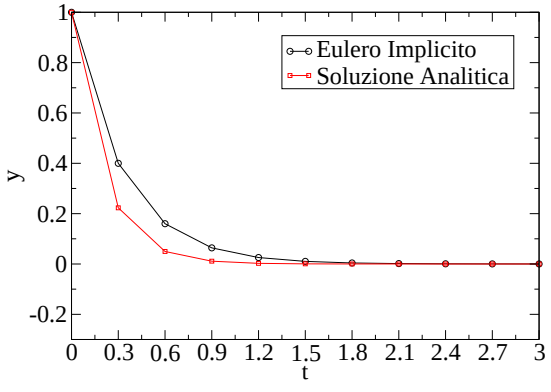
Come si vede il metodo fornisce approssimazioni simili a quelle del caso esplicito, ma con sovrastima dei valori invece di sottostima.

Esempio 7.8. Proviamo ora ad applicare il metodo nel caso di $f(t, y) = -5y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 3$ e $y_0 = 1$. Sostituendo $f = -5y$ in (7.5), otteniamo:

$$y_{j+1} = \frac{1}{1 + 5h} y_j.$$

Utilizzando $h = 0.3$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.3	0.4	0.22313016
0.6	0.16	0.049787068
0.9	0.064	0.011108997
1.2	0.0256	0.002478752
1.5	0.01024	0.000553084
1.8	0.004096	0.00012341
2.1	0.0016384	2.75364E-05
2.4	0.00065536	6.14421E-06
2.7	0.000262144	1.37096E-06
3	0.000104858	3.05902E-07



In questo caso, il metodo produce delle stime sempre meno accurate rispetto al caso precedente, ma non si notano le oscillazioni che si sono verificate nel corrispondente caso del metodo di Eulero esplicito. Lo schema di Eulero implicito, infatti, ha la stessa accuratezza dello schema esplicito ma risulta sempre stabile.

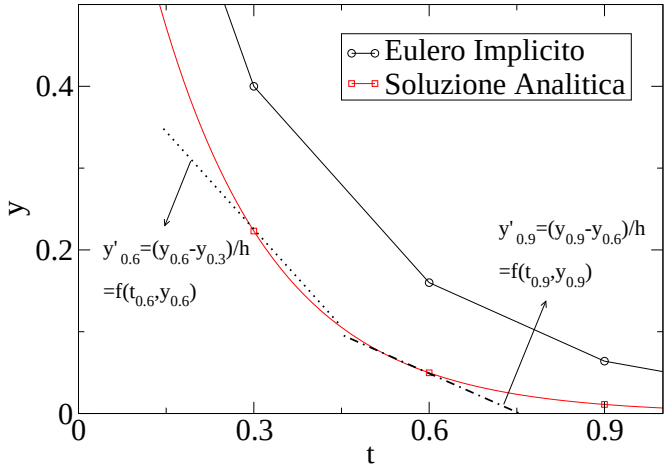


Figura 7.3: Interpretazione geometrica dello schema di Eulero Implicito per l'equazione differenziale $y' = -5y$. Le rette rappresentate con punti e punti-linee sono i valori di $f(t, y)$ calcolati sull'ascissa $j + 1$.

Vediamo per quest'ultima equazione differenziale un'interpretazione geometrica degli schemi di Eulero rispettivamente implicito ed esplicito. Per lo schema implicito, dall'eq. (7.7) si ricava immediatamente che il punto (t_{j+1}, y_{j+1}) è ottenuto proseguendo a partire dal punto (t_j, y_j) lungo la direzione che ha pendenza pari a $y'_{j+1} = (y_{j+1} - y_j)/h = f(t_{j+1}, y_{j+1})$, mentre per lo schema esplicito tale direzione è pari a $y'_j = (y_{j+1} - y_j)/h = f(t_j, y_j)$. Quindi, nello schema implicito il nuovo punto è ottenuto utilizzando come pendenza la funzione calcolate in t_{j+1}, ed essendo $f(t, y) = -5y$ decrescente ($y(t) = \exp(-5t)$), la pendenza sarà, in valore assoluto, decrescente e sarà inferiore (sempre in valore assoluto) a quella vera, da cui si vede che lo schema implicito sovrastima la soluzione analitica (Figura 7.3). Nel caso di Eulero Esplicito, la situazione è analoga, con la differenza che la direzione di ricerca in ogni punto ha una pendenza che in questo caso è sempre sovrastimata (in valore assoluto), da cui la soluzione esatta è sempre sottostimata.

Metodo di Crank-Nicolson. Abbiamo visto che gli schemi di Eulero sono ricavati a partire dalla serie di Taylor trascurando per entrambi i termini proporzionali a h^2. Il metodo di Crank-Nicolson cerca di migliorare l'accuratezza trascurando i termini $O(h^3)$. Per fare ciò senza complicare l'implementazione dello schema si parte dal fatto che sottraendo tra di loro le due serie di Taylor scritte prima, si ha

cancellazione dei termini proporzionali a h^2:

$$\begin{aligned} y(t_{j+1}) &= y(t_j) + hy'(t_j) + \frac{h^2}{2}y''(t_j) + \frac{h^3}{6}y'''(t_j) + O(h^4) \\ y(t_j) &= y(t_{j+1}) - hy'(t_{j+1}) + \frac{h^2}{2}y''(t_{j+1}) - \frac{h^3}{6}y'''(t_{j+1}) + O(h^4), \end{aligned}$$

da cui si ricava immediatamente che:

$$y'(t_{j+1}) + y'(t_j) \approx y'_{j+1} + y'_j = \frac{y_{j+1} - y_j}{h}.$$

Scrivendo la (7.1) come media tra il passo t_{j+1} e il passo t_j, otteniamo immediatamente il metodo di Crank-Nicolson:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}\left[f(t_{j+1}, y_{j+1}) + f(t_j, y_j)\right]. \tag{7.8}$$

Lo schema è di tipo implicito, perchè a secondo membro l'incognita y_{j+1} è contenuta all'interno della $f(t, y)$. L'algoritmo sarà dunque simile a quello di Eulero Implicito.

ALGORITHM CRANK-NICOLSON
Input: t_0, y_0, N, h;
FOR $j = 0, 1, \ldots, N-1$
1. $t_{j+1} = t_j + h$
2. $f_j = f(t_j, y_j) = 0$
3. *Risolvere* $y_{j+1} - y_j - 0.5h\left[f(t_{j+1}, y_{j+1}) + f_j\right] = 0$
END FOR

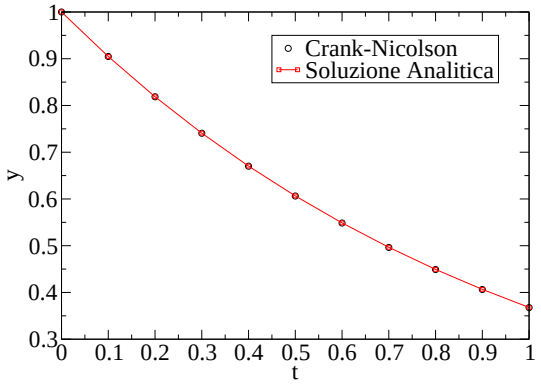
Riproduciamo gli stessi esempi riportati sopra, ma con il metodo di Eulero all'indietro. Si noti che in questo caso, essendo la $f(t, y)$ lineare in y, anche tale schema diventa esplicito.

Esempio 7.9. Caso di $f(t, y) = -y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 1$ e $y_0 = 1$. Sostituendo $f = -y$ in (7.8), otteniamo:

$$y_{j+1} = \frac{2 - h}{2 + h}y_j.$$

Utilizzando $h = 0.1$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.1	0.904761905	0.904837418
0.2	0.818594104	0.818730753
0.3	0.740632761	0.740818221
0.4	0.670096308	0.670320046
0.5	0.606277612	0.60653066
0.6	0.548536887	0.548811636
0.7	0.496295278	0.496585304
0.8	0.449029061	0.449328964
0.9	0.406264389	0.40656966
1	0.367572542	0.367879441



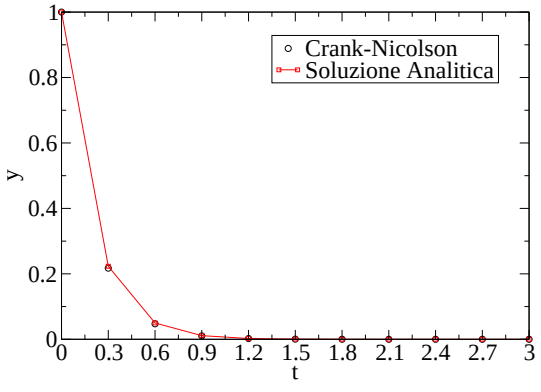
Come si vede il metodo fornisce approssimazioni molto migliori rispetto ai metodi di Eulero. Il motivo è proprio nell'aver trascurato termini di ordine superiore rispetto a quelli trascurati nel ricavare i metodi di Eulero.

Esempio 7.10. Proviamo ora ad applicare il metodo nel caso di $f(t, y) = -5y(t)$, con $t_0 = 0$, $T = 3$ e $y_0 = 1$. Sostituendo $f = -5y$ in (7.5), otteniamo:

$$y_{j+1} = \frac{2 - 5h}{2 + 5h} y_j.$$

Utilizzando $h = 0.3$, da cui $N = 10$, otteniamo la seguente tabella:

j	y_j	$y(t_j)$
0	1	1
0.3	0.217391304	0.22313016
0.6	0.047258979	0.049787068
0.9	0.010273691	0.011108997
1.2	0.002233411	0.002478752
1.5	0.000485524	0.000553084
1.8	0.000105549	0.00012341
2.1	2.29454E-05	2.75364E-05
2.4	4.98813E-06	6.14421E-06
2.7	1.08438E-06	1.37096E-06
3	2.35734E-07	3.05902E-07



Anche in questo caso il metodo di Crank-Nicolson produce soluzioni più accurate dei metodi di Eulero, pur essendo stabile (perchè implicito).

7.2.1 Deduzione degli schemi per mezzo di formule di quadratura

In maniera equivalente, si posssono ricavare le formule dei tre schem studiati in precedenza nel seguente modo. Integriamo l'equazione differenziale tra i due punti t_j e t_{j+1}, ottenendo:

$$y(t_{j+1}) = y(t_j) + \int_{t_j}^{t_{j+1}} f(\tau, y(\tau))\, d\tau$$

Approssimando l'integrale a secondo membro con una formula di quadratura otteniamo i diversi schemi. I metodi di Eulero esplicito e implicito si ottengono approssimando il valore dell'integrale con l'area dei rettangoli che hanno per base $h = t_{j+1} - t_j$ e altezza $y(t_j)$ e $y(t_{j+1})$, rispettivamente; il metodo di Crank-Nicolson si ottiene utilizzando la formula dei trapezi:

$$\begin{aligned} y(t_{j+1}) &\approx y(t_j) + hf(t_j, y(t_j)), \\ y(t_{j+1}) &\approx y(t_j) + hf(t_{j+1}, y(t_{j+1})), \\ y(t_{j+1}) &\approx y(t_j) + \frac{h}{2}\left[f(t_{j+1}, y(t_{j+1})) + f(t_j, y(t_j))\right], \end{aligned}$$

e sostituendo y_j al posto di $y(t_j)$.

7.3 Convergenza degli schemi

Si vuole analizzare la convergenza della successione y_j verso la soluzione analitica $y(t_j)$. Quindi, definito l'errore $e(t_j) = y_j - y(t_j)$, in maniera molto naturale chiediamo che l'errore tenda a zero al tendere a zero dei termini che abbiamo trascurati, quindi per $h \to 0$. Anche alla luce degli esperimenti precedenti, ci domandiamo allora:

1. la soluzione numerica tende alla soluzione vera (cioè l'errore tende a zero) per $h \to 0$?
2. e quanto velocemente?
3. qual'è il valore massimo di h che mi ritorna una soluzione numerica qualitativamente vicina a quella vera?

Siccome l'errore è definito per tutti i punti t_j, si può richiedere che il massimo modulo dell'errore calcolato tra tutti i punti t_j tenda a zero. Abbiamo quindi la seguente:

Definizione 7.11 (Convergenza)**.** Uno schema per la soluzione del problema di Cauchy (7.1) è *convergente* se:

$$\lim_{h \to 0} \max_{0 \le j \le N} |y_j - y(t_j)| = 0$$

h	$e_{h,EE}$	$e_{h,EI}$	$e_{h,CN}$	$\frac{e_{h,EE}}{e_{h-1,EE}}$	$\frac{e_{h,EI}}{e_{h-1,EI}}$	$\frac{e_{h,CN}}{e_{h-1,CN}}$
0.2	5.75E-02	7.42E-02	2.62E-03	–	–	–
0.1	2.49E-02	3.62E-02	6.21E-04	2.31	2.05	4.23
0.05	1.16E-02	1.78E-02	1.51E-04	2.15	2.03	4.11
0.025	5.60E-03	8.28E-03	3.48E-05	2.07	2.15	4.33

Tabella 7.1: Norma dell'errore per i metodi di EE, EI, e CN, e rapporto tra due valori consegcutivi consecutivi. Si nota che i metodi di Eulero hanno un rapporto di circa 2 mentre tale rapporto per Crank-Nicolson è circa 4, indicando quindi convergenza lineare ($O(h)$) e quadratica ($O(h^2)$), rispettivamente.

Accorgendoci che l'argomento del limite è una norma "funzionale", possiamo sostituire la precedente con una norma qualsiasi, e cioè:

$$\lim_{h\to 0} \|y_h - y(t)\| = 0$$

dove $y_h = \{y_0, y_1, \ldots, y_N\}$. Per esempio, si può utilizzare la norma L_2 definita da:

$$\|g(t)\| = \left[\int_I |g(t)|^2 \, dt\right]^{\frac{1}{2}}$$

7.3.1 Convergenza sperimentale

Analizziamo ora sperimentalmente la convergenza così definita per gli schemi ricavati più sopra. Per fare questo calcoliamo l'errore per ogni j e andiamo a valutare la norma sfruttando il fatto che $t_{j+1} - t_j = h$ è costante:

$$e_{h,xx} = \|y_h - y(t)\| \approx \frac{\left[h \sum_{j=0}^{N=1} |y_j - y(t_j)|^2\right]^{\frac{1}{2}}}{\left[h \sum_{j=0}^{N=1} |y(t_j)|^2\right]^{\frac{1}{2}}},$$

dove $xx = EE,\ EI,\ CN$ per Eulero esplicito, Eulero implicito e Crank-Nicolson. Calcoliamo dunque la norma precedente per valori decrescenti del passo di integrazione h, ad esempio in sequenza geometrica di passo 0.5, a partire da $h = 0.2$.
La tabella 7.1 riporta i risultati ottenuti, assieme al rapporto tra due errori successivi. Si nota che gli schemi di Eulero si comportano in maniera molto simile, mostrando una convergenza del primo ordine ($O(h)$), mentre Crank-Nicolson mostra una convergenza di ordine 2 ($O(h^2)$). Bisogna quindi formalizzare queste osservazioni e studiare quindi il comportamento degli schemi in generale. Come per tutti

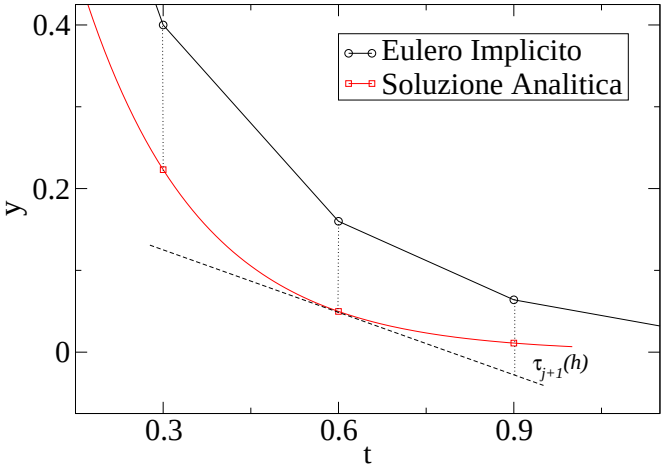


Figura 7.4: Interpretazione geometrica dell'errore di troncamento locale (indicato con $\tau_{j+1}(h)$) per il metodo di Eulero Esplicito applicato all'esempio 7.6,

gli schemi, il modo più diretto per studiare la convergenza è quello di verificare la consistenza dello schema e la sua stabilità.

7.3.2 Consistenza e errore di troncamento.

La prima osservazione da fare riguarda l'ordine di convergenza. Non sorprendentemente gli schemi convergono alla soluzione con lo stesso ordine in h dei termini che sono stati trascurati negli sviluppi di Taylor. Quindi la velocità di convergenza è funzione del cosiddetto *errore di troncamento*. Bisogna però distinguere tra *errore di troncamento locale* e *errore di propagazione*. Il primo è l'errore che si commette avanzando di un passo (da t_j a t_{j+1}), assumendo di partire dal valore esatto della soluzione ($y(t_j)$). Il secondo è l'errore di propagazione derivante dall'accumulo degli errori di troncamento locali. Quindi possiamo scrivere:

$$e_{j+1} = y(t_{j+1}) - y_{j+1} = y(t_{j+1}) - y^*_{j+1} + y^*_{j+1} - y_{j+1}$$

dove y^*_{j+1} è la soluzione ottenuta dallo schema a partire dalla soluzione vera $y(t_j)$. In generale, scriviamo tutti gli schemi precedenti (e tutti gli schemi ad un passo) come:

$$y_{j+1} = y_j + h\Phi(t_j, y_j, f_j; h), \qquad 0 \leq j \leq N-1, \tag{7.9}$$

dove la funzione $\Phi(\cdot,\cdot,\cdot;h)$ individua il particolare schema[16] Sostituendo la soluzione vera $y(t)$ nella precedente otteniamo:

$$y(t_{j+1}) = y(t_j) + h\Phi(t_j, y(t_j), f(t_j, y(t_j)); h) + \epsilon_{j+1},$$

dove il termine ϵ_{j+1} è il residuo al passo $j+1$. Scriviamo tale residuo nella forma:

$$\epsilon_{j+1} = h\tau_{j+1}(h)$$

dove $\tau_{j+1}(h)$ è l'errore di troncamento locale. L'errore di troncamento non globale ma "locale massimo" (verificare) è quindi dato da:

$$\tau(h) = \max_{0\le j\le N-1} \tau_{j+1}(h). \tag{7.10}$$

La funzione Φ è tale che:

$$\lim_{h\to 0} \Phi(t_j, y(t_j), f(t_j, y(t_j)); h) = f(t_j, y(t_j)) \qquad j = 1, 2, \ldots, N.$$

Ricordando la (7.4), per cui si ha $y(t_{j+1}) - y(t_j) = hy'(t_j) + O(h^2)$, si vede subito che la precedente implica che $t_{j+1}(h) \to 0$ al tendere di h a zero, da cui risulta:

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

che implica che lo schema (7.9) è *consistente*, cioè l'errore locale di troncamento tende a zero con h. Inoltre si dice che lo schema ha *ordine di convergenza* o *di accuratezza* pari a p se

$$\tau(h) = O(h^p).$$

Esempio 7.12 (Errore di troncamento per Eulero Esplicito)**.** Per il metodo di Eulero esplicito il residuo vale:

$$\epsilon_{j+1}(h) = \left|y(t_{j+1}) - y^*_{j+1}\right| = |y_{j+1} - y(t_j) - hf(t_j, y(t_j))| = \frac{h^2}{2}|y''(\xi)|,$$

con $\xi \in I$ punto opportuno (derivante dall'applicazione del teorema del valor medio). L'errore di troncamento locale è dunque:

$$\tau_{j+1}(h) = \frac{h}{2}|y''(\xi)|,$$

mostrando che lo schema è del primo ordine di accuratezza, come verificato sperimentalmente in precedenza. In Figura 7.4 si riporta un'interpretazione geometrica dell'errore di troncamento locale e dell'errore di propagazione.

[16] Ad esempio, per EE: $\Phi(t_j, y_j, f_j, h) = f(t_j, y_j)$.

Si vede facilmente dalla loro derivazione con la formula di Taylor che i metodi precedentement studiati sono tutti consistenti; gli schemi di Eulero hanno accuratezza $p = 1$, mentre Crank-Nicolson ha accuratezza $p = 2$, come evidenziato anche dagli esperimenti numerici.

7.3.3 Stabilità

La stabilità di uno schema viene definita in maniera analoga alla stabilità definita per il problema di Cauchy (cf. 7.3) il caso in cui $h \to 0$. Ovviamente, siccome gli errori locali (commessi ad ogni passo) si accumulano all'aumentare del numero di passi di integrazione, la stabilità implicherà che tali errori non vengano amplificati dallo schema. In questo caso bisogna considerare un punto fissato $t_j \in I = [t_0, T]$, con T limitato, e vedere cosa succede a piccole perturbazioni della soluzione al tendere di h a zero; siccome $t_j = t_0 + jh$, bisogna far tendere contemporanemante j all'infinito in modo che:

$$\lim_{\substack{h\to 0 \\ j\to\infty}} t_j = t$$

Abbiamo dunque la seguente:

Definizione 7.13 (Zero-stabilità)**.** [17] Uno schema ad un passo (eq. (7.9)) si dice *zero-stabile* se perturbazioni alla soluzione rimangono limitate al tendere di h a zero.

Lo schema esplicito (7.9) caratterizzato da una $\Phi(t, y, f(t, y(t); h)$ lipschitziana, è zero stabile. Infatti, una $\Phi(t, y, f(t, y(t); h)$ lipschitziana è caratterizzata da:

$$|\Phi(t_k, y_k, f(t_k, y_k); h) - \Phi(t_k, z_k, f(t_k, z_k); h)| \leq \Lambda |y_k - z_k|.$$

Indicando con $w_k = y_k - z_k$, si ha facilmente:

$$w_{k+1} = w_k + h\left[\Phi(t_k, y_j, f(t_k, y_k); h) - \Phi(t_k, z_j, f(t_k, z_k); h)\right] + h\delta_{k+1}.$$

[17] In maniera equivalente si può dare la seguente definizione di zero-stabilità:

Definizione 7.14 (Zero-stabilità)**.** Lo schema ad un passo (7.9) per la soluzione di (7.1) si dice *zero-stabile* se esiste $h_0 > 0$ e una costante $C > 0$ tali che per ogni $h \in (0, h_0]$ e $\epsilon > 0$ piccolo a piacere, per $|\delta_j| \leq \epsilon$:

$$|y_j - z_j| \leq \epsilon \qquad \forall 0 \leq j \leq N,$$

dove y_j è la soluzione numerica del problema (7.1), e z_j è la soluzione numerica del problema (7.3).

La somma per $k = 0, 1, \ldots, j$ risulta:

$$w_{j+1} = w_0 + h \sum_{k=0}^{j} \delta_{k+1} h \sum_{k=0}^{j} \left[\Phi(t_k, y_j, f(t_k, y_k); h) - \Phi(t_k, z_j, f(t_k, z_k); h) \right].$$

Per la lischitzianità di Φ si ha:

$$|w_{j+1}| \leq |w_0| + h \sum_{k=0}^{j} \delta_{k+1} + h\Lambda \sum_{k=0}^{j} |w_k|$$

Usando la versione discreta del lemma di Gronwall [18] si ottiene subito:

$$|w_j| \leq \epsilon \left(1 + hj\right) \exp\left(\Lambda hj\right).$$

La dimostrazione si conclude notando $hj \leq T$.
Una dimostrazione simile porta al seguente:

Teorema 7.3 (Teorema di Lax-Richtmeyer)**.** *Uno schema zero-stabile e consistente è convergente.*

Si noti che i metodi di Eulero sono zero-stabili perchè la (7.1) è ben posta. Siccome sono consistenti, sono anche convergenti.

Analisi di convergenza per il metodo di Eulero esplicito Definiamo come prima l'errore al passo t_{j+1} come $e_{j+1} = y(t_{j+1}) - y_{j+1}$ e indichiamo con y^*_{j+1} la soluzione ottenuta dopo un passo del metodo di Eulero partendo però dalla soluzione esatta:

$$y^*_{j+1} = y(t_j) + hf(t_j, y(t_j)).$$

---

[18]

Lemma 7.2 (Lemma di Gronwall discreto)**.** *Si indichi con K_n una successione non negativa e con φ_n una successione tale che, dato $\varphi_0 \leq g_0$:*

$$\varphi_j \leq g_0 + \sum_{k=0}^{j-1} p_k + \sum_{k=0}^{j-1} K_k \varphi_k.$$

Se $g_0 \geq 0$ e $p_j \geq 0$ per ogni $j \geq 0$, allora:

$$\varphi_j \leq \left(g_0 + \sum_{k=0}^{j-1} p_k \right) exp \left(\sum_{k=0}^{j-1} K_k \varphi_k \right).$$

Possiamo scrivere:

$$e_{j+1} = \left(y(t_{j+1}) - y^*_{j+1}\right) + \left(y^*_{j+1} - y_{j+1}\right).$$

Il primo termine è il residuo (h volte l'errore di troncamento locale), mentre il secondo considera l'accumulo di tale errore nel tempo. Quindi possiamo scrivere:

$$|e_{j+1}| \leq h|\tau_{j+1}| + (1 + hL)|e_j|.$$

Maggiorando l'errore di troncamento locale con quello globale si ottiene per ricorrenza e notando che $e_0 \leq \tau(h)$:

$$|e_{j+1}| \leq \left[1 + (1 + hL) + \ldots + (1 + hL)^j\right] h|\tau(h)| \leq \frac{exp(L(t_{j+1} - t_0)) - 1}{L}\tau(h),$$

avendo notato che $(1 + hL) \leq e^{hL}$ e $t_{j+1} = t_0 + (j + 1)h$. Dalla consistenza dello schema di Eulero, si ricava immediatamente che:

$$\tau_{j+1}(h) = \frac{h}{2}y''(\xi), \qquad \xi \in [t_j, t_{j+1}],$$

e indicando con $M = max_{\xi \in I}|y''(\xi)|$, si ha subito la convergenza (al primo ordine di accuratezza $p = 1$) dello schema di Eulero esplicito:

$$|e_j| \leq \frac{exp(L(t_{j+1} - t_0)) - 1}{L}\frac{M}{2}h.$$

Abbiamo fatto i conti fin qui senza tenere in considerazione gli errori di arrotondamento. Se lo facessimo, non potremmo più concludere che l'errore tende a zero con h, ma ci sarà un termine aggiuntivo nella maggiorazione dell'errore proporzionale a $1/h$ (con costante piccola, peraltro). Esisterà quindi un valore h^* che minimizzerà l'errore, e al di sotto del quale l'errore comincerà a crescere, essendo l'accumlazione dell'errore di arrotondamento preponderante rispetto all'errore di troncamento. In genere, però, h^* è praticamente molto piccolo, per cui questo effetto non si vede per valori ragionevolmente piccoli di h.

7.3.4 Assoluta stabilità

La zero stabilità non spiega il comportamento visto nell'esempio 7.6, dove si notava l'instabilità del metodo di Eulero in avanti. Infatti in questo caso il metodo esplicito è stabile solo per $h < 0.2$.
Bisogna quindi ricorrere alla nozione di *assoluta stabilità*, che intende verificare la stabilità dello schema a h fissato e per valori di T che aumentano. Tale concetto di

stabilità però dipende dalla particolare forma di $f(t, y(t))$, per cui si deve far ricorso a quella che si chiama l'equazione test, ovvero:

$$\begin{aligned} y' &= \lambda y && (7.11) \\ y(0) &= 1 && (7.12) \end{aligned}$$

la cui soluzione è $y(t) = e^{\lambda t}$. Anche se in realtà $\lambda \in \mathbb{C}$, noi assumeremo per semplicità $\lambda \in \mathbb{R}$. E' evidente che la soluzione tenderà a zero per t che tende all'infinito se $\lambda < 0$, altrimenti tenderà all'infinito. Quindi per $\lambda < 0$, la stabilità dovrà richiedere che le perturbazioni alla soluzione numerica tendano a zero all'aumentare del tempo. Nel caso di $\lambda > 0$ la definizione di stabilità dovrà tenere conto invece della possibile crescita nel tempo delle perturbazioni ma non tanto da distruggere l'accuratezza dello schema. Di nuovo per semplicità assumeremo $\lambda < 0$, rimandando al testo [3] per approfondimenti.
Sotto queste ipotesi, possiamo dare la seguente definizione di stabilità assoluta:

Definizione 7.15 (Assoluta stabilità)**.** Lo schema ad un passo (7.9) si dice assolutamente stabile se, applicato all'equazione test (7.11) con $\lambda < 0$, la soluzione numerica y_j soddisfa:

$$\lim_{tj \to \infty} |y_j| \to 0$$

Si noti che l'equazione test in realtà può essere pensata come la linearizzazione del generico problema di Cauchy (7.1). Infatti, linearizzando (7.1) si ottiene il seguente problema di Cauchy:

$$\begin{aligned} y'(t) &= \frac{\partial f}{\partial y}(t, y(t))y(t) \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

da cui l'equazione test con $\lambda = \frac{\partial f}{\partial y}(y, y(t))$.

Stabilità degli schemi di Eulero e Crank-Nicolson Studiamo ora la stabilità assoluta per gli schemi di Eulero esplicito ed implicito, e lo schema di Crank-Nicolson, per dare un senso compiuto ai risultati degli esperimenti riportati più sopra.

Metodo di Eulero in avanti. Applicando il metodo di Eulero in avanti all'equazione test (7.11) si ottiene:

$$y_{j+1} = y_j + \lambda h y_j = (1 + h\lambda)y_j.$$

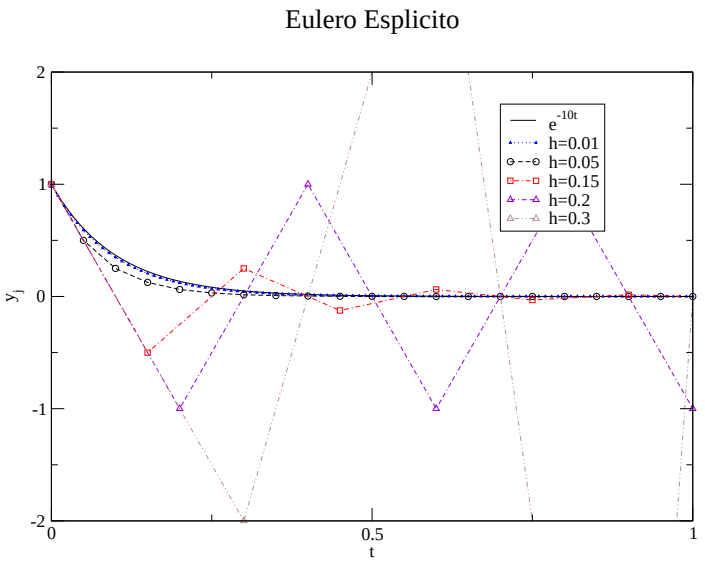


Figura 7.5: Soluzioni numeriche dell'equazione test con $\lambda = -10$ ottenute con il metodo di Eulero esplicito per diversi valori di h a confronto con la soluzione analitica.

Per induzione, partendo da $j = 0$, si ottiene immediatamente:

$$y_j = (1 + h\lambda)^j$$

che tende a zero se e solo se:

$$|1 + h\lambda| < 1$$

da cui la condizione di assoluta stabilità per il metodo di Eulero esplicito:

$$0 < h < \frac{2}{-\lambda}$$

Nel caso $\lambda = -1$ (esempio (7.5)) si ottiene che lo schema di Eulero esplicito è stabile se $h < 2$. Nel caso $\lambda = -5$ (esempio (7.6)) lo schema risulta stabile se $h < 0.4$. Si noti che il risultato precedente ci dice che la soluzione tende a zero per $h < 0.4$. Un'analisi più approfondita rivela però che la soluzione numerica sarà oscillante ($(1+h\lambda) < 0$) per $0.2 < h < 0.4$, mentre tenderà a zero monotonicamente (con valori sempre positivi, e quindi qualitativamente in accordo con la soluzione analitica) per $h < 0.2$. Nel caso $\lambda = -10$ invece lo schema è stabile solo se $h < 0.2$, mentre la soluzione non oscilla se $h < 0.1$, come si vede dalla figura 7.5, dove si riportano i risultati ottentuti con Eulero in avanti per diversi valori di h.

Metodo di Eulero all'indietro. Applichiamo ora il metodo di Eulero all'indietro (o implicito)all'equazione test (7.11)::

$$y_{j+1} = y_j + \lambda h y_{j+1} = \frac{1}{1-h\lambda} y_j.$$

Per induzione, partendo da $j = 0$, si ottiene immediatamente la condizione di stabilità:

$$\left|\tfrac{1}{1-h\lambda}\right| < 1,$$

sempre verificata per qualsiasi h (a patto che sia $\lambda < 0$, ovviamente). Lo schema risulta quindi *incondizionatamente* stabile, cioè stabile per qualsiasi valore di h, come menzionato precedentemente negli esempi 7.7 e 7.8. Anche la monotonia della soluzione è assicurata per qualsiasi valore di h, per $\lambda < 0$.

Metodo di Crank-Nicolson. E' facile intuire che proprietà di stabilità incondizionata è comune agli schemi impliciti, per cui anche Crank-Nicolson dovrebbe esserlo. Infatti:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{\lambda h}{2}(y_{j+1} + y_j) = \frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda} y_j,$$

da cui, sempre per induzione, la condizione di stabilità diventa:

$$\left|\frac{2 + h\lambda}{2 - h\lambda}\right| < 1$$

da cui segue immediatamente la stabilità incondizionata dello schema di Crank-Nicolson, mentre chiaramente la monotonia della soluzione nomerica non è assicurata se non per $h < 2/|\lambda|$.

7.3.5 Implementazione metodi impliciti

Riprendiamo di nuovo l'algoritmo di Eulero implicito:

ALGORITHM EULERO_IMPLICITO
Input: t_0, y_0, N, h;
FOR $j = 0, 1, \ldots, N-1$
1. $t_{j+1} = t_j + h$
2. *Risolvere* $y_{j+1} - y_j - hf(t_{j+1}, y_{j+1}) = 0$
END FOR

Il passo al punto 2. richiede di risolvere un problema non lineare per y_{j+1}. Tale passo viene implementato utilizzando un metodo iterativo alla Newton. Chiamiamo x la nostra incognita: $y_{j+1} = x$, così che il problema diventa:
Trovare lo zero della funzione $g(x)$, trovare cioè la soluzione della equazione $g(x) = 0$, dove:

$$g(x) = x - y_j - hf(t_{j+1}, x) = 0.$$

Possiamo usare un'iterazione di Newton-Raphson oppure di Picard. Andiamo a formalizzare nel dettaglio il caso di Picard, e andiamo a verificare le condizioni di convergenza di tale schema. Indicando con r l'indice di iterazione nonlineare, lo schema di Picard si pù scrivere come:

$$x^{(r+1)} = g(x^{(r)}) = x^{(r)} - y_j - hf(t_{j+1}, x^{(r)}).$$

Lo schema sopra converge se $|g'(x)| < 1$ per $x \in I_\xi$, dove I_ξ è un intorno del punto fisso. La derivata di g è:

$$g'(x) = 1 - h\frac{\partial f}{\partial x}(t_{j+1}, x),$$

da cui si ricava una condizione sufficiente per la convergenza dello schema di Picard simile alla condizione di assoluta stabilità per lo schema di Eulero esplicito:

$$\left|1 - h\frac{\partial f}{\partial x}(t_{j+1}, x)\right| < 1$$

che implica una restrizione al passo di integrazione che limita l'utilizzo di questo schema:

$$h\left|\frac{\partial f}{\partial x}(t_{j+1}, x)\right| < 2.$$

Se invece del metodo di Picard, usiamo lo schema di Newton-Raphson non si ha più alcuna restrizione sul passo di integrazione richiesta dalla convergenza dello schema di risoluzione nonlineare. Tutto questo può essere ripetuto anche per lo schema di Crank-Nicolson. In conclusione, dal punto di vista computazionale, è quasi sempre preferibile usare uno schema implicito al posto di uno esplicito assieme allo schema di Newton-Raphson, anche se la cosa deve essere verificata sul particolare problema (e quindi la particolare $f(t, (y(t)))$ che si vuole risolvere.

Riferimenti bibliografici

[1] *IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic, ANSI/IEEE Std 754-1985 (IEEE 754)*. New York, 1985.

[2] J.-P. Berrut and L. N. Trefethen. Barycentric Lagrange Interpolation. *SIAM Review*, 46(3):501–517, Jan. 2004.

[3] A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri. *Numerical Mathematics*. Springer, Berlin, Heidelberg, second edition, 2007.

[4] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Springer-Verlag, New York, NY, 1980.

[5] Sun Microsystems, Inc. *Numerical Computation Guide, Sun ONE Studio 8*, part no. 817-0932-10 edition, May 2003.

[6] A. Turing. On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem. In *Proceedings of the London Mathematical Society*, volume 42, 1936.

[7] J. von Neumann. First draft of a report on the edvac. Technical report, Moore School of Electrical Engineering, University of Pennsylvania, 1945.