
Laura Gori

CALCOLO
NUMERICO

V Edizione riveduta e ampliata

EDIZIONI KAPPA

||| Prefazione

Obiettivo del Calcolo Numerico è lo sviluppo di metodi per la risoluzione di problemi fisici, opportunamente tradotti in formulazione matematica, per i quali, anche in presenza di soluzione analitica, risulti più conveniente o maggiormente significativo disporre di soluzioni numeriche.

L'esigenza di ottenere risposte numeriche, da sempre sentita nelle Scienze Applicate, unitamente alla possibilità, offerta dall'elevato livello di prestazione degli attuali mezzi di calcolo automatico, di eseguire grandi moli di calcoli in tempi brevi e con alta precisione, forniscono sollecitazioni e motivazioni all'elaborazione e messa a punto di nuove tecniche numeriche. Si tratta quindi di una materia in continua evoluzione, ed è anche questo aspetto che dovrebbe renderla interessante agli Studenti della Facoltà di Ingegneria, ai quali principalmente questo testo è rivolto; l'acquisizione di strumenti matematico-computazionali fornisce un utile completamento, poi, di buona parte dei concetti trattati nei corsi di Analisi Matematica, Geometria e Algebra.

La linea di presentazione degli argomenti base del Calcolo Numerico, oggetto delle lezioni raccolte in questo volume, privilegia gli aspetti computazionali e proprio per questo è stata fatta la scelta di omettere frequentemente le dimostrazioni dei teoremi, dei quali si fa uso per illustrare o raggiungere certi risultati.

Dopo aver brevemente introdotto (Cap. 1) alcuni concetti fondamentali, che si presentano nell'approccio numerico dello studio di modelli matematici, si richiamano alcune proprietà dell'algebra delle matrici e degli spazi vettoriali (Cap. 2); vengono poi presentati (Cap. 3 e 4) metodi ed algoritmi per la soluzione di equazioni e sistemi di equazioni non lineari e di sistemi lineari; i principali algoritmi per l'analisi spettrale di matrici sono oggetto del Cap. 5. I Capitoli 6 e 7 sono dedicati ai temi classici dell'approssimazione: ricostruzione di dati e funzioni con metodi basati su polinomi algebrici, po-

linomi algebrici a tratti, polinomi trigonometrici; si trattano inoltre derivazione e integrazione numeriche. Dopo una breve esposizione della soluzione numerica delle equazioni alle differenze (Cap. 8) si trattano diffusamente i metodi risolutivi di equazioni differenziali, relativi al problema di Cauchy; un cenno viene poi fatto anche alla trattazione numerica dei problemi ai limiti (Cap. 9). Le nozioni base e i principali metodi alle differenze per la soluzione numerica di problemi alle derivate parziali sono oggetto dell'ultimo capitolo (Cap. 10). Vari esempi, spesso volutamente semplici, con i relativi risultati numerici, illustrano alcuni degli aspetti principali di ogni capitolo; esercizi svolti sull'uso dei metodi numerici qui presentati, nonché sulla loro implementazione su elaboratori elettronici, sono reperibili nel testo [6] della bibliografia.

Roma, settembre 2006

L'AUTORE

||| Lista dei simboli

\mathbb{N} insieme dei numeri naturali: $0, 1, 2, \dots$

\mathbb{N}^+ insieme dei numeri naturali positivi

\mathbb{Z} insieme dei numeri interi relativi

\mathbb{R} insieme dei numeri reali

\mathbb{R}^+ insieme dei numeri reali positivi

\mathbb{C} insieme dei numeri complessi

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ -1 & \text{se } x < 0 \end{cases}$$

$\operatorname{tr}(x)$ troncamento del numero reale x

$\operatorname{rd}(x)$ arrotondamento del numero reale x

$[x]$ parte intera del numero reale x

$$\delta_{rs} = \begin{cases} 1 & \text{se } r = s \\ 0 & \text{se } r \neq s \end{cases} \quad \text{simbolo di Kronecker}$$

\mathbb{P}_n insieme dei polinomi algebrici di grado $\leq n$

\log logaritmo in base e

Log logaritmo in base 10

$r(A)$ rango della matrice A

$\rho(A)$ raggio spettrale della matrice A

$\operatorname{tr}(A)$ traccia della matrice A

Indice

PREFAZIONE	Pag.	v
LISTA DEI SIMBOLI	"	vii
III Capitolo 1 - Nozioni introduttive		
1.1 - Introduzione	"	1
1.2 - Rappresentazione dei numeri	"	2
1.3 - Errori	"	6
1.4 - Propagazione degli errori	"	8
1.5 - Condizionamento di un problema	"	11
1.6 - Stabilità degli algoritmi	"	15
III Capitolo 2 - Richiami su matrici e spazi vettoriali		
2.1 - Introduzione	"	19
2.2 - Richiami sulle matrici	"	19
2.3 - Operazioni tra matrici – Vettori ortogonali	"	21
2.4 - Determinante – Inversa – Rango – Matrici simili	"	22
2.5 - Matrici particolari	"	24
2.6 - Matrici trasformanti elementari	"	26
2.7 - Matrici di rotazione – Matrici di Householder	"	27
2.8 - Autovalori e autovettori di matrici	"	31
2.9 - Spazi vettoriali normati	"	33
2.10 - Norme di vettori – Norme di matrici – Matrici convergenti	"	36
2.11 - Contrazioni – Teorema del punto unito	"	42
III Capitolo 3 - Equazioni non lineari		
3.1 - Introduzione	"	45
3.2 - Separazione delle radici	"	46
3.3 - Approssimazione delle soluzioni - Ordine di convergenza	"	48
3.4 - Metodo di bisezione - Metodo di falsa posizione	"	50
3.5 - Metodi iterativi a un punto	Pag.	54

3.6 - Alcuni metodi di linearizzazione	”	61
3.7 - Criteri di arresto	”	68
3.8 - Radici multiple	”	69
3.9 - Sistemi di equazioni non lineari	”	70
3.10 - Metodo di Newton per i sistemi	”	76
3.11 - Equazioni algebriche - Metodo di Horner – Metodo di Birge-Vieta	”	77
3.12 - Radici complesse di equazioni algebriche – Metodo di Bairstow	”	81
3.13 - Accelerazione dei procedimenti iterativi – Metodo di Aitken – Metodo di Steffensen	”	84
 Capitolo 4 - Sistemi lineari		
4.1 - Introduzione	”	91
4.2 - Generalità sui sistemi lineari	”	91
4.3 - Condizionamento di un sistema lineare	”	95
4.4 - Metodi iterativi: generalità, convergenza, criteri d’arresto	”	99
4.5 - Metodo di Jacobi – Metodo di Gauss-Seidel	”	104
4.6 - Metodo di rilassamento (metodo S.O.R.)	”	108
4.7 - Matrici di preconditionamento – Metodi del gradiente	”	109
4.8 - Metodi diretti; sistemi triangolari	”	112
4.9 - Metodo di Gauss – Metodo di Gauss-Jordan	”	114
4.10 - Fattorizzazione LU	”	120
4.11 - Formule compatte di fattorizzazione	”	126
4.12 - Matrici tridiagonali - Calcolo del determinante, dell’inversa, del rango di una matrice data	”	132
4.13 - Analisi della propagazione degli errori di arrotondamento	”	135
4.14 - Sistemi sovradeterminati. Soluzione di un sistema di equazioni lineari algebriche nel senso dei minimi quadrati	”	136
 Capitolo 5 - Autovalori di matrici		
5.1 - Introduzione	”	141
5.2 - Alcuni richiami su autovalori e autovettori	”	142
5.3 - Trasformazioni per similitudine – Forme canoniche	”	147
5.4 - Generalità sui metodi – Condizionamento del problema di calcolo degli autovalori	”	149
5.5 - Localizzazione degli autovalori – Matrice di Frobenius	”	150
5.6 - Metodo delle potenze	”	154
5.7 - Commenti al metodo delle potenze – Metodo di deflazione	”	157
5.8 - Metodo delle potenze inverse	”	161
5.9 - I metodi basati sulle trasformazioni di similitudine	”	164
5.10 - Metodo di Jacobi	Pag.	166

5.11 - Metodo di Givens	”	170
5.12 - Metodo di Householder	”	173
5.13 - Autovalori di matrici tridiagonali simmetriche – Metodo di Sturm	”	177
5.14 - Metodo QR	”	180
 Capitolo 6 - Approssimazione di dati e funzioni		
6.1 - Introduzione	”	183
6.2 - Interpolazione polinomiale - Formula di Lagrange	”	185
6.3 - L'errore nell'interpolazione polinomiale	”	188
6.4 - Formula di Newton alle differenze divise	”	195
6.5 - Espressione dell'errore di troncamento nelle formule alle differenze divise	”	200
6.6 - Definizione e proprietà delle differenze finite in avanti	”	203
6.7 - Formula di interpolazione di Newton alle differenze finite in avanti	”	207
6.8 - Altre formule di interpolazione alle differenze	”	209
6.9 - Uso delle tavole alle differenze finite	”	214
6.10 - Convergenza dei polinomi interpolatori	”	218
6.11 - Funzioni Spline - Splines cubiche interpolanti	”	223
6.12 - Approssimazione ai minimi quadrati	”	228
6.13 - Approssimazioni trigonometriche	”	234
6.14 - Fast Fourier Transform (FFT)	”	239
6.15 - Derivazione numerica	”	241
 Capitolo 7 - Integrazione numerica		
7.1 - Generalità sulle formule di quadratura	”	245
7.2 - Grado di precisione	”	248
7.3 - Formule di Newton-Cotes	”	250
7.4 - Le formule di Newton-Cotes generalizzate	”	257
7.5 - Estrapolazione di Richardson - Metodo di Romberg	”	261
7.6 - Generalità sulle formule di quadratura gaussiane	”	265
7.7 - Polinomi ortogonali	”	267
7.8 - Le formule di quadratura gaussiane	”	272
7.9 - Convergenza delle formule di quadratura	”	279
7.10 - Osservazioni sull'uso delle formule di quadratura	”	284
7.11 - Integrazione numerica adattativa	”	285
 Capitolo 8 - Equazioni alle differenze		
8.1 - Definizioni e prime proprietà	”	289
8.2 - Equazioni alle differenze lineari	”	291
8.3 - Equazioni alle differenze lineari a coefficienti costanti	Pag.	294

Capitolo 9 - Soluzione numerica di equazioni differenziali ordinarie	
9.1 - Introduzione	” 299
9.2 - Un esempio di metodo numerico per la soluzione del problema di Cauchy ”	303
9.3 - Generalità sui metodi per la soluzione numerica del problema di Cauchy ”	305
9.4 - Errori di troncamento – Consistenza – Convergenza	” 309
9.5 - Metodi one-step espliciti	” 312
9.6 - Convergenza dei metodi one-step espliciti	” 317
9.7 - Metodi multistep lineari	” 321
9.7.1 - <i>Casi particolari</i>	” 324
9.8 - Metodi impliciti – Metodi predictor-corrector	” 328
9.9 - Zero stabilità	” 332
9.10 - Consistenza, convergenza e ordine dei metodi multistep	” 338
9.11 - Assoluta stabilità	” 340
9.11.1 - <i>Casi particolari</i>	” 343
9.12 - Problemi stiff	” 347
9.13 - Problemi ai limiti	” 349
9.14 - Soluzione numerica del problema di Cauchy per un sistema di equazioni differenziali	” 352
Capitolo 10 - Equazioni alle derivate parziali Metodi alle differenze finite	
10.1 - Generalità sulle equazioni alle derivate parziali	” 355
10.2 - Linee caratteristiche. Classificazione delle equazioni quasi lineari . . .	” 360
10.2.1 - <i>Linee caratteristiche per l'equazione (10.1.3)</i>	” 362
10.2.2 - <i>Linee caratteristiche per l'equazione (10.1.4)</i>	” 366
10.3 - Metodi numerici alle differenze finite. Consistenza, stabilità, convergenza	” 368
10.4 - Schemi numerici per equazioni alle derivate parziali di primo ordine .	” 373
10.4.1 - <i>Metodo leapfrog; metodo di Lax-Wendroff</i>	” 380
10.4.2 - <i>Metodi impliciti. Metodo di Crank-Nicolson</i>	” 381
10.5 - Equazioni iperboliche	” 382
10.5.1 - <i>Formula di D'Alembert</i>	” 384
10.5.2 - <i>Schema esplicito alle differenze finite per i problemi ai valori iniziali e al contorno</i>	” 386
10.6 - Equazioni di tipo parabolico	” 390
10.6.1 - <i>Introduzione</i>	” 390
10.6.2 - <i>Un metodo esplicito</i>	” 392
10.6.3 - <i>Il metodo di Crank-Nicolson</i>	” 398
10.7 - Equazioni ellittiche	” 401
BIBLIOGRAFIA	” 407

Capitolo 1

Nozioni introduttive

1.1. Introduzione

Molti problemi delle Scienze Applicate, dalla Fisica all'Economia, possono essere affrontati e risolti mediante l'analisi di un corrispondente *modello matematico*, ottenuto dando una formulazione matematica del processo fisico in esame; tale formulazione è raggiunta, in genere, procedendo con semplificazioni ed astrazioni a partire dal fenomeno in oggetto.

In relazione ad un dato problema fisico, per *modello matematico* si intende una *relazione in termini logico-matematici tra le variabili caratteristiche del problema in esame*, tale relazione può essere costituita, ad esempio, da: un sistema di equazioni differenziali, un integrale definito, un sistema di equazioni lineari, e così via.

Per trarre dai modelli matematici un complesso di informazioni qualitative circa l'evoluzione del fenomeno in esame, in generale si deve dunque risolvere un problema matematico, sia esso un sistema di equazioni lineari, di equazioni differenziali o altro. Spesso i problemi che si presentano non possono essere risolti con metodi esclusivamente analitici; ma anche se ciò avviene, notevole importanza ha la conoscenza dei valori numerici che la soluzione richiesta assume per assegnati dati.

L'obiettivo di ottenere soluzioni approssimate di taluni problemi o valutazioni numeriche in altri casi, è raggiunto con gli strumenti dell'Analisi Numerica, un settore della matematica che fornisce *metodi e procedure, che consentono di costruire soluzioni approssimate di problemi numerici*, che nascono nella trattazione dei modelli matematici.

Un problema numerico è rappresentabile come una *connessione funzionale f tra i dati X , che costituiscono le variabili indipendenti, e i risultati Y . Tale connessione può essere esplicita $Y = f(X)$, o implicita $f(X, Y) = 0$; sia i dati che i risultati sono in numero finito e sono rappresentati da vettori.*

Per risolvere i problemi numerici si usano opportune procedure, dette *metodi numerici*; essi sono basati, prevalentemente, su concetti noti dell'Analisi Matematica, e su alcune tecniche che risultano comuni a più metodi e sono efficaci in più situazioni, come avviene per i procedimenti iterativi.

Uno stesso problema può essere, in genere, risolto con più metodi; la scelta di un metodo piuttosto che di un altro è dettata sia dalle caratteristiche del metodo (quali efficienza, velocità di convergenza, ecc.) che dall'esigenza di raggiungere determinati obiettivi (approssimazione più o meno raffinata, costi computazionali più o meno elevati, ecc.), ed è anche affidata all'abilità ed all'esperienza di chi deve risolvere il problema.

Ai metodi numerici si associano gli *algoritmi*: *descrizioni complete e non ambigue di un numero finito di operazioni logiche ed aritmetiche, che consentono di ottenere i risultati Y a partire dai dati X .*

Ad esempio, la determinazione della radice reale più grande Y di un'equazione algebrica a coefficienti reali

$$x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n = 0$$

è un *problema numerico*, che ha sicuramente soluzione se n è dispari; e può essere descritto come $Y = f(X)$, una volta che sia X il vettore $[a_1, a_2, \dots, a_n]$ dei coefficienti e Y la radice cercata. Un possibile *metodo numerico* per risolvere il problema è quello di Newton-Raphson; esso viene eseguito mediante un *algoritmo*, che non solo descriva il metodo, ma contenga anche un'indicazione della scelta del punto iniziale e del criterio di arresto delle iterazioni.

Infine l'algoritmo viene implementato su calcolatore con l'uso di un *linguaggio di programmazione*, ad esempio il FORTRAN, uno dei linguaggi maggiormente usati per la programmazione matematica.

In ciascuna delle fasi che conducono dall'esame del problema fisico alla determinazione dei risultati numerici, si introducono degli errori, che possono essere classificati e, per quanto possibile, valutati o ridotti o tenuti nel debito conto al momento della valutazione *dell'attendibilità* delle risposte ottenute con l'applicazione dei metodi numerici.

Alla loro trattazione conviene premettere alcuni brevi richiami sulla rappresentazione dei numeri.

||| 1.2. Rappresentazione dei numeri

Un qualunque intero $b > 1$ può essere assunto come *base di un sistema di numerazione S* , per descrivere il quale si utilizzano b simboli

$0, 1, \dots, b-1$. In S ogni numero reale positivo può essere rappresentato in una forma del tipo

$$x = c_n c_{n-1} \dots c_0 . c_{-1} c_{-2} \dots ,$$

detta *notazione posizionale* ovvero

$$(1.2.1) \quad x = c_n b^n + c_{n-1} b^{n-1} + \dots + c_1 b + c_0 b^0 + c_{-1} b^{-1} + \dots = b^n \sum_{k=0}^{\infty} c_{n-k} b^{-k}$$

dove gli interi c_k , tali che $0 \leq c_k \leq b-1$, sono detti *cifre* della rappresentazione.

Si può dimostrare che ogni $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ ha in S un'unica rappresentazione della forma

$$(1.2.2) \quad x = \operatorname{sgn}(x) \cdot b^q \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k b^{-k}, \quad \text{con } \gamma_1 \neq 0$$

con: $q \in \mathbb{Z}$, $0 \leq \gamma_k \leq b-1$, eccetto nel caso in cui sia presente una successione di infinite cifre consecutive $\gamma_k = b-1, k > m$.

In tal caso infatti, supposto per semplicità $x > 0$, quelle che seguono sono rappresentazioni dello stesso numero

$$x = b^q \left(\sum_{k=1}^m \gamma_k b^{-k} + (b-1) \sum_{k=m+1}^{\infty} b^{-k} \right),$$

$$x = b^q \left(\sum_{k=1}^{m-1} \gamma_k b^{-k} + (\gamma_m + 1) b^{-m} \right);$$

ad esempio, nel sistema decimale

$$0.0231999\dots \quad \text{e} \quad 0.0232$$

rappresentano lo stesso numero.

La rappresentazione (1.2.2) è detta *normalizzata* e viene anche posta nella forma

$$x = \operatorname{sgn}(x) \cdot p \cdot b^q, \quad \left(p = \sum_{k=1}^{\infty} \gamma_k b^{-k} \right),$$