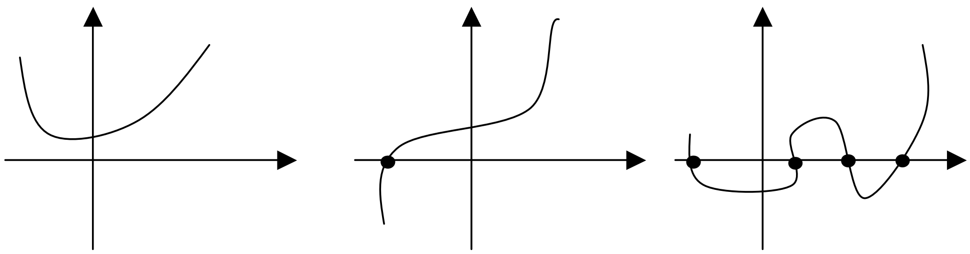
# Capitolo 3

# RADICI DI EQUAZIONI NON LINEARI CON MATHCAD

## SOMMARIO

## 1 RADICI DI EQUAZIONI NON LINEARI

In questo capitolo ci occupiamo della ricerca degli zeri di funzioni reali. Data una funzione ad una sola variabile $f(x)$ cerchiamo cioè quel valore $\alpha$ della *x*, per cui quando $x=\alpha$, $f(x)=0$. Presentiamo a titolo di esempio alcune situazioni in alcune delle quali può venir meno l'esistenza o l'unicità della soluzione reale.




Le radici di un'equazione non lineare $f(x)=0$ non possono in generale venire espresse in forma chiusa; e quando ciò è possibile la corrispondente espressione può risultare troppo complessa o comunque non competitiva rispetto ad altri modi di procedere. Pertanto per risolvere numericamente equazioni non lineari siamo costretti a ricorrere a metodi approssimati. Questi ultimi sono necessariamente di tipo iterativo; partendo da una o più approssimazioni iniziali essi producono una successione di stime della radice convergente alla radice incognita.
Un esempio invece ben noto di soluzione analitica o simbolica (cioè con un algoritmo) è il caso delle equazioni di secondo grado)

$$a\cdot x^2 + b\cdot x + c = 0 \text{ solve}, x \rightarrow \begin{bmatrix} \dfrac{1}{(2\cdot a)}\cdot\left[-b + \left(b^2 - 4\cdot a\cdot c\right)^{\left(\frac{1}{2}\right)}\right] \\ \dfrac{1}{(2\cdot a)}\cdot\left[-b - \left(b^2 - 4\cdot a\cdot c\right)^{\left(\frac{1}{2}\right)}\right] \end{bmatrix}$$

Osservate che con MathCad la soluzione simbolica si ottiene utilizzando il comando **Solve** dalla **Tavolozza Symbolics.** In alternativa al comando **Solve** dalla **Tavolozza Symbolics** si può utilizzare il **Menù Simbolics → Variable → Solve** dopo aver evidenziato con il mouse la variabile rispetto alla quale si vuole risolvere l'equazione. Questa ultima opzione funziona in generale meglio e DEVE essere usata quando il comando **Solve** dalla **Tavolozza Symbolics** dà problemi (se i coefficienti sono stati ottenuti ad esempio usando altre funzioni di MathCAD come slope o intercept) o quando non riesce ad individuare una soluzione simbolica che invece dovrebbe esserci.

Presentiamo nel seguito alcuni tra i principali metodi di base per la risoluzione numerica di una equazione non lineare.
Ricordiamo che $f(x)=0$ è un'<u>equazione algebrica</u> se *f(x)* è un polinomio; <u>equazione trascendente</u> negli altri casi.

## 2 METODI NUMERICI

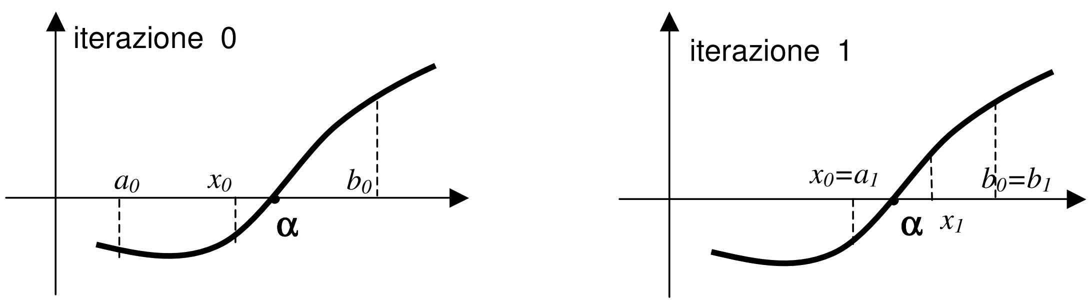
### 2.1 Metodo di bisezione

Supponiamo che la funzione *f(x)* sia continua nell'intervallo $[a_0, b_0]$ e che $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$. Queste ipotesi ci garantiscono l'esistenza di una radice $\alpha$ ( $f(\alpha) = 0$ ) nell'intervallo suddetto. Utilizzando tali informazioni ci proponiamo di costruire una successione di intervalli incapsulati tutti contenenti la radice $\alpha$. Per esempio sia $f(a_0), < 0 \quad e \quad f(b_0) > 0$. La stima zero $x_0$ (iterazione 0 nella figura) della radice $\alpha$ è data da:

$$x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2} \tag{1}$$

Analizziamo il segno di $f(x_0)$ (se fosse $f(x_0) = 0$ allora $x_0$ sarebbe la radice $\alpha$). Se

- $f(x_0) < 0$ allora gli estremi del nuovo intervallo $[a_1, b_1]$ sono $a_1 = x_0$ e $b_1 = b_0$
- $f(x_0) > 0$ allora gli estremi del nuovo intervallo $[a_1, b_1]$ sono $a_1 = a_0$ e $b_1 = x_0$




Il nuovo intervallo $[a_1, b_1]$ ha evidentemente ampiezza

$$|b_1 - a_1| = \frac{b_0 - a_0}{2} \tag{2}$$

e contiene nuovamente la radice $\alpha$.

La nuova stima $x_1$ (iterazione 1 nella figura) della radice risulta evidentemente $x_1 = \dfrac{a_1 + b_1}{2}$.

In generale all'iterazione k, la stima k-sima $x_k$ della radice $\alpha$, risulta:

$$x_k = \frac{a_k + b_k}{2} \tag{3}$$

e l'ampiezza dell'intervallo $[a_k, b_k]$ risulta

$$|b_k - a_k| = \frac{b_0 - a_0}{2^k} \tag{4}$$

La lunghezza dell'intervallo è dimezzata ogni volta per cui il metodo sicuramente converge.
Potremmo fare un discorso analogo per $f(a_0), > 0 \quad e \quad f(b_0) < 0$. Quindi la condizione che deve verificarsi per poter applicare tale metodo è che $f(a_0) \cdot f(b_0) < 0$, cioè nell'intervallo $[a_0, b_0]$ deve cadere almeno una radice. La convergenza di questo metodo risulta in generale molto lenta ed

applicabile solo per radici reali. In genere esso è applicato all'inizio per le prime stime della radice per poi passare ad altri metodi più veloci.

☺

Equazioni della retta

Per due punti $(x_0,y_0)$ e $(x_1,y_1)$ passa una sola retta di equazione

$$\frac{y-y_1}{y_1-y_0}=\frac{x-x_1}{x_1-x_0} \qquad (5)$$

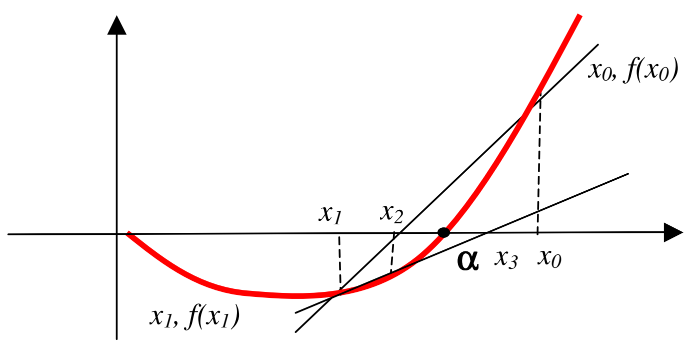
Per un punto $(x_0,y_0)$ passa una sola retta di coefficiente angolare **m** la cui equazione è

$$y-y_0=m\cdot(x-x_0) \qquad (6)$$

**2.2 Metodo delle secanti**

Richiede non solo la conoscenza del segno della funzione *f(x)* di cui vogliamo stimare gli zeri, ma anche i suoi valori. Il metodo delle secanti richiede l'assegnazione di due valori iniziali $x_0$ e $x_1$ tra i quali sia compresa la radice $\alpha$. Il metodo delle secanti costruisce la retta passante per i punti $(x_0, f(x_0))$ *e* $(x_1, f(x_1))$ secante quindi alla funzione *f(x)*. L'equazione di questa retta *l(x)* costruita usando la (5) risulta:

$$\frac{l(x)-f(x_1)}{f(x_1)-f(x_0)}=\frac{x-x_1}{x_1-x_0}$$




nel punto $x=x_2$ in cui la retta taglia l'asse delle x $l(x_2)=0$. Quindi per $x=x_2$

$$\frac{-f(x_1)}{f(x_1)-f(x_0)}=\frac{x_2-x_1}{x_1-x_0}$$

$$x_2=x_1-f(x_1)\cdot\frac{x_1-x_0}{f(x_1)-f(x_0)}$$

Quindi la stima $x_2$ della radice $\alpha$ è costruita in termini dei punti $(x_0, f(x_0))$ *e* $(x_1, f(x_1))$. In generale alla k-sima iterazione:

$$x_k = x_{k-1} - f(x_{k-1}) \cdot \frac{x_{k-1} - x_{k-2}}{f(x_{k-1}) - f(x_{k-2})} \qquad (7)$$

Una variante del metodo delle secanti è il **metodo di Muller**. Nel metodo di Muller l'approssimazione generica $x_{k+1}$ della radice $\alpha$ è costruita come zero della parabola che interpola *f(x)* nei tre punti (approssimazioni della radice) $[x_{k-2}, f(x_{k-2})]$, $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$, $[x_k, f(x_k)]$. Tale metodo presenta il vantaggio di convergere meglio e più velocemente rispetto al metodo delle secanti e di trovare sia radici reali che radici complesse anche a partire da stime reali.
Un ulteriore variante è il **metodo di Brent**. Quest'ultimo si basa sul metodo di bisezione lontano dalla radice e poi passa al metodo delle secanti quando si è nell'intorno della radice.

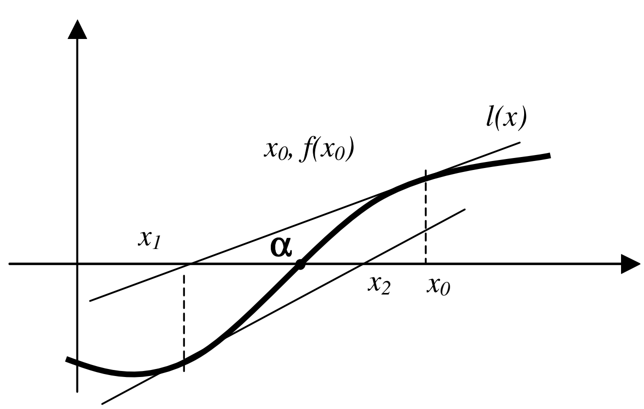
## 2.3 Metodo delle tangenti

Il metodo delle tangenti richiede l'assegnazione di un valore iniziale $x_0$ prossimo alla radice $\alpha$. Il metodo della tangente costruisce la retta passante per il punto $(x_0, f(x_0))$ e tangente alla funzione *f(x)*. Tale retta ha coefficiente angolare $m = \left[\frac{df(x)}{dx}\right]_{x=x_0} = f'(x_0)$. L'equazione della retta *l(x)* costruita usando la (6) risulta:

$$l(x) - f(x_0) = f'(x_0) \cdot (x - x_0)$$

nel punto $x = x_1$ in cui la retta taglia l'asse delle x $l(x_1) = 0$. Quindi per $x = x_1$

$$-f(x_0) = f'(x_0) \cdot (x_1 - x_0) \text{ e quindi } x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$



In generale alla k-sima iterazione

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} \tag{8}$$

## 2.4 Criteri di stop

E' evidente che tutti questi metodi sono iterativi. Tutti i metodi analizzati partono da o più approssimazioni iniziali e producono una successione di stime successive

$$x_0,\ x_1,\ x_2,\ \ldots\ldots\ x_k,\ x_{k+1},\ldots\ldots\ \alpha$$

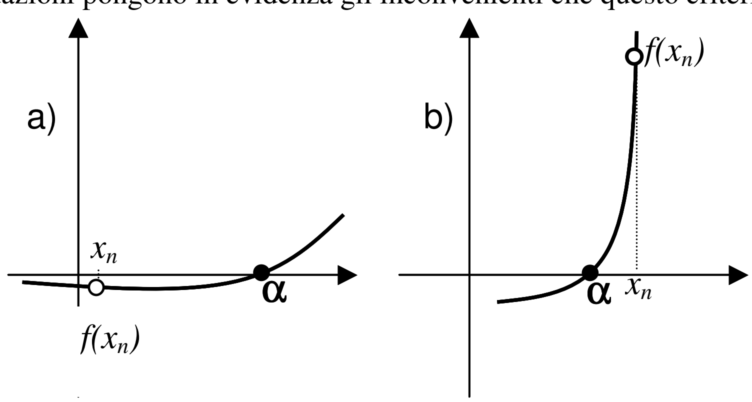
convergente alla radice incognita $\alpha$. La corrispondenza di una stima $x_n$ alla radice $\alpha$ avviene solo al limite per un numero infinito di stime

$$\lim_{n \to 0} x_n = \alpha \tag{9}$$

All'atto pratico è solo possibile effettuare un numero limitato di stime successive della radice per cui si dovranno adottare dei criteri per stabilire quando una stima $x_n$ della radice $\alpha$ è sufficientemente accurata da essere considerata una sua buona approssimazione.
Tali criteri costituiscono i criteri di stop. Possiamo individuare diversi criteri di stop.

1. $f(x_n) \le \varepsilon_1$ *(controllo del residuo)* (10)

   con $\varepsilon_1$ un numero piccolo a piacere e $x_n$ una stima della radice $\alpha$ della funzione *f(x)*. Le seguenti due situazioni pongono in evidenza gli inconvenienti che questo criterio può determinare




   Nel primo caso (pannello (a)), la funzione è molto piatta. Nel punto $x_n$ la condizione (10) è soddisfatta (il valore della funzione $f(x_n)$ è infatti molto piccolo) ma la stima $x_n$ della radice è molto lontana dal valore $\alpha$. Nel secondo caso (pannello (b)), la funzione è molto ripida. Nel punto $x_n$ la condizione (10) non è soddisfatta (il valore della funzione $f(x_n)$ è infatti molto grande) anche se la stima $x_n$ della radice è molto prossima al valore vero $\alpha$.

2. $|x_n - x_{n-1}| \le \varepsilon_2$ *(controllo dell'incremento).* (11)

   In questo $\varepsilon_2$ è un numero piccolo a piacere e $x_n$ e $x_{n+1}$ sono due stime successive della radice $\alpha$ della funzione *f(x).*

3. $\dfrac{|x - x_{n-1}|}{|x_n|} \le \varepsilon_3$ (12)

   con $\varepsilon_3$ un numero piccolo a piacere e $x_n$ e $x_{n+1}$ sono due stime successive della radice $\alpha$ della funzione *f(x).*

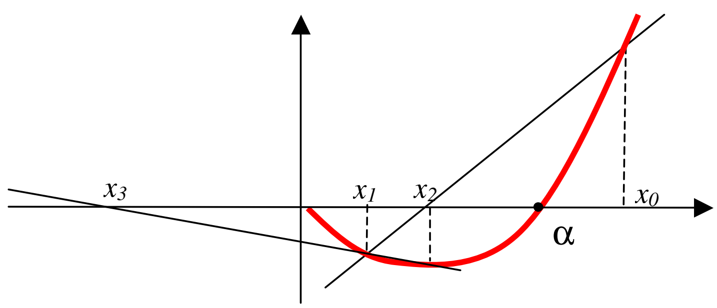
4. *Numero iterazioni* $\le N_{max}$. (13)

   $N_{max}$ è il numero massimo di stime successive della radice. E' utile quando il metodo di ricerca della radice non converge: in questo caso infatti garantisce che la valutazione di stime successive non prosegua all'infinito.

**2.5 Sul problema della convergenza**

Ma è sempre vero che una successione $x_0$, $x_1$, $x_2$, ......... $x_k$, $x_{k+1}$ di stime della radice $\alpha$ si avvicina sempre più al valore $\alpha$? **NO**

Può andare verso una singolarità o in generale valori della x per cui la funzione non è definita. In alcuni casi invece di avvicinarsi al valore $\alpha$ può allontanarsene sempre più. In altri casi più benevoli la ricerca della radice $\alpha$ può invece convergere verso un'altra radice $\alpha 1$ della stessa funzione *f(x).*




- Nel caso del metodo delle secanti e della tangente solo una stima iniziale della radice sufficientemente prossima alla radice $\alpha$ garantisce la convergenza verso di essa. Il metodo delle tangenti ha una velocità di convergenza maggiore del metodo delle secanti ma richiede il calcolo di una derivata prima della funzione. Entrambi sono più veloci del metodo di bisezione.

- Il metodo di bisezione invece converge sempre anche se lentamente.

**2.6 Radici di polinomi**

I polinomi presentano alcune proprietà che possono essere utilizzate in modo conveniente nella ricerca degli zeri.

- Un polinomio di grado n con $a_n \neq 0$

  $P_n(x) = a_n \cdot x^n + a_{n-1} \cdot x^{n-1} + ... + a_1 \cdot x + a_0$

  ha sempre n radici che possono essere reali o complesse, coincidenti o tutte distinte

- Se i coefficienti $a_k, (k = 0,1,...,n)$ sono tutti reali allora se un numero complesso $z = a + i \cdot b$ è radice di un polinomio lo è anche il suo complesso coniugato $\bar{z} = a - i \cdot b$

- Dato un numero reale $z$ è possibile dividere il polinomio di grado n $P_n(x)$ per $(x-z)$ e si ottiene un nuovo polinomio di grado n-1 $Q_{n-1}(x)$ più un resto $R$ se $z$ non è una radice del polinomio altrimenti $R=0$

$$P_n(x) = (x-z)\cdot Q_{n-1}(x) \; + \; R \quad \text{dove}$$
$$Q_{n-1}(x) = b_{n-1}\cdot x^{n-1} + b_{n-2}\cdot x^{n-2} + \ldots + b_1\cdot x + b_0$$

con:

$$\begin{cases} b_{n-1} = a_n \\ b_{k-1} = a_k + z\cdot b_k \qquad \text{per} \quad k = n-1,\ldots,1 \\ R = a_0 + b_0\cdot z \end{cases} \qquad (14)$$

I coefficienti $b_k, (k = 0,1,\ldots,n-1)$ del nuovo polinomio si determinano in funzione dei coefficienti $a_k, (k = 0,1,\ldots,n)$ e del numero reale z utilizzando delle formule ricorsive. Questa tecnica di riduzione dell'ordine del polinomio è detta deflazione del polinomio.

La tecnica di deflazione semplifica enormemente il problema di trovare tutte le radici di un polinomio. Infatti dopo aver determinato con una qualsiasi tecnica approssimata una delle radici del polinomio di grado n $P_n(x)$ ad esempio $r_1$, si procede alla riduzione del polinomio dividendolo per $(x-r_1)$: $P_n(x) = (x-r_1)\cdot Q_{n-1}(x)$. Si lavora quindi sul polinomio quoziente di grado n-1 $Q_{n-1}(x)$. Usando la stessa tecnica di ricerca degli zeri si trova una seconda radice $r_2$ sicuramente diversa da $r_1$ (il polinomio è stato ridotto di grado dividendolo per $(x-r_1)$. Si divide quindi il polinomio di grado n-1 $Q_{n-1}(x)$ per $(x-r_2)$ e si ottiene un nuovo polinomio quoziente $Q_{n-2}(x)$ di grado n-2: $Q_{n-1}(x) = (x-r_2)\cdot Q_{n-2}(x)$. Si procede in questo modo finché non vengano calcolate tutte le radici.
Ci sono metodi finalizzati alla ricerca di zeri di equazioni algebriche come ad esempio il metodo di Laguerre. Di tale metodo non diremo molto solo che utilizza la derivata prima e la derivata seconda della funzione per calcolarne le radici. Ha il vantaggio che non ha bisogno di una stima iniziale; converge sempre su una radice del polinomio (reale o complessa) indipendentemente dal punto di partenza. L'abbinamento del metodo di Laguerre con la deflazione del polinomio garantisce che tutte le radici del polinomio vengano individuate e calcolate.

Esempio.

$$P_n(x) = 2\cdot x^4 - 3a\cdot x^3 - 2a^3\cdot x + 3a^4 \qquad z = a$$

$$\begin{cases} b_3 = 2 \\ b_2 = -3a + 2a = a \\ b_1 = a + a(-a)(-a^2) = -a^2 \\ b_0 = -2a^3 + a(-a^2) = -3a^3 \end{cases} \qquad R = 3a^4 + a(-3a^3) = 0$$

Quindi z=a è una radice del polinomio. Il polinomio di deflazione è:

$$Q_{n-1}(x) = 2 \cdot x^3 - a \cdot x^2 - a^2 \cdot x + 3a^3$$

Si può scrivere:

$$P_n(x) = (x-a) \cdot Q_{n-1}(x)$$

## 3 RADICI DI EQUAZIONI NON LINEARI CON MathCad

MathCad utilizza le funzioni root ed il block solve given-find per calcolare gli zeri di equazioni non lineari e la funzione polyroots per individuare tutte le radici di un polinomio.

---

**root**

**(versione a due valori)**

| | |
|---|---|
| Sintassi | **root(f(x),x)** |
| Descrizione | Fornisce il valore di x per cui f(x)=0. |
| Argomenti | |
| x | è uno scalare reale o complesso. alla variabile indipendente x va dato un valore di partenza o di prova prima del suo utilizzo nella funzione root. |
| Commenti | Per funzioni con diverse radici è il valore di prova dato alla funzione root che determina quale radice root ottiene. <u>Non è possibile inserire valori numerici</u> nella funzione root. Il valore di prova va definito al di fuori della funzione (vedi esempio).<br>MathCad calcola le radici usando questa versione della funzione root usando il metodo delle secanti; se esso fallisce utilizza il metodo di Muller. Il valore fornito come prova rappresenta la partenza per approssimazioni successive. Se dopo molte iterazioni MathCad non riesce a trovare una radice esso marca la funzione root con un messaggio si errore indicando la sua incapacità di convergere ad un risultato. I messaggi di errore possono indicare:<br>1. L'espressione non ha radici<br>2. Le radici della funzione sono lontane dal valore di prova<br>3. La funzione presenta discontinuità tra il valore di prova e la radice<br>4. La funzione presenta un massimo o un minimo tra la radice e la stima iniziale<br>5. La funzione ha radici complesse mentre si è fornita una stima reale<br>Osservare il grafico della funzione aiuta a comprendere immediatamente la causa dell'errore.<br>Per utilizzare al meglio la funzione root<br>1. utilizzare diverse stime iniziale per ottenere le diverse radici di una funzione con più zeri<br>2. diminuire gradualmente il valore di TOL per avere una migliore accuratezza |

**root**

**(versione a quattro valori)**

| | |
|---|---|
| Sintassi | **root(f(x),x,a,b)** |
| Descrizione | Fornisce il valore di x compreso tra a e b per cui f(x)=0. |
| Argomenti | |
| x | è uno scalare reale. alla variabile indipendente x va dato un valore di partenza o di prova prima del suo utilizzo nella funzione root. |
| a,b | numeri reali con a<b |
| Commenti | Per funzioni con diverse radici, la scelta degli estremi dell'intervallo [a,b] determina a quale radice la funzione root converge. Notare che f(a) e f(b) devono essere di segno opposto. Questa versione di root <u>non richiede una stima iniziale della radice</u> ma solo l'intervallo che la contiene.<br>Questa forma di root è limitata alla ricerca di radici reali. Utilizza il metodo di Brent (secanti e bisezione). |

---

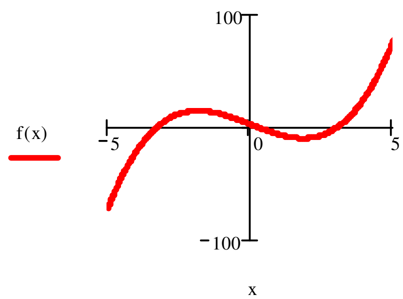
**polyroots**

| | |
|---|---|
| Sintassi | **polyroots(v)** |
| Descrizione | Fornisce le n radici reali e complesse di un polinomio di grado n i cui coefficienti sono contenuti nel vettore **v**. L'output è un vettore di dimensione n che contiene le n radici. |
| Argomenti **v** | è un vettore di lunghezza n+1 che contiene gli n+1 coefficienti del polinomio di grado n. I coefficienti in **v** vanno riportati in ordine crescente, $v_0$, $v_1$,$v_2$,…$v_n$. |
| Commenti | Polyroots non richiede stime iniziali delle radici. Fornisce contemporaneamente tutte le radici del polinomio reali e complesse.<br><br>Come lavora polyroots?<br>Utilizza il metodo di Laguerre insieme alla deflazione del polinomio: |

## Utilizzo di root e polyroots.

$f(x) := x^3 - 10 \cdot x + 2$

$TOL := 10^{-8}$




Voglio la radice prossima allo zero

root a due valori
fornisco stima iniziale

$x0 := 0.5$

$root(f(x0), x0) = 0.20080976$

root a quattro valori
fornisco estremi intervallo [a,b] che contiene la radice.
La fuznione agli estremi dell'intervallo deve avere segno opposto.
Non è necessario fornire una stima iniziale x0 della radice

$root(f(x), x, 0, 2) = 0.20080976$

Per determinare le altre due radici basta fornire stime iniziali (o intervalli) appropriati

$x0 := 5.$
$root(f(x0), x0) = 3.05708726$

$root(f(x), x, 2, 5) = 3.05708726$

$x0 := -5$
$root(f(x0), x0) = -3.25789701$

$root(f(x), x, -5, -2) = -3.25789701$

Se come in questo caso si vogliono determinare tutte le radici di un polinomio è conveniente l'utilizzo della funzione polyroots

Polyroots richiede come argomento il vettore dei coefficienti del polinomio che può essere ottenuto usando la funzione del calcolo simbolico coeffs

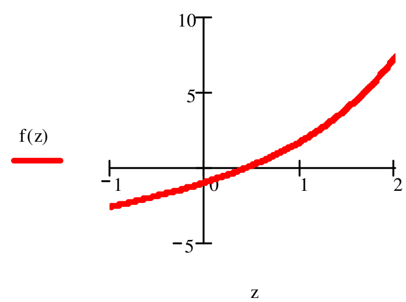
$v := f(x) \text{ coeffs}, x \rightarrow \begin{pmatrix} 2 \\ -10 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ $\qquad$ $polyroots(v) = \begin{pmatrix} -3.25789701 \\ 0.20080976 \\ 3.05708726 \end{pmatrix}$

**Given…Find**

| | |
|---|---|
| Sintassi | **Given**<br>**(una o più condizioni)**<br>**Find(var)** |
| Descrizione | Fornisce il valore della variabile var che soddisfa le condizioni specificate da Given. Le istruzioni Given… Find costituiscono un solve block. |
| Argomenti<br>**var** | è una variabile reale o complessa a cui bisogna fornire valori di prova prima del blocco Given…Find |
| Commenti | Come procedere quando si vuole utilizzare il blocco Given…Find? Ci sono alcune regole da seguire<br>1. Fornire il valore di prova della variabile che si vuole calcolare<br>2. Scrivere Given. Questo dice a MathCad che quello che segue è un insieme di condizione da soddisfare<br>3. Scrivere l'equazione con l'uguale **=** logico ed eventualmente delle condizioni aggiuntive da soddisfare<br>4. Usare Find per calcolare il valore della variabile var che soddisfa le serie di condizioni specificate in Given<br>MathCad è molto specifico per quanto riguarda le condizioni che possono apparire tra Given e Find. Possono essere condizioni del tipo: z=w; x<y; x>y; x≥y; x≤y. Non sono invece ammessi<br>• condizioni con la diseguaglianza ≠<br>• variabili di range o espressioni contenenti variabili di range<br>• qualsiasi tipo di assegnazione :=<br>Given…Find utilizza metodi basati sull'algoritmo di Newton-Raphson delle tangenti. |

## Uso di Given…Find

$f(z) := z + \exp(z) - 2$




Uso di Given...Find

$z := 0.5$ valore di prova

Given

$z + \exp(z) - 2 = 0$ condizione da soddisfare (funzione=0)

$\mathrm{Find}(z) = 0.4428544$ Cerco la z che soddisfa quanto descritto in Given

# 4 BIBLIOGRAFIA


| | | | |
|---|---|---|---|
| [1] | G. Monegato | *Calcolo Numerico* | Levrotto e Bella 1985 |
| [2] | A. Quarteroni | *Elementi di Calcolo Numerico* | Progetto Leonardo 1994 |
| [3] | W. H Press et al. | *Numerical Recipes* | Cambridge University Press 1992 |
| [4] | R. G. Mortimer | *Mathematics for Physical Chemsitry* | Academic Press 1999 |
| [5] | Mathcad2000 | *Reference Manual* | MathSoft 2000 |
| [6] | MathCad2000 | *User's Guide* | MathSoft 2000 |