Metodi Numerici con Laboratorio di Informatica - A.A. 2015-2016
Esercizi Laboratorio n° 4 - Metodo di Newton e Metodi di punto fisso

Il metodo di Newton per la ricerca dello zero α di un'equazione non lineare $f(x) = 0$ è un metodo iterativo che necessita della conoscenza della derivata prima $f'(x)$ della funzione $f(x)$.

Dato x_0, dato iniziale, la formula della generica iterazione k del metodo di Newton si esprime come:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad \text{se } f'(x_n) \neq 0, \ n \geq 0. \tag{1}$$

Nel caso in cui α sia uno zero semplice di f ($f'(\alpha) \neq 0$) il metodo di Newton converge quadraticamente.

Per arrestare il metodo di Newton solitamente si verifica se almeno una delle seguenti condizioni è verificata

- la differenza tra due iterate successive è inferiore ad una certa tolleranza *toll*:

$$e_n := |x_n - x_{n-1}| < toll; \tag{2}$$

- il numero di iterazioni effettuate è minore di un numero fissato *maxit*.

Esercizio 1. Metodo di Newton

1. Scrivere la function `newton` che implementi il metodo di Newton, la cui sintassi sia
`function [xs nit x] = newton(f,df,x0,toll,maxit)`
dove
   - `f` è la funzione di cui si vuole calcolare lo zero;
   - `df` è la derivata di `f`;
   - `x0` è il dato iniziale;
   - `toll` è la tolleranza per il criterio d'arresto;
   - `maxit` è un intero che rappresenta il numero massimo di iterazioni;
   - `xs` è l'approssimazione trovata;
   - `nit` è il numero di iterazioni effettuate;
   - `x` è il vettore contenente l'approssimazione ad ogni iterazione.
2. Si applichi la function `newton` per calcolare gli zeri di $f(x) = x^2 - 2$ con dato iniziale $x_0 = -2$ e $x_0 = 3$ e $toll = 10^{-12}$ e $maxit = 100$.

Esercizio 2. **Equazione di stato dei gas**
Una delle più note equazioni per modellizzare la relazione tra la pressione, il volume e la temperatura di un gas è la legge di Van der Walls

$$\left(P + a\frac{N^2}{V^2}\right)(V - N\,b) = NRT,$$

dove P è la pressione (Pa, 1Pa=J $\cdot$ m^{-3}), V è il volume (m^3), T è la temperatura assoluta (K), N è la quantità di sostanza (mol), R è la costante universale dei gas in unità compatibili ($8.3144\,\mathrm{J} \cdot \mathrm{K}^{-1} \cdot \mathrm{mol}^{-1}$), infine a e b sono due parametri (costanti di Van der Waals) che dipendono dalla sostanza in esame.
Per esempio per il biossido di carbonio $a = 3.640 \cdot 10^{-1}\,\frac{\mathrm{Jm^3}}{\mathrm{mol^2}}$ e $b = 4.267 \cdot 10^{-5}\,\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{mol}}$.
Si applichi il metodo di Newton con dato iniziale $V_0 = 10^{-4}$, $toll = 10^{-12}$ e $maxit = 100$, per calcolare il volume in m^3 occupato da 1 mole di biossido di carbonio alla temperatura di 400 K e all pressione di $5 \cdot 10^6$Pa. **Soluzione** $5.9408 \cdot 10^{-4}$.

Suggerimento Il problema si riconduce alla ricerca dello zero della seguente funzione

$$f(V) = \left(P + a\frac{N^2}{V^2}\right)(V - N\,b) - NRT.$$

Un **metodo di punto fisso** consiste nella creazione di una successione

$$x_{n+1} = g(x_n)$$

che converga ad un punto fisso x^* di g, cioè

$$\lim_{n\to\infty}|x_n - x^*| = 0 \qquad \text{con } x^* \text{ tale che} \quad x^* = g(x^*).$$

Graficamente si cercano le intersezioni di $y = g(x)$ con la bisettrice del primo e terzo quadrante

$$x^* \text{ soluzione di} \begin{cases} y = g(x) \\ y = x. \end{cases}$$

Non tutte le funzioni di iterazione g garantiscono la convergenza ad un punto fisso.

Teorema. Convergenza globale.
Dato x_0, si consideri la successione $x_{n+1} = g(x_n)$, $n \in \mathrm{N}$. Se valgono le seguenti ipotesi

1. $\exists I = [a, b]$ tale che $\forall x \in I \ g(x) \in I$,
2. $g \in \mathcal{C}^1(I)$,
3. $\exists L < 1 : |g'(x)| \leq L, \ \forall x \in I$,

allora g ha un unico punto fisso x^* in I. Inoltre, la successione delle x_n converge a x^* per ogni $x_0 \in [a, b]$, e

$$\lim_{n\to\infty} \frac{x_{n+1} - x^*}{x_n - x^*} = g'(x^*).$$

Osservazione Il metodo di Newton per la ricerca degli zeri di una funzione $f(x)$ è un metodo di punto fisso in cui la funzione di iterazione è

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

Esercizio 3. Metodo di punto fisso

1. Scrivere la function `ptofisso` che implementi il metodo di punto fisso, la cui sintassi sia
   `function [xs nit x] = ptofisso(g,x0,toll,maxit)`
   dove

   - `g` è la funzione di iterazione;

- `x0` è il dato iniziale;
- `toll` è la tolleranza per il criterio d'arresto;
- `maxit` è un intero che rappresenta il numero massimo di iterazioni;
- `xs` è l'approssimazione trovata;
- `nit` è il numero di iterazioni effettuate;
- `x` è il vettore contenente l'approssimazione ad ogni iterazione.

2. Si applichi il metodo alla funzione

$$g(x) = e^{x-2}$$

con $toll = 10^{-12}$ e $maxit = 100$ per un'opportuna scelta del dato iniziale.

Suggerimento Utilizzare i seguenti comandi per visualizzare graficamente il comportamento del metodo

```
figure
hold on
x_plot = linspace(min(x), max(x), 1000);
plot(x_plot, g(x_plot), 'LineWidth', 2)
plot(x_plot, x_plot, 'k-', 'LineWidth', 1)
for iter = 2:length(x)-1
      pause(0.5)
      plot([x(iter-1) x(iter) x(iter)], [x(iter) x(iter) x(iter+1)],...
      'LineWidth', 2, 'MarkerSize', 8);
end
```

Esercizio 4. Mappa Logistica.
Scrivere uno script per applicare il metodo di punto fisso alla seguente funzione

$$g(x) = r\,x(1-x) \qquad x \in [0,1],$$

i cui punti fissi sono $x^* = 0$ e $x^* = \frac{r-1}{r}$. Per $x_0 = 0.5$, $toll = 10^{-12}$ e $maxit = 100$, si verifichi graficamente il comportamento della successione $\{x_n\}$ per i seguenti valori di r

$$r = 0.5, \quad 1.5, \quad 2.5, \quad 3.2, \quad 3.5.$$