METODI NUMERICI PER EQUAZIONI DIFFERENZIALI ORDINARIE (Il metodo del punto medio e di Crank-Nicolson)

Nella lezione precedente sono stati introdotti i primi due metodi numerici per la risoluzione delle equazioni differenziali ordinarie (EDO). In particolare, sono stati esaminati in dettaglio due metodi del primo ordine: il metodo di Eulero in avanti (EA) e il metodo di Eulero all'indietro (EI). In questa lezione verranno analizzate due strategie per ottenere metodi di ordine superiore. In particolare, saranno illustrati il metodo del punto medio e il metodo di Crank-Nicolson.

Come anticipato nelle prime lezioni di questo modulo, è possibile rappresentare la derivata prima di una funzione y nel punto x_k con un'accuratezza del secondo ordine attraverso l'uso delle cosiddette differenze finite (DF) centrate. L'applicazione delle DF centrate conduce al metodo del punto medio (PM). Vediamo quindi com'è definito il metodo del PM per il generico problema di Cauchy

$$\begin{cases} y' = f\big(x, y(x)\big), & x \in I \subset \mathbb{R} \\ y_0 = y(x_0) & x_0 \in I \end{cases}.$$

Il metodo del PM è un metodo di ordine due rispetto al passo h. In questo approccio, la derivata prima nel punto x_k viene approssimata mediante un rapporto incrementale centrato

$$y'(x_k) \approx \frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2h}.$$

Di conseguenza, la successione numerica del metodo del PM per la risoluzione numerica del problema di Cauchy è definita dalla seguente espressione

$$\frac{u_{k+1} - u_{k-1}}{2h} = f(x_k, u_k) \qquad k = 1, \dots, n-1,$$

da cui si ricava la formula esplicita del metodo del punto medio:

$$\text{PM:} \qquad u_{k+1} = u_{k-1} + 2hf(x_k, u_k) \qquad k = 1, \dots, n-1.$$

Dalla condizione inziale, la soluzione numerica nel nodo x_0 è data da

$$u_0 = y_0.$$

Tuttavia, il valore u_1, ossia la soluzione numerica nel punto x_1, non può essere calcolato direttamente utilizzando la formula del metodo del PM. Infatti, per poter essere applicata, la formula del PM richiede due valori iniziali: in u_{k-1} e in u_k, ossia i valori della soluzione numerica nei nodi x_{k-1} e in x_k. Poiché il metodo del punto medio inizia dal passo $k = 1$, esso necessita dei valori u_0 e u_1 per poter calcolare u_2

$$u_2 = u_0 + 2hf(x_1, u_1) \qquad k = 1.$$

Di conseguenza, è fondamentale determinare il valore di u_1 affinché il metodo del PM possa essere applicato correttamente fin dal primo passo ($k = 1$). Nel seguito, verrà illustrato il procedimento per risolvere questa fase di inizializzazione.

A differenza dei metodi di Eulero precedentemente analizzati (EA ed EI), il metodo del PM è un metodo a due passi. Ciò significa che la soluzione u_{k+1} nel nodo x_{k+1} dipende da due valori precedenti, u_k e u_{k-1}. Nonostante questa caratteristica, il metodo del punto medio rimane un metodo esplicito

$$u_{k+1} = g(u_{k-1}, u_k) \quad \text{dove} \quad g(u_{k-1}, u_k) = u_{k-1} + 2hf(x_k, u_k),$$
$$\text{PM (esplicito)} \qquad u_{k+1} = u_{k-1} + 2hf(x_k, u_k) \qquad k = 1, \dots, n-1,$$

perché al passo $k+1$, i valori corrispondenti ai passi precedenti k e $k-1$ sono già noti. Pertanto, la relazione del PM consente di calcolare u_{k+1} in modo esplicito, utilizzando i valori precedenti u_k e u_{k-1}. Il metodo del PM è un metodo del secondo ordine. Sebbene non abbiamo ancora effettuato un'analisi dettagliata dell'errore, stiamo semplicemente facendo uso dell'informazione preliminare che la DF centrata è accurata al secondo ordine nell'approssimazione della derivata prima di una funzione. Poiché si tratta di un metodo a due passi, possiamo dedurre che il PM è un metodo di secondo ordine, in quanto si basa su due passi. Inoltre, il PM è un metodo esplicito. Tuttavia, vedremo che l'uso del metodo del PM comporta alcune problematiche legate al comportamento della soluzione. Anticipiamo ora due esempi distinti che illustrano questo comportamento. Successivamente, presenteremo una teoria analitica che giustificherà tali osservazioni.

Consideriamo il seguente problema di Cauchy

$$\begin{cases} y' = xy(x), & x \in (0, 1.5) \\ y(0) = 1 \end{cases}.$$

Questo è un problema lineare con la variabile incognita $y \in I = [0,1.5]$. In questo caso, la soluzione esatta è

$$y(x) = e^{\frac{x^2}{2}},$$

la quale è una funzione crescente.
Per inizializzare il metodo del PM è necessaria un'ulteriore condizione iniziale. Infatti, come abbiamo visto, per applicare correttamente il PM, è indispensabile disporre di due valori iniziali, u_0 e u_1, poiché il metodo si basa su due passi precedenti. Infatti

$$u_{k+1} = u_{k-1} + 2hf(x_k, u_k) \qquad k = 1, \dots, n-1,$$

e per $k = 1$ si ottiene

$$u_2 = u_0 + 2hf(x_1, u_1) \qquad k = 1,$$

dove $u_0 = 1$ è noto. È quindi necessario determinare anche u_1. A tal fine, utilizzeremo un metodo esplicito a un passo di ordine due. Sebbene non abbiamo ancora introdotto questo metodo, lo esamineremo più avanti. Anticipiamo, tuttavia, che potremmo utilizzare il metodo di Eulero modificato o il metodo di Heun, che non sono ancora stati trattati, per calcolare il valore u_1. Ad esempio, utilizzando il metodo di Heun, che verrà introdotto più avanti, possiamo osservare come si comporta la soluzione del problema per due valori distinti del parametro h, in particolare per $h = 0.5$ e $h = 0.25$.

La Figura 1 mostra la soluzione esatta $y(x)$ e i valori puntuali delle soluzioni numeriche ottenute con $h = 0.5$ e $h = 0.25$. Si osserva che, per $h = 0.5$, la soluzione numerica in $x = 0.5$ è praticamente sovrapposta alla soluzione esatta. Per $x = 1$, la soluzione è ancora molto buona, e nel punto $x = 1.5$ si ottiene il terzo valore della successione numerica. Se utilizziamo $h = 0.25$, i risultati di approssimazione sono ancora migliori, come evidenziato dalla Figura 1. In particolare, si nota che, per questo caso specifico, dimezzando il valore di h, si ottiene un comportamento qualitativamente migliore della soluzione.

Analizziamo ora l'andamento dell'errore dal punto di vista quantitativo, ricostruendo una tabella simile a quelle ottenute per i metodi di EA ed EI. Verifichiamo che effettivamente la convergenza in questo caso sia quadratica, ossia che l'errore tenda a zero come h^2.

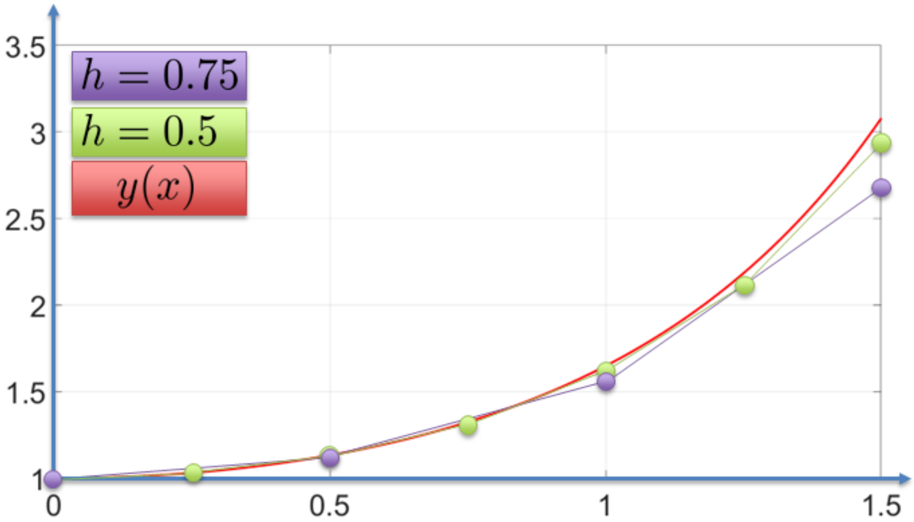

Figura 1: Grafico della soluzione esatta $y(x)$ e i valori puntuali delle soluzioni numeriche ottenute tramite il metodo del PM e con $h = 0.5$ e $h = 0.25$.

Riportiamo quindi di seguito una tabella contenente i valori numerici corrispondenti ai diversi valori di h, con il relativo errore che la soluzione numerica commette nell'approssimare la soluzione esatta.

Passo di discretizzazione h	Errore E
0.5	*0.3805*
0.25	*0.1305*
0.125	*0.0359*
0.0625	*0.0092*

L'errore di approssimazione in questo caso è espresso come il massimo errore commesso tra tutti i nodi

$$E = \max_{k=0,\dots,n} |y_k - u_k| = \max_{k=0,\dots,n} \left| e^{\frac{x_k^2}{2}} - u_k \right|.$$

Osserviamo che, di fatto, quando il valore di h viene dimezzato, l'errore si riduce in modo molto rapido. In effetti, qualitativamente, quando h si dimezza, l'errore si riduce di un fattore pari a quattro. Pertanto, possiamo concludere che l'errore dipende da h^2, ovvero si ha un errore quadratico. Dire che l'errore è quadratico

$$\text{errore PM: } O(h^2),$$

significa che, quando dimezziamo il passo h (ossia passando da h ad $h/2$) e calcoliamo la soluzione per $h/2$, il nuovo errore sarà proporzionale a $\left(\frac{h}{2}\right)^2 = \frac{h^2}{4}$. In altre parole, ogni volta che dimezziamo h, l'errore si riduce di un fattore pari a quattro.

Abbiamo quindi osservato che il metodo del PM, essendo un metodo a due passi, esibisce una convergenza quadratica. Tuttavia, questo comportamento non è sempre garantito. Vediamo ora un esempio che ci permette di comprendere come, in alcuni casi, il metodo del PM possa presentare delle difficoltà.

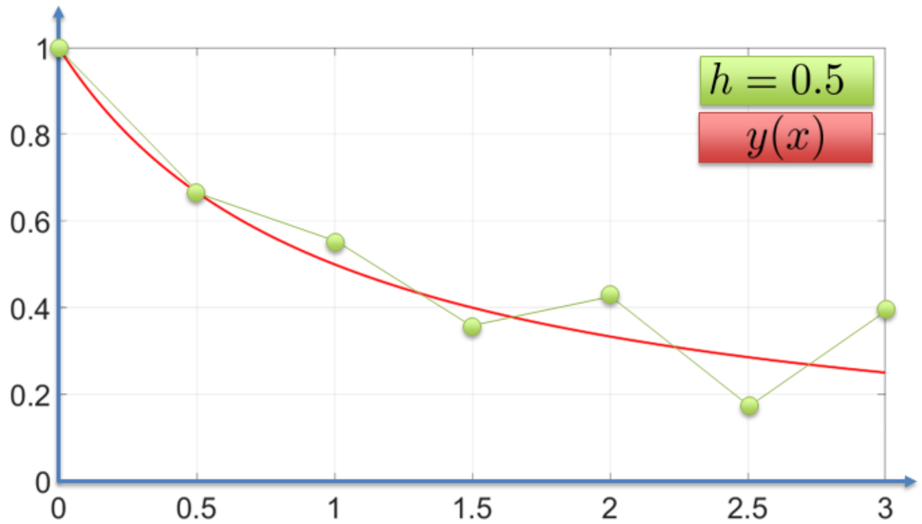

Figura 2: Andamento della soluzione numerica del PM. Per questo esempio, si osserva che il metodo del PM genera un andamento oscillante.

Consideriamo l'esempio che abbiamo già considerato per esporre i metodi di Eulero

$$\begin{cases} y'(x) = -y^2 & x \in (0,3) \\ y(0) = 1 \end{cases},$$

che ha soluzione esatta

$$y(x) = \frac{1}{x+1}.$$

La Figura 2 mostra l'andamento della soluzione numerica del PM per questo esempio. Si osserva che, invece di approssimare correttamente la soluzione, il metodo del PM genera un andamento oscillante o, meglio, determina una soluzione numerica oscillante. È importante notare che non solo è presente questo comportamento oscillatorio, ma si verifica anche un effetto di amplificazione dell'errore, ossia l'errore tende a crescere man mano che si avanza nei passi k.

Abbiamo quindi osservato che il metodo del PM funziona molto bene per un caso test, mentre in un altro esempio presenta un comportamento decisamente negativo. Questo diverso comportamento è legato a una proprietà di stabilità, un concetto che non è ancora stato introdotto. In questo secondo esempio, infatti, la condizione di stabilità non viene soddisfatta. Torneremo nelle lezioni successive su questo concetto di stabilità per approfondirlo.

Introduciamo adesso un altro metodo a un passo di secondo ordine: il metodo di Crank-Nicolson. L'idea alla base di questo metodo non è quella di utilizzare gli sviluppi di Taylor per rappresentare la derivata prima di una funzione tramite rapporti incrementali, ma piuttosto quella di fare uso della forma fondamentale del calcolo integrale. Consideriamo la generica EDO

$$y'(x) = f\big(x, y(x)\big),$$

e calcoliamo la primitiva ad ambo i membri

$$y(x'') - y(x') = \int_{x'}^{x''} y'(x)dx = \int_{x'}^{x''} f\big(x, y(x)\big)dx,$$

dove x' e x'' sono due punti dell'intervallo di integrazione. In particolare, se prendiamo x' e x'' coincidenti con due nodi consecutivi x_k e x_{k+1}

$$x' = x_k \qquad x'' = x_{k+1} = x_k + h,$$

possiamo specificare la formula nel seguente modo

$$y(x_{k+1}) - y(x_k) = y_{k+1} - y_k = \int_{x_k}^{x_{k+1}} f\big(x, y(x)\big)dx.$$

Anziché calcolare esattamente questo integrale, possiamo utilizzare una formula di integrazione numerica chiamata formula dei trapezi. La funzione integranda dipende dalla variabile x, direttamente nel primo argomento, e indirettamente attraverso $y(x)$ nel secondo argomento. Pertanto, possiamo considerare, nell'intervallo $[x_k, x_{k+1}]$, di approssimare la funzione f mediante la formula dei trapezi. Questo comporta sostituire l'integrale esatto $\int_{x_k}^{x_{k+1}} f\big(x, y(x)\big)dx$ con la somma di ciò che si ottiene negli estremi moltiplicata per $h/2$

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f\big(x, y(x)\big)dx = \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})] - \frac{h^3}{12} f''\big(\xi_k, y(\xi_k)\big),$$

dove il termine $\frac{h^3}{12} f''\big(\xi_k, y(\xi_k)\big)$ rappresenta il resto (o errore) dell'integrazione numerica nel caso della formula dei trapezi. Questo errore è di ordine tre rispetto a h, ossia un infinitesimo di ordine $O(h^3)$. Pertanto, utilizzando la formula dei trapezi, sostituendo u_k e u_{k+1} ai valori y_k e y_{k+1}, e omettendo il resto dell'integrazione, otteniamo

$$u_{k+1} - u_k = \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})],$$

che possiamo riscrivere nel seguente modo:

$$\text{CN:} \quad u_{k+1} = u_k + \frac{h}{2}[f(x_k, u_k) + f(x_{k+1}, u_{k+1})].$$

Questa formula definisce il metodo di CN, che è un metodo a un passo, poiché u_{k+1} dipende solo dal valore u_k e non dai valori nei passi precedenti. Inoltre, CN è un metodo implicito, in quanto il calcolo di u_{k+1} dipende da u_{k+1} stesso attraverso il termine $f(x_{k+1}, u_{k+1})$

$$u_{k+1} = g(u_k, u_{k+1}) \quad \text{dove} \quad g(u_k, u_{k+1}) = u_k + \frac{h}{2}[f(x_k, u_k) + f(x_{k+1}, u_{k+1})]$$

$$\text{CN (implicito)} \qquad u_{k+1} = u_k + \frac{h}{2}[f(x_k, u_k) + f(x_{k+1}, u_{k+1})] \qquad k = 0, \dots, n-1.$$

Infatti, u_{k+1} è noto attraverso $g(u_k, u_{k+1})$ e quindi è determinato solo in maniera implicita. Infine, il metodo del CN è un metodo del secondo ordine rispetto a h, come si può dedurre da quanto osservato in precedenza riguardo all'approssimazione dell'integrale con la formula dei trapezi. Infatti, abbiamo visto che la forma di integrazione numerica dei trapezi genera un errore di ordine $O(h^2)$, il che implica che anche il metodo CN, che si basa su questa forma di integrazione, possieda una convergenza di secondo ordine.
Andiamo ad analizzare come si comporta il metodo di CN sul problema di Cauchy

$$\begin{cases} y'(x) = -y^2 & x \in (0,3) \\ y(0) = 1 \end{cases}.$$

In questo caso lo schema CN ha la seguente forma

$$u_{k+1} = u_k + \frac{h}{2}[f(x_k, u_k) + f(x_{k+1}, u_{k+1})] = u_k + \frac{h}{2}\left[-u_k^2 - u_{k+1}^2\right].$$

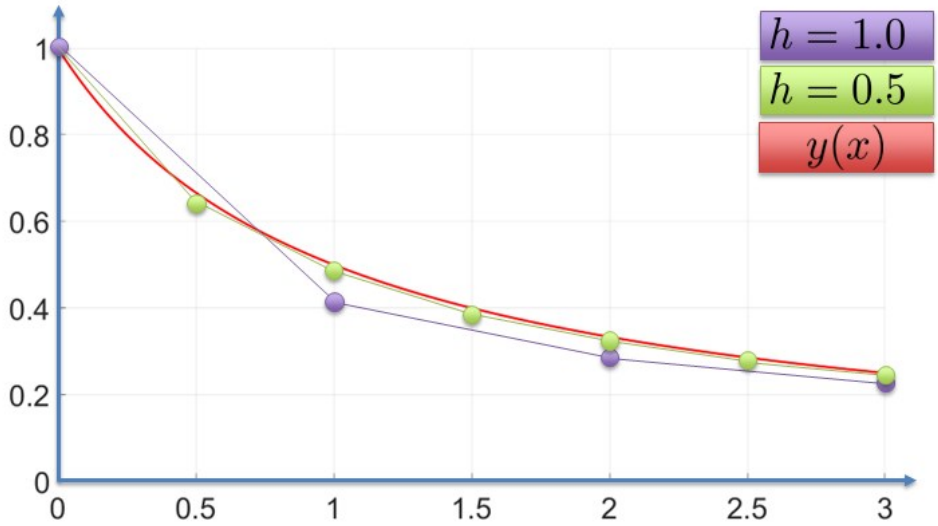

Figura 3: Soluzione numerica ottenuta tramite il metodo di CN per $h = 1$ e $h = 0.5$, a confronto con la soluzione esatta $y(x)$.

Di conseguenza, il problema risulta non lineare. Possiamo quindi utilizzare il metodo di Newton per risolvere completamente questo problema, in maniera molto simile a quanto fatto per il metodo di EI nella lezione precedente. Riproducendo la stessa procedura che abbiamo eseguito per EI, la funzione non lineare $F(z) = 0$ da risolvere, avrà la seguente espressione

$$z = u_{k+1}, \quad F(z) = \frac{h}{2}z^2 + z - u_k + \frac{h}{2}u_k^2.$$

Applicando il metodo di Newton

$$z^{(m+1)} = z^{(m)} - \frac{F\left(z^{(m)}\right)}{F'\left(z^{(m)}\right)},$$

dove $F'(z) = hz + 1$, troviamo

$$z^{(m+1)} = z^{(m)} - \frac{\frac{h}{2}\left(z^{(m)}\right)^2 + z^{(m)} - u_k + \frac{h}{2}u_k^2,}{hz^{(m)} + 1}.$$

Utilizzando questo procedimento, possiamo calcolare la soluzione numerica u_k ad ogni passo k.

La Figura 3 mostra la soluzione numerica di CN ottenuta per $h = 1$, a confronto con la soluzione esatta $y(x)$. Se calcoliamo la soluzione per $h = 0.5$, otteniamo una soluzione ancora più accurata, praticamente indistinguibile dalla soluzione esatta.

Analizzando il comportamento dell'errore per CN, in questo problema specifico, otteniamo la seguente tabella

Passo di discretizzazione h	Errore E
0.5	*0.0224*
0.25	*0.0049*
0.125	*0.0012*
0.0625	*0.0003*

L'errore di approssimazione in questo caso è espresso come il massimo errore commesso considerando tutti nodi

$$E = \max_{k=0,\dots,n}|y_k - u_k| = \max_{k=0,\dots,n}\left|\frac{1}{x_k + 1} - u_k\right|.$$

Anche in questo caso, osserviamo che al dimezzarsi di h, l'errore si riduce di un fattore pari a circa quattro. Di conseguenza, l'errore segue un comportamento quadratico, come nel caso delle formule del PM. Questo conferma che, per entrambi i metodi, l'errore è di ordine $O(h^2)$.

Abbiamo quindi introdotto due metodi di Eulero (EA ed EI), che sono metodi di ordine 1 e a un passo, e due ulteriori metodi (PM e CN) che sono di secondo ordine. Questi ultimi, pur essendo più accurati, presentano anche caratteristiche differenti in termini di stabilità e complessità, come abbiamo visto nelle rispettive analisi.