Teorema 5.7 (Prima barriera di Dahlquist) *Un metodo multistep a r passi stabile non può avere ordine superiore a r se è esplicito, mentre se è implicito il massimo ordine possibile è $r+2$ per r pari e $r+1$ per r dispari.*

5.6 Problemi differenziali con condizioni agli estremi

In questa sezione consideriamo la risoluzione numerica di equazioni differenziali ordinarie del second'ordine con assegnati valori agli estremi. Più precisamente, presentiamo un metodo alle differenze finite per la risoluzione numerica del problema differenziale

$$\begin{cases} y''(x) = p(x)y'(x) + q(x)y(x) + r(x), & a \leq x \leq b, \\ y(a) = \alpha,\ y(b) = \beta, \end{cases} \tag{5.22}$$

dove p, q e r sono funzioni note, α e β valori assegnati. Essendo l'equazione differenziale del second'ordine, per garantire l'unicità della soluzione possono essere assegnati due valori nel primo estremo, come avviene nel problema di Cauchy (5.9), oppure due valori agli estremi, come in questo caso.

Anche se il problema (5.22) è univocamente risolubile sotto ipotesi più generali, per semplicità supponiamo che le funzioni p, q e r siano continue in $[a,b]$. Sotto tali ipotesi, la soluzione è continua, con derivate prima e seconda continue in $[a,b]$.

Per la sua risoluzione con il metodo delle differenze finite, si discretizza l'intervallo $[a,b]$ e si effettua la collocazione dell'equazione, ossia si impone che l'equazione sia verificata in ogni punto nodale della discretizzazione. A questo scopo, scelto un intero n, consideriamo i punti equidistanti

$$x_i = a + ih, \qquad \text{con} \quad h = \frac{b-a}{n+1} \quad \text{e} \quad i = 0, 1, \dots, n+1.$$

In questo modo otteniamo n punti interni all'intervallo $[a,b]$, in cui la soluzione è incognita, e 2 punti nodali estremi nei quali la soluzione è nota ($y(x_0) = y(a) = \alpha$ e $y(x_{n+1}) = y(b) = \beta$).

Per la collocazione dell'equazione in ciascuno degli n punti nodali interni dobbiamo approssimare in modo efficace y' e y''. Per distinguere tra i valori esatti della soluzione nei punti nodali x_i e le loro approssimazioni numeriche, indichieremo i primi con $y(x_i)$ e le seconde con y_i. Per analogia, indicheremo con p_i, q_i e r_i, $i = 1, \dots, n$, i valori assunti da $p(x)$, $q(x)$ e $r(x)$ nei punti x_i.

Prefissato il passo di discretizzazione h, per ogni $x \in [x_1, x_n]$ valgono le seguenti stime delle derivate prima e seconda di $y(x)$

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + O(h^2), \tag{5.23}$$

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^2). \tag{5.24}$$

Come di consueto, il simbolo $O(h^2)$ indica un infinitesimo del second'ordine per h tendente a zero. La loro dimostrazione può essere ottenuta mediante uno sviluppo in serie di Taylor.

Per quanto riguarda la prima equazione, nell'ipotesi che la y sia derivabile con continuità 3 volte, per ogni $x \in [x_1, x_n]$ possiamo scrivere

$$y(x+h) = y(x) + y'(x)h + \frac{1}{2}y''(x)h^2 + O(h^2),$$
$$y(x-h) = y(x) - y'(x)h + \frac{1}{2}y''(x)h^2 + O(h^2).$$

Sottraendo membro a membro, dividendo per $2h$ e tenendo conto del fatto che $O(h^3)/h = O(h^2)$, otteniamo

$$\frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} = y'(x) + O(h^2),$$

relazione equivalente alla (5.23).

Per dimostrare la (5.24), sviluppando in serie di Taylor fino al terz'ordine, osserviamo che

$$y(x+h) = y(x) + y'(x)h + \frac{1}{2}y''(x)h^2 + \frac{1}{6}y'''(x)h^3 + O(h^3),$$
$$y(x-h) = y(x) - y'(x)h + \frac{1}{2}y''(x)h^2 + \frac{1}{6}y'''(x)h^3 + O(h^3),$$

dalle quali, sottraendo membro a membro, portando a primo membro il termine contenente $y(x)$ e dividendo per h^2, otteniamo

$$\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} = y''(x) + O(h^2).$$

L'uso delle formule (5.23) e (5.24) nella collocazione del problema (5.22) in $x = x_i$, consente di sostituire le derivate prima e seconda, rispettivamente, con le approssimazioni

$$\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad \text{e} \quad \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Si ottiene così il seguente sistema di equazioni lineari nelle incognite y_i

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - p_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - q_i y_i = r_i, \qquad i = 1, \dots, n, \quad (5.25)$$

dove $y_0 = y(x_0) = \alpha$ e $y_{n+1} = y(x_{n+1}) = \beta$.

L'errore locale di discretizzazione, ossia il residuo che si ottiene sostituendo nella (5.25) le soluzioni approssimate y_{i+1}, y_i e y_{i-1} con le soluzioni esatte $y(x+h), y(x)$ e $y(x-h)$, rispettivamente, può essere calcolato mediante la formula di Taylor. Nelle ipotesi fatte sulla regolarità della soluzione, possiamo infatti affermare che per ogni $x \in [x_1, x_n]$

$$\begin{aligned} \tau(x,h) = {} & \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} \\ & - p(x) \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} \\ & - q(x)y(x) - r(x) = O(h^2). \end{aligned}$$

Lo schema di discretizzazione utilizzato è del second'ordine in quanto

$$\tau(h) = \max_{x \in [x_1, x_n]} |\tau(x,h)| = O(h^2).$$

La valutazione dell'approssimazione della soluzione negli n punti nodali $\{x_i\}$ richiede dunque la risoluzione del sistema lineare di n equazioni in n incognite (5.25), che si può riscrivere nella forma

$$\left(\frac{1}{h^2} + \frac{p_i}{2h}\right) y_{i-1} - \left(\frac{2}{h^2} + q_i\right) y_i + \left(\frac{1}{h^2} - \frac{p_i}{2h}\right) y_{i+1} = r_i,$$

dove $i = 1, \dots, n$, $y_0 = \alpha$ e $y_{n+1} = \beta$. Moltiplicando primo e secondo membro per h^2, il sistema diventa

$$\begin{cases} b_i y_{i-1} + a_i y_i + c_i y_{i+1} = h^2 r_i, \quad i = 1, \dots, n, \\ y_0 = \alpha, \ y_{n+1} = \beta, \end{cases}$$

dove

$$\begin{aligned} a_i &= -(2 + h^2 q_i), && i = 1, \dots, n, \\ b_i &= 1 + \frac{p_i}{2} h, && i = 2, \dots, n, \\ c_i &= 1 - \frac{p_i}{2} h, && i = 1, \dots, n-1. \end{aligned}$$

Lo stesso sistema può essere scritto nella seguente forma matriciale

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & b_n & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h^2 r_1 - b_1 \alpha \\ h^2 r_2 \\ \vdots \\ h^2 r_{n-1} \\ h^2 r_n - c_n \beta \end{bmatrix}. \tag{5.26}$$

La matrice dei coefficienti del sistema (5.26) è tridiagonale. Essa è anche diagonalmente dominante nel caso risulti

$$|a_1| \geq |c_1|, \quad |a_n| \geq |b_n|, \quad |a_i| \geq |b_i| + |c_i|, \quad i = 2, \ldots, n-1,$$

con il $>$ stretto valido almeno per una riga. Questa condizione può essere soddisfatta nel caso in cui risulti $q_i \geq 0$ per $i = 1, \ldots, n$. Infatti, essendo $|a_i| = 2 + h^2 q_i$, si può scegliere h in modo che

$$\begin{aligned} b_i &= 1 + \frac{p_i}{2} h \geq 0, \qquad i = 2, \ldots, n, \\ c_i &= 1 - \frac{p_i}{2} h \geq 0, \qquad i = 1, \ldots, n-1. \end{aligned}$$

Queste condizioni risultano valide per $-1 \leq \frac{p_i}{2} h \leq 1$, ossia per $|p_i| h \leq 2$. Scegliendo quindi h in modo che

$$\Big(\max_{x \in [a,b]} |p(x)| \Big) h \leq 2.$$

risulta

$$|a_i| = 2 + h^2 q_i \geq |b_i| + |c_i|, \quad i = 2, \ldots, n-1,$$

con $|a_i| > |b_i| + |c_i|$ ogni volta che $q_i > 0$. Per la stessa scelta di h, risulta inoltre che

$$|a_1| = 2 + h^2 q_1 \geq |c_1| = 1 - \frac{p_1}{2} h \quad \text{e} \quad |a_n| = 2 + h^2 q_n \geq |b_n| = 1 + \frac{p_n}{2} h.$$

Il maggiore vale dunque in senso stretto almeno una volta, se una delle due seguenti condizioni è valida

- risulta $q_i > 0$ per almeno un valore di i;
- il passo h soddisfa $|p_1| h < 2$ oppure $|p_n| h < 2$.

Se h è scelto in modo che $|p_i|h < 2$ per ogni indice $i = 1, \dots, n$, tutti gli elementi fuori diagonale della matrice del sistema (5.26) sono non nulli e, conseguentemente, la matrice è irriducibile. Tale scelta di h garantisce quindi che il sistema abbia una e una sola soluzione, dato che la matrice dei coefficienti risulta essere diagonalmente dominante e irriducibile.

Viste le proprietà della matrice dei coefficienti, per la risoluzione del sistema si può utilizzare il metodo di eliminazione di Gauss (in questo caso non è necessario il pivoting) oppure, quando la dimensione n è grande (e quindi h piuttosto piccolo), il metodo iterativo di Jacobi o di Gauss-Seidel. Nel caso si utilizzi un metodo iterativo, per la scelta del vettore iniziale

$$\mathbf{y}^{(0)} = (y_1^{(0)}, y_2^{(0)}, \dots, y_n^{(0)})^T,$$

si può effettuare una interpolazione lineare tra (a, α) e (b, β), ponendo

$$y_i^{(0)} = \alpha + i\frac{x_i - a}{b - a}(\beta - \alpha), \quad i = 1, \dots, n,$$

dato che $y_0^{(0)} = \alpha$ e $y_{n+1}^{(0)} = \beta$.

Com'è intuitivo, la risoluzione del sistema (5.26) fornisce una buona approssimazione della soluzione del problema (5.22) in ciascun punto nodale, solo nell'ipotesi che h sia sufficientemente piccolo. È quanto precisato dal seguente teorema, che consente di stimare l'errore di approssimazione della soluzione in ciascun punto nodale, in funzione dell'errore di discretizzazione e dunque del valore di h.

Teorema 5.8 (Gershgorin) *Se il problema* (5.22) *ha una sola soluzione $y(x)$ e $q(x) \geq 0$ in $[a, b]$, esiste una costante $c > 0$, indipendente da h, tale che*

$$|y(x_i) - y_i(h)| \leq c\tau(h), \quad i = 1, \dots, n,$$

dove $y_i(h)$ è l'unica soluzione del sistema (5.26)*, c è una costante indipendente da h e*

$$\tau(h) = \max_{x \in [x_1, x_n]} |\tau(x, h)|,$$

essendo $\tau(x, h)$ l'errore di discretizzazione della formula nel punto x, con passo h.

In altri termini, il teorema stabilisce che l'errore di approssimazione è un $O(h^2)$, ossia che l'ordine con cui esso tende a zero (per $h \to 0$) coincide con quello dell'errore di discretizzazione.

Esempio 5.17 *Illustrare la risoluzione numerica del seguente problema differenziale*

$$\begin{cases} y'' = -x^2 y' + (1 - \cos x)y + r(x), \quad 0 \le x \le \pi, \\ y(0) = 0, \ y(\pi) = -\pi. \end{cases}$$

Si noti che, nel caso particolare in cui $r(x) = x(x - 2 + \cos x)\cos x - (2 + x^3)\sin x$, *la soluzione è* $y(x) = x\cos x$, *come si può verificare per sostituzione.*

L'esempio soddisfa la condizione $q(x) \ge 0$, *considerata nella teoria, dato che* $q(x) = 1 - \cos x$ *e* $-1 \le \cos x \le 1$. *Considerati i punti nodali* $x_i = ih$, *con* $i = 0, 1, \ldots, n+1$ *e* $h = \frac{\pi}{n+1}$, *la collocazione dell'equazione differenziale in* x_i *genera il sistema*

$$\begin{cases} \dfrac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + x_i^2 \dfrac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - (1 - \cos x_i)y_i = r_i, \quad i = 1, \ldots, n, \\ y_0 = 0, \ y_{n+1} = -\pi. \end{cases}$$

Moltiplicando primo e secondo membro per h^2 *e riordinando si ottiene il sistema tridiagonale* (5.26), *con*

$$a_i = -[2 + (1 - \cos x_i)h^2], \quad b_i = 1 - \frac{x_i^2}{2}h, \quad c_i = 1 + \frac{x_i^2}{2}h.$$

Essendo $c_i > 0$, *scegliamo* h *in modo che anche* $b_i > 0$. *Questa condizione, essendo* x_i *positivo e crescente rispetto a* i, *equivale a richiedere che* $h < \frac{2}{\pi^2}$, *dato che per tali valori di* h *i* b_i *sono decrescenti e*

$$b_n = 1 - \frac{x_n^2}{2}h > 1 - \frac{\pi^2}{2}h > 0.$$

Per tale scelta di h *il sistema* (5.26) *è diagonalmente dominante in senso stretto, essendo*

$$\begin{aligned} |a_i| &= 2 + (1 - \cos x_i)h^2 > |b_i| + |c_i| = 2, \quad i = 2, \ldots, n-1, \\ |a_1| &= 2 + (1 - \cos h)h^2 > 1 + \frac{h^2}{2}, \\ |a_n| &= 2 + (1 - \cos nh)h^2 > |b_n| = 1 - n\frac{h^2}{2}. \end{aligned}$$

Il sistema (5.26) *possiede dunque una sola soluzione per ogni* $h < \frac{2}{\pi^2}$.

Come stabilito dal Teorema 5.8,

$$|y(x_i) - y_i(h)| = O(h^2).$$

Ponendo quindi $h = \frac{1}{100}$, *è ragionevole attendersi un errore dell'ordine di* 10^{-4}.

Osservazione 5.2 *Ottenuti i valori y_i, $i = 1, \ldots, n$, e ricordando che $y_0 = \alpha$ e $y_{n+1} = \beta$, una approssimazione della soluzione $y(x)$ in ogni intervallo $[x_i, x_{i+1}]$ può essere ottenuta con una semplice interpolazione lineare. Ponendo infatti*

$$\hat{y}(x) = y_i + \frac{x - x_i}{h}(y_{i+1} - y_i), \quad x \in [x_i, x_{i+1}], \quad i = 0, \ldots, n,$$

si ottiene una approssimazione di $y(x)$ a meno di un errore dell'ordine di h^2, pari a quello esistente nei punti nodali.

Esercizi

1. Considerata la seguente formula alle differenze finite per la risoluzione numerica di un problema di Cauchy

$$\begin{cases} \eta_{i+1} = \eta_i + \frac{h}{5}\left[3f(x_i, \eta_i) + 2f(x_i + \frac{5}{4}h, \eta_i + \frac{5}{4}hf(x_i, \eta_i))\right] \\ \eta_0 = y_0, \end{cases}$$

classificarla, dire se è convergente e, in caso affermativo, qual'è il suo ordine.

2. Si consideri il problema di Cauchy

$$\begin{cases} y' = -2xy \\ y(0) = 1, \quad x \in [0, 10]. \end{cases}$$

Dire se esso ammette una e una sola soluzione e calcolare un'approssimazione della sua soluzione nei punti $x_1 = \frac{1}{2}$, $x_2 = 1$ e $x_3 = \frac{3}{2}$ mediante il metodo alle differenze finite di Heun con punto iniziale $x_0 = 0$ e passo $h = \frac{1}{2}$.

3. Considerata la seguente formula alle differenze finite per la risoluzione numerica di un problema di Cauchy

$$\begin{cases} \eta_{i+1} = \eta_i + \frac{h}{6}\Big[f(x_i, \eta_i) + 4f\Big(x_i + \frac{h}{2}, \eta_i + \frac{h}{2}f(x_i, \eta_i)\Big) \\ \qquad\qquad + f\left(x_i + h, \eta_i + hf(x_i, \eta_i)\right)\Big] \\ \eta_0 = y_0, \end{cases}$$

classificarla e dire se è almeno del second'ordine.

4. Si consideri il problema di Cauchy

$$\begin{cases} y' = -y^2 \\ y(0) = 1, \quad x \in [0, 10]. \end{cases}$$

   Dire se esso ammette una e una sola soluzione e calcolare un'approssimazione della sua soluzione nei punti $x_1 = 1$ e $x_2 = 2$ mediante il metodo alle differenze finite di Eulero modificato, con punto iniziale $x_0 = 0$ e passo $h = 1$.

5. Dire per quali valori del parametro $\alpha \in \mathbb{R}$ il seguente metodo alle differenze finite è convergente

$$\begin{cases} \eta_{i+1} = \eta_i + \frac{h}{3}\Big[\alpha f(x_i, \eta_i) - (\alpha - 3) f(x_i + \alpha h, \eta_i + \alpha h f(x_i, \eta_i))\Big] \\ \eta_0 = y_0 \end{cases}$$

   e per quali risulta del second'ordine.

6. Stabilire per quali dei due valori $\gamma = \frac{1}{2}$ e $\gamma = \frac{3}{8}$ il metodo multistep

$$\eta_{k+2} = \frac{3}{2}\eta_{k+1} - \gamma\eta_k + 2hf(x_k, \eta_k)$$

   è stabile.

7. Dimostrare che il metodo alle differenze

$$\eta_{k+2} = \frac{3}{2}\eta_{k+1} - \frac{1}{2}\eta_k + \alpha h f(x_k, \eta_k)$$

   è stabile e che per $\alpha = \frac{1}{2}$ rappresenta un metodo del prim'ordine.

8. Discutere la consistenza e la stabilità del seguente metodo multistep

$$\begin{cases} \eta_{i+1} = \eta_i + hf(x_{i-1}, \eta_{i-1}) \\ \eta_0 = y_0 \end{cases}$$

   e indicare un metodo monostep appropriato per la sua inizializzazione.

9. Trasformare il seguente problema del second'ordine

$$\begin{cases} y''(x) = -y + 4y' \\ y(0) = 1,\ y'(0) = 0 \end{cases}$$

in un sistema del prim'ordine e calcolare i primi due passi $\{\eta_1, \eta_2\}$ del metodo di Eulero utilizzando il passo $h = \frac{1}{2}$.

10. Eseguire i primi due passi nella risoluzione con il metodo di Eulero-Cauchy del seguente sistema differenziale

$$\begin{cases} y_1' = 2y_1 - 3y_1y_2 \\ y_2' = 4y_1y_2 - 5y_2 \\ y_1(0) = 2,\ y_2(0) = 1. \end{cases}$$

Suggerimenti per ulteriori approfondimenti

Un libro moderno e completo, anche se di livello decisamente avanzato, sui metodi numerici per la risoluzione di equazioni differenziali ordinarie è [9]. Un testo più recente che tratta in modo chiaro e approfondito questi argomenti, unitamente ad alcuni tipi di equazioni differenziali a derivate parziali (PDE), è [19]. Riguardo alle PDE, mentre [31] fornisce un'introduzione all'argomento in italiano, una trattazione generale e molto più approfondita può essere trovata in [34].