Metodi numerici altamente stabili per problemi evolutori

Raffaele D'Ambrosio

Negli ultimi decenni si é potuta riscontrare una notevole crescita nell'interesse rivolto alla modellizzazione matematica di fenomeni in evoluzione temporale, anche con memoria, mediante equazioni funzionali. Infatti, la diffusione di epidemie, la crescita di popolazioni biologiche, la progettazione di filtri elettronici e numerosi altri problemi di rilievo in ambito fisico, chimico, farmacologico, medico, economico possono essere modellati attraverso sistemi di equazioni funzionali, come le equazioni differenziali ordinarie (ODEs) e le equazioni integrali di Volterra (VIEs). Lo studio analitico dei sistemi di ODEs e VIES é stato ampiamente trattato nella letteratura, soprattutto in termini di esistenza, unicitá e stabilitá asintotica delle soluzioni. Tuttavia, nella piú gran parte dei casi di interesse nelle applicazioni, non é possibile determinarne analiticamente la soluzione: ne consegue l'importanza di sviluppare tecniche oculate per la loro integrazione numerica che, in virtú della crescente complessitá di tali modelli, conducano a metodi di integrazione approssimata particolarmente efficienti ed accurati.

Questa nota mira a presentare un sunto di alcuni dei principali risultati ottenuti in [2] relativamente alla costruzione, l'analisi e l'implementazione di nuovi metodi numerici efficienti, accurati ed altamente stabili per l'integrazione approssimata delle seguenti famiglie equazioni funzionali:

- problemi ai valori iniziali ben posti secondo Hadamard basati su sistemi di ODEs del primo ordine

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [t_0, T], \\ y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{1}$$

  con $f : [t_0, T] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$;

- problemi ai valori iniziali ben posti secondo Hadamard basati su sistemi di ODEs del secondo ordine di tipo speciale

$$\begin{cases} y''(t) = f(t, y(t)), \qquad t \in [t_0, T], \\ y'(t_0) = y_0', \\ y(t_0) = y_0, \end{cases} \tag{2}$$

  con $f : [t_0, T] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$, aventi soluzioni periodiche o oscillanti;

- sistemi di VIEs del secondo tipo

$$y(t) = g(t) + \int_0^x k(t, \tau, y(\tau))d\tau \qquad t \in I = [0, T], \tag{3}$$

con $k \in C(D \times \mathbb{R}^d)$, $D = \{(t, \tau) : 0 \le \tau \le t \le T\}$ e $g \in C(I)$.

Nonostante la letteratura scientifica si sia ampiamente espressa relativamente alla possibilitá di risolvere numericamente problemi ai valori iniziali basati su ODEs (1), si puó riscontrare come l'interesse per questa tematica sia ancora vivo. Ció che risulta di particolare interesse allo stato attuale dell'arte é l'introduzione di metodi numerici accurati, efficienti ed altamente stabili che consentano la produzione di software scientifico robusto ed efficiente per il trattamento di sistemi di ODEs di interesse nelle applicazioni. É noto infatti che questi problemi manifestano alcuni fenomeni tipici (come la stiffness, la metastabilitá, la periodicitá delle soluzioni, la presenza di forti oscillazioni; cfr. Hairer-Wanner 2002) che occorre trattare in maniera efficace. Si ritiene di particolare utilitá ricercare metodi numerici ottimali per il raggiungimento degli scopi sopracitati nell'ambito dei metodi basati su collocazione numerica e sue modifiche. La tecnica di *collocazione numerica* consiste nell'approssimazione del dato incognito (nel nostro caso la soluzione di un'equazione differenziale) mediante una funzione che appartenga ad un certo spazio funzionale finito-dimensionale, scelto opportunamente in relazione alle caratteristiche del problema. I metodi classici di collocazione sono di tipo Runge-Kutta implicito ma, pur presentando notevoli proprietá di stabilitá, soffrono di riduzione dell'ordine di convergenza quando si applicano a problemi stiff (cfr. Butcher, 1987). Al contrario, i metodi di collocazione a due passi

$$\begin{cases} P(t_n + sh) = \varphi_0(s) y_{n-1} + \varphi_1(s) y_n + h \displaystyle\sum_{j=1}^{m} \Big(\chi_j(s) f(t_{n-1} + c_j h, P(t_{n-1} + c_j h)) \\ \qquad\qquad + \psi_j(s) f(t_n + c_j h, P(t_n + c_j h)) \Big), \;\; s \in [0, 1], \\ y_{n+1} = P(t_{n+1}), \end{cases} \tag{4}$$

introdotti in [3] non risentono di alcuna riduzione dell'ordine di convergenza, poiché esso risulta essere uniforme su tutto l'intervallo di integrazione. L'errore locale di discretizzazione, che risulta essere pari a $O(h^{p+1})$ se il metodo ha ordine p, assume la seguente rappresentazione.

Teorema 1 *Se il polinomio algebrico $P(t_n+sh)$ definito in (4) fornisce un'approssimazione di ordine uniforme p della soluzione $y(t_n + sh)$ del problema (1), al variare di $s \in [0, 1]$, allora l'errore locale di troncamento associato al corrispondente metodo assume la forma*

$$\xi(t_n + sh) \;\; = \;\; C_p(s) h^{p+1} y^{(p+1)}(t_n) + O(h^{p+2}),$$

dove

$$C_p(s) = \frac{s^{p+1}}{(p+1)!} - \frac{(-1)^{p+1}}{(p+1)!}\varphi_0(s) - \sum_{j=1}^{m} \left(\chi_j(s) \frac{(c_j - 1)^p}{p!} + \psi_j(s) \frac{c_j^p}{p!} \right).$$

I metodi di collocazione a due passi (4), in quanto metodi impliciti, consentono di ottenere, in corrispondenza di una scelta mirata delle funzioni di base da cui dipendono, elevate proprietá di stabilitá lineare e non lineare, come testimoniato in [2] e nella bibliografia ivi contenuta, in cui abbiamo derivato numerose classi di metodi A-stabili, L-stabili ed algebricamente stabili afferenti alla famiglia (4). I metodi derivati, unitamente alle proprietá menzionate, rispondono anche ad un ulteriore requisito sul quale la recente letteratura, nell'ambito delle ODEs del primo ordine, ha posto particolare enfasi: la "praticitá". L'aggettivo *practical*, introdotto da J. C. Butcher (2002), sottolinea l'importanza di avere metodi dotati di buone proprietá che risultino, al contempo, realistiche da un punto di vista della loro derivazione: unitamente ad un'indagine sulle caratteristiche di un metodo numerico, diviene ugualmente importante fornire una tecnica algoritmica oculata per la sua derivazione. Questa tematica é oggetto del lavoro [1], ove abbiamo introdotto il concetto di *stabilitá quadratica inerente* (IQS): abbiamo riscontrato che il requisito di IQS consente, a tutti gli effetti, di derivare metodi numerici pratici che risultino A-stabili, L-stabili e dotati d'ordine alto di convergenza.

I metodi di collocazione a due passi sono alla base di un software matematico a passo variabile testato su problemi fortemente stiff (cfr. [2, 4]). Osserviamo che la strategia di controllo del passo di integrazione e lo stimatore dell'errore locale di troncamento su cui tale risolutore numerico si basa traggono forte vantaggio dalla peculiare formulazione del metodo, ossia dall'uso dell'approssimante continuo su cui tali metodi si basano.

In merito al problema (2), l'indagine si é svolta nell'ambito dei metodi ibridi a due passi di Coleman

$$\begin{cases} Y_i^{[n]} = u_i y_{n-1} + (1-u_i) y_n + h^2 \displaystyle\sum_{j=1}^{m} a_{ij} f(x_n + c_j h, Y_j^{[n]}), \\ y_{n+1} = \theta y_{n-1} + (1-\theta) y_n + h^2 \displaystyle\sum_{j=1}^{m} w_j f(x_n + c_j h, Y_j^{[n]}), \end{cases} \tag{5}$$

per $i = 1, 2, \dots, m$. In prima istanza, si é reso necessario partire da un opportuno adattamento al caso in esame della tecnica di collocazione algebrica a due passi. Questo tipo di indagine é preliminare ad uno studio mirato che tenga conto delle peculiaritá del problema in analisi. Le ODEs del secondo ordine, infatti, data la natura oscillante e periodica delle soluzioni, si prestano particolarmente all'utilizzo, in luogo di una base polinomiale, di una base funzionale ad hoc basata, ad esempio, su funzioni trigonometriche, esponenziali di argomento complesso o basi miste: su questo spirito si basa la strategia di approssimazione dei metodi *special purpose*. I metodi special purpose sfruttano la conoscenza dell'andamento qualitativo della soluzione del problema differenziale considerato, al fine di garantire maggiore efficienza ed accuratezza rispetto a formule di tipo generale: questa scelta consente di seguire piú fedelmente l'andamento qualitativo delle soluzioni. In [2] l'indagine é stata rivolta allo sviluppo di tecniche di fitting trigonometrico, esponenziale e misto, per la costruzione di metodi a coefficienti variabili afferenti alla classe (5) per la risoluzione di ODEs del secondo ordine (2) la cui soluzione presenta un andamento oscillante o un decadimento esponenziale. I metodi derivati sono stati analizzati in termine di ordine di convergenza e di stabilitá e sono stati testati su alcuni problemi test, al fine di confermare sperimentalmente i risultati teorici.

L'avanzamento della ricerca relativa all'integrazione numerica di ODEs del secondo ordine (2) necessita, allo stato attuale dell'arte, della derivazione di classi piú generali di metodi numerici che consentano un migliore equilibrio tra ordine di convergenza e stabilitá. Per quanto attiene all'analisi della stabilitá, si ritiene di particolare interesse la costruzione di metodi numerici che ereditino le proprietá di stabilitá dei migliori metodi classici esistenti in letteratura, i.e. i metodi Runge-Kutta-Nystrm di collocazione indiretta sui nodi di Gauss-Legendre: tale proprietá, in analogia con simili proprietá nell'ambito dei metodi generali lineari per equazioni del primo ordine, prende nome di *stabilitá di tipo Runge-Kutta-Nyström*, introdotta in [2], ove abbiamo anche fornito esempi di metodi che generalizzano (5) e godono di questa proprietá.

Per quanto attiene al trattamento numerico del problema (3), la cui risoluzione approssimata é stata approcciata per la prima volta in tempi recenti (fine anni Settanta), sussistono ancora molti problemi aperti. Partendo dalla classe dei metodi di collocazione a due passi introdotta da Conte, Jackiewicz e Paternoster nel 2009, abbiamo considerato la possibilitá di costruire formule efficienti, caratterizzate da matrici dei coefficienti di tipo triangolare basso o diagonale. I metodi ottenuti sono A-stabili, analogamente al caso delle ODEs (1).

BIBLIOGRAFIA

[1] D. Conte, R. D'Ambrosio, e Z. Jackiewicz, *Two-Step Runge–Kutta Methods with Quadratic Stability Functions*, J. Sci. Comput. **44 (2)**, (2010), 191-218.

[2] R. D'Ambrosio, *Highly stable multistage numerical methods for Functional Equations: Theory and Implementation Issues*, Tesi di dottorato in co-tutela, Universitá di Salerno - Arizona State University, (2010).

[3] R. D'Ambrosio, M. Ferro, Z. Jackiewicz e B. Paternoster, *Two-step almost collocation methods for ordinary differential equations*, Numer. Algorithms **53 (2-3)**, (2010), 195-217.

[4] R. D'Ambrosio e Z. Jackiewicz, *Construction and implementation of highly stable two-step continuous methods for stiff differential systems*, Math. Comput. Simul., doi: 10.1016/j.matcom.2011.01.005, (2011).

Dipartimento di Matematica e Informatica - Universitá degli Studi di Salerno
e-mail: rdambrosio@unisa.it
Dottorato di Ricerca in Matematica, Universitá di Salerno
(VIII ciclo - Nuova Serie) in co-tutela con l'Arizona State University
Direttori di Ricerca: prof. Beatrice Paternoster (Universitá di Salerno),
prof. Zdzislaw Jackiewicz (Arizona State University)