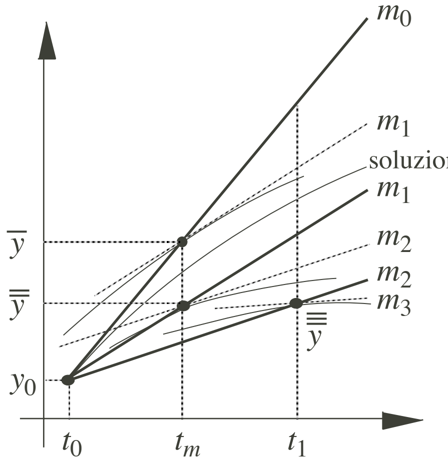
5.2.7 Il metodo di Runge-Kutta

Esistono diversi metodi detti di Runge-Kutta che fanno uso di varie medie delle pendenze in t_0, t_1 e in punti intermedi. Quello illustrato di seguito è il metodo classico di Runge-Kutta di ordine 4.

Si fa uso del punto medio tra i primi due punti della suddivisione $t_m = \dfrac{t_0 + t_1}{2}$.

Si inizia come nel metodo di Eulero con la retta passante per (t_0, y_0) di coefficiente angolare $m_0 = f(t_0, y_0)$. La retta è $y = y_0 + m_0(t - t_0)$.

Si trova il punto $\overline{y}$ in cui la retta ha ascissa t_m, ovvero $\overline{y} = y_0 + m_0(t_m - t_0)$.
Si calcola il valore di $f(t, y)$ nel punto $(t_m\,, \overline{y})$, quindi si pone $m_1 = f(t_m, \overline{y})$.



Si prosegue con la retta passante per (t_0, y_0) questa volta di coefficiente angolare m_1.
La retta è $y = y_0 + m_1(t - t_0)$.
Si trova il punto $\overline{\overline{y}}$ in cui la retta ha ascissa t_m ovvero $\overline{\overline{y}} = y_0 + m_1(t_m - t_0)$.
Si calcola il valore di $f(t, y)$ nel punto $(t_m\,, \overline{\overline{y}})$ quindi si pone $m_2 = f(t_m, \overline{\overline{y}})$.

Ancora una volta si considera la retta passante per (t_0, y_0), ma con coefficiente angolare m_2, cioè la retta $y = y_0 + m_2(t - t_0)$
Quest'ultima volta si trova il punto $\overline{\overline{\overline{y}}}$ in cui la retta ha ascissa t_1 (non t_m), ovvero $\overline{\overline{\overline{y}}} = y_0 + m_3(t_1 - t_0)$.
Si calcola il valore di $f(t, y)$ nel punto $(t_1\,, \overline{\overline{\overline{y}}})$ quindi si pone $m_3 = f(t_1, \overline{\overline{\overline{y}}})$. Si osservi che i numeri m_i sono le pendenze di quattro diverse soluzioni dell'equazione differenziale $y' = f(t, y)$ che passano per quattro punti vicini a t_0.

Si definisce come primo passo del metodo di Runge-Kutta la retta di equazione

$$y = y_0 + \frac{m_0 + 2m_1 + 2m_2 + m_3}{6}(t - t_0)$$

e il primo valore della soluzione approssimata dell'equazione differenziale sarà

$$y_1 = y_0 + \frac{m_0 + 2m_1 + 2m_2 + m_3}{6}(t_1 - t_0)$$

Dopodiché si calcolerà y_2 in t_2 allo stesso modo, usando il punto intermedio tra t_1 e t_2.

Per terminare osserviamo ancora che se il problema di Cauchy è semplicemente il problema integrale $\{y' = f(t) \quad ; \quad y(t_0) = y_0\}$, la soluzione fornita dal metodo di Runge-Kutta è il metodo di Cavalieri-Simpson per gli integrali definiti con la suddivisione $t_0, t_1, ...$, di cui Runge-Kutta classico può essere quindi considerato una generalizzazione.

5.3 Equazioni differenziali: alcuni problemi al contorno

5.3.1 Schemi alle differenze finite per funzioni di una variabile

Sia $f(x)$ una funzione definita in un intervallo $[x_0, x_n]$, di cui siano note $n + 1$ coppie di valori (x_i, y_i) con $i = 0, .., n$, ovvero si sappia che

$$f(x_0) = y_0 \quad ; \quad f(x_1) = y_1 \quad ; \quad \cdots \quad ; \quad f(x_n) = y_n$$

Vogliamo valutare (in modo approssimato) le derivate della funzione $f(x)$, che si suppone continua e con derivate continue. Per semplicità consideriamo solo il caso in cui gli x_i siano equidistanti, ovvero per ogni $i = 0, ..., n - 1$ si abbia $x_{i+1} = x_i + h$.

Per valutare la derivata prima nel generico punto x_i, usiamo lo sviluppo di Taylor con punto iniziale x_i $(i = 1, ..., n-1)$ che fornisce la funzione in $x_{i+1} = x_i + h$ e in $x_{i-1} = x_i - h$, ottenendo quindi

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)\,h + f''(x_i)\,\frac{h^2}{2} + f'''(x_i)\frac{h^3}{6} + f^{iv}(x_i)\frac{h^4}{24} + \cdots$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)\,h + f''(x_i)\,\frac{h^2}{2} - f'''(x_i)\frac{h^3}{6} + f^{iv}(x_i)\frac{h^4}{24} + \cdots$$

Sottraendo membro a membro otteniamo

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = f'(x_i)\,2h + f'''(x_i)\frac{h^3}{3} + \cdots$$

da cui

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - f'''(x_i)\frac{h^3}{6} + \cdots \qquad \text{e} \qquad f'(x_i) \simeq \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

Se quindi h è abbastanza piccolo, l'espressione data fornisce il valore della derivata prima calcolata *alle differenze finite centrate.*

Sommando invece i due sviluppi di Taylor sopra

$$f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) = 2f(x_i) + f''(x_i)\,h^2 + f^{iv}(x_i)\frac{h^4}{12} + \cdots$$

da cui

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} - f^{iv}(x_i)\frac{h^4}{12} + \cdots \qquad \text{e} \qquad f''(x_i) \simeq \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

che, ancora per h piccolo, fornisce il valore della derivata seconda calcolata *alle differenze finite centrate.*

Si tenga presente che se considerassimo la funzione quadratica passante per i tre punti (x_{i-1}, y_{i-1}), (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}), la sua derivata prima in x_i sarebbe esattamente $\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$ e la sua derivata seconda sarebbe $\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$

Le formule date consentono di stimare le derivate per tutti *i punti interni*, ovvero nei punti x_i con $i = 1, ..., n-1$, e si prestano a risolvere problemi con condizioni al contorno.

Gli schemi alle differenze discussi in precedenza valutano le derivate prime e seconde di una funzione di classe C^2 con un errore di ordine inferiore a h^2 e per questo sono esatte al secondo ordine. Attraverso procedure analoghe è possibile ottenere formule alle differenze di ordine superiore per la valutazione delle quali vengono coinvolti non solo x_{i-1} e x_{i+1}, ma altri punti precedenti e successivi.

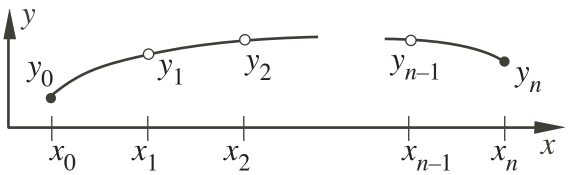
5.3.2 Equazioni al contorno: problema di Dirichlet in una dimensione

Il più semplice problema di Dirichlet del secondo ordine in una dimensione è quello di determinare una funzione $y(t)$ definita in un intervallo $[x_0, x_n]$ tale che

$$\begin{cases} y'' = f(x, y, y') \\ y(x_0) = y_0 \\ y(x_n) = y_n \end{cases}$$

Sotto opportune ipotesi di regolarità di f, il problema ha una soluzione. Senza addentrarci nei particolari teorici del problema, ci proponiamo di approssimarne la soluzione facendo uso degli schemi alle differenze finite.

Gli estremi dell'intervallo sono stati chiamati x_0, x_n perché, al fine di approssimare la soluzione, divideremo l'intervallo in n sottointervalli di ampiezza $h = \frac{x_n - x_0}{n}$ mediante i punti $x_0, x_1, ..., x_n$ con $x_{i+1} = x_i + h$ per $i = 0, ..., n-1$



Le incognite saranno $y_1, ..., y_{n-1}$, dato che il problema al contorno fornisce già y_0 e y_n.

Dalla discretizzazione alle differenze finite dell'equazione differenziale in corrispondenza del generico punto x_i si ottiene per $i = 1, ..., n-1$

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

Queste sono $n-1$ equazioni in $n-1$ incognite. La risoluzione di questo sistema è elementare quando la funzione $f(x, y, y')$ è di primo grado rispetto a y e a y' perché in tal caso ognuna delle equazioni è lineare nelle y_i e quindi il problema consiste nel risolvere un sistema lineare.
Esaminiamo le equazioni:

Nella prima (per $i = 1$) compaiono solo y_0 (che è dato), y_1 e y_2.
Nella seconda (per $i = 2$) compaiono solo y_1, y_2 e y_3.
......
Nella $n-2$-esima (per $i = n-2$) compaiono solo y_{n-3}, y_{n-2} e y_{n-1}.
Nella $n-1$-esima (per $i = n-1$) compaiono solo y_{n-2}, y_{n-1} e y_n (che è dato).

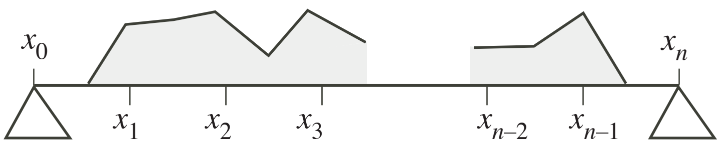
Quindi la matrice dei coefficienti del sistema è del tipo

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} \end{pmatrix}$$

Ovvero una matrice tridiagonale e spesso diagonalmente dominante.

5.3.3 Equazioni al contorno in una dimensione: il problema della trave

Come semplice esempio consideriamo il caso di una trave appoggiata sulla quale insiste una distribuzione di carico come mostrato in figura



Senza entrare nel dettaglio, il problema è descritto da una equazione differenziale del tipo:

$$y''(x) + c(x)y(x) = p(x)$$

in cui y rappresenta lo spostamento verticale della trave causato dalla presenza del carico, $c(x)$ descrive caratteristiche locali della trave (materiale, sezione, forma) e $p(x)$ è il valore locale della pressione del carico. Nell'esempio che segue si supporrà la trave appoggiata a quota 0 e che quindi la deformazione sia nulla sul primo e ultimo nodo, ovvero $y_0 = y_n = 0$. Supporremo nota la distribuzione del carico per ogni i e porremo $p_i = p(x_i)$ e $c_i = c(x_i)$ (c è costante se la trave, come spesso accade, è omogenea).
Dalla discretizzazione alle differenze finite dell'equazione differenziale in corrispondenza di ogni i, si ottiene:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + c_i y_i = p_i$$

Scriviamo le singole equazioni cominciando da quella per $i = 1$ e concludendo con $i = n-1$:

$$\begin{array}{cc} \dfrac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2} + c_1 y_1 = p_1 & (c_1 h^2 - 2)y_1 + y_2 = p_1 h^2 - y_0 \\ \dfrac{y_3 - 2y_2 + y_1}{h^2} + c_2 y_2 = p_2 & y_1 + (c_2 h^2 - 2)y_2 + y_3 = p_2 h^2 \\ \cdots & \cdots \\ \dfrac{y_{n-2} - 2y_{n-1} + y_n}{h^2} + c_{n-1} y_{n-1} = p_{n-1} & y_{n-2} + (c_{n-1} h^2 - 2)y_{n-1} = p_{n-1} h^2 - y_n \end{array}$$

La matrice completa del sistema lineare è pertanto

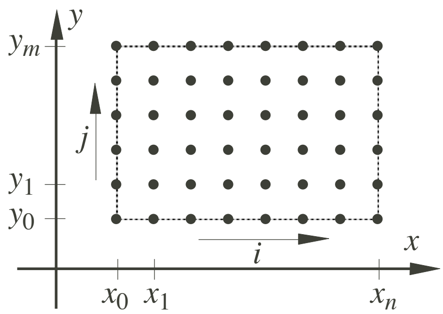
$$\left(\begin{array}{cccccccc|c}
c_1h^2-2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & p_1h^2-y_0 \\
1 & c_2h^2-2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & p_2h^2 \\
0 & 1 & c_3h^2-2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & p_3h^2 \\
\cdots & \cdots & & & \cdots & & & & \cdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & c_{n-2}h^2-2 & 1 & p_{n-2}h^2 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & c_{n-1}h^2-2 & p_{n-1}h^2-y_n
\end{array}\right)$$

La matrice è tridiagonale e può essere ridotta facilmente con l'algoritmo di Gauss (sono anche applicabili i metodi iterativi in quando diagonalmente dominante, anche se in questo caso non sempre sono convenienti)

5.3.4 Schemi alle differenze finite per funzioni di due variabili

Nel caso in cui la funzione dipenda da due o più variabili, le formule della sezione precedente possono essere estese alle derivate parziali.

Per semplicità consideriamo un dominio rettangolare $[x_0, x_n] \times [y_0, y_m]$ in cui sia definita una funzione $g(x, y)$. Per discretizzare il problema suddividiamo i lati del rettangolo in sottointervalli di passo costante: rispettivamente $\Delta x = x_{i+1} - x_i \quad \forall i$ e $\Delta y = y_{j+1} - y_j \quad \forall j$.
Quindi si hanno $(n+1)\times(m+1)$ punti ognuno dei quali è individuato da una coppia di indici (i, j) con $i = 0, ..., n$ e $j = 0, ..., m$.
Scriveremo $g(i, j)$ in luogo di $g(x_i, y_j)$.



Un tipico esempio è il problema di calcolare la funzione di più variabili che determina la distribuzione di temperatura nell'ambiente nel caso in cui la variabile in esame, la temperatura, sia nota al contorno cioè nei punti segnati in tratteggio.

È semplice la costruzione di schemi alle differenze finite per il calcolo di derivate parziali rispetto a x o y. In pratica si tratta di utilizzare le stesse formule riportate in precedenza per le funzioni di una sola variabile, per la funzione di due variabili $g(i, j)$, facendo variare solo l'indice relativo alla variabile rispetto alla quale si deve effettuare la derivata mantenendo fisso l'altro. Il passo verrà poi sostituito da Δx o Δy, a seconda della direzione rispetto alla quale si effettua la derivata.
Riportiamo di seguito le espressioni delle derivate parziali prime e seconde rispetto a x e y, valutate *nei punti interni* al dominio mediante gli schemi alle differenze centrate riportati nel paragrafo precedente. La quantità

$$\frac{\partial g}{\partial x}(i, j) = \frac{g(i+1, j) - g(i-1, j)}{2\Delta x}$$

può essere assunta come valore della derivata parziale rispetto alla x nel punto (i, j). Analogamente

$$\frac{\partial g}{\partial y}(i, j) = \frac{g(i, j+1) - g(i, j-1)}{2\Delta y}$$

può essere assunta come valore della derivata parziale rispetto alla y nello stesso punto (i, j).
Per le derivate seconde si ha:

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x^2}(i, j) = \frac{g(i+1, j) - 2g(i, j) + g(i-1, j)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial y^2}(i, j) = \frac{g(i, j+1) - 2g(i, j) + g(i, j-1)}{\Delta y^2}$$

Gli errori relativi, trattandosi di schemi al secondo ordine, saranno rispettivamente proporzionali a Δx^2 o Δy^2 per le derivate parziali rispetto a x o a y.

5.3.5 Equazioni di Laplace e Poisson e loro soluzione numerica

Molti problemi di fisica tecnica, fluidodinamica, strutture e teoria dei campi elettromagnetici sono descritti da una equazione differenziale del tipo

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = b(x, y)$$

nota come *equazione di Poisson.*
La funzione $f(x, y)$ rappresenta la distribuzione di una qualche variabile fisica, mentre la $b(x, y)$ rappresenta un termine sorgente. Un tipico caso è quello si voglia calcolare la temperatura $f(x, y)$ su una superficie consoscendo l'intensità $b(x, y)$ di una fonte di calore.
Se $b(x, y)$ è invece la densità di una forza verticale cui sono sottoposti tutti i punti di una membrana che si incurva fino ad assumere nella nuova posizione d'equilibrio la forma di una superficie $f(x, y)$, la funzione f è una soluzione dell'equazione di Poisson.

In molti problemi il termine sorgente è nullo in tutto il dominio e l'equazione assume la forma

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 0$$

nota come *equazione di Laplace.*
Sottolineiamo che le forme riportate non si limitano a problemi bidimensionali. Forme completamente analoghe si possono avere in tre dimensioni aggiungendo la derivata seconda rispetto alla terza variabile z.
Le equazioni di Poisson o Laplace hanno soluzione unica in un dominio chiuso e limitato con opportune ipotesi su $b(x, y)$ e opportune condizioni al contorno. Le condizioni al contorno possono essere di due tipi: in alcuni casi viene assegnata la stessa funzione f nel contorno del dominio, mentre in altri casi viene assegnata la sua derivata nella direzione normale alla curva che delimita il dominio. Nel primo caso si parla di condizioni di Dirichlet nel secondo caso si parla di condizioni di Neumann.

Si hanno condizioni di Dirichlet quando ad esempio si conosce il valore della temperatura su tutto il contorno. Si hanno condizioni di Neumann quando sul contorno è posizionata una sorgente di calore o, nel caso della membrana, quando il bordo della membrana è fissato a una curva data Γ e sul bordo agisce una forza di densità lineare sempre in direzione verticale.

Come semplice esempio presentiamo la soluzione numerica dell'equazione di Poisson in un dominio rettangolare con condizioni di Dirichlet al contorno.
Ci limitiamo al caso in cui il problema sia quello di determinare la f in un dominio piano rettangolare, come quello descritto al paragrafo precedente di cui conserviamo le notazioni.
I lati vengono discretizzati rispettivamente con n e m sottointervalli e supporremo, per semplicità anche che $\Delta x = \Delta y = h$.
Dato che la funzione f è nota al contorno, sono noti i valori $f(0, j)$, $f(n, j)$ per ogni j e i valori $f(i, 0)$, $f(i, m)$ per ogni i.
Le incognite sono $f(i, j)$ per $i = 1, ..., n-1$ e $j = 1, ..., m-1$. Per determinarle è necessario scrivere l'equazione di Poisson in forma discreta in ognuno di questi punti (i, j).
Le formule del paragrafo precedente sono

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(i, j) = \frac{f(i+1, j) - 2f(i, j) + f(i-1, j)}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(i, j) = \frac{f(i, j+1) - 2f(i, j) + f(i, j-1)}{h^2}$$

Sostituendo queste due espressioni delle derivate seconde nell'equazione di Poisson:

$$f(i, j-1) + f(i-1, j) - 4f(i, j) + f(i+1, j) + f(i, j+1) = h^2 \cdot b(i, j)$$

Scriviamo questa espressione per tutte le coppie di indici i, j con $i = 1, ..., n-1$, $j = 1, ..., m-1$ e teniamo conto del fatto che i valori sui punti del contorno sono noti.

Per esempio per $i, j = 1$

$$f(1,0) + f(0,1) - 4f(1,1) + f(2,1) + f(1,2) = h^2 b(1,1)$$

e poiché $f(1,0)$ e $f(0,1)$ sono noti, si ha

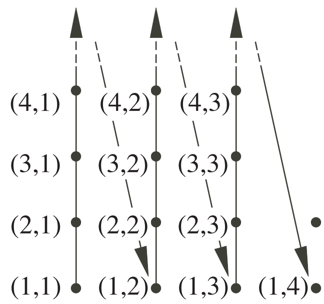
$$-4f(1,1) + f(2,1) + f(1,2) = -f(1,0) - f(0,1) + h^2 b(1,1)$$

In modo simile, per il punto $(2,1)$ si ha

$$f(1,1) - 4f(2,1) + f(3,1) + f(2,2) = -f(2,0) + h^2 b(2,1)$$

e così via. Nei punti con $i = 2, ..., n-2$, $j = 2, ..., m-2$, nessuno dei punti che compaiono nella somma appartiene al contorno e quindi nell'equazione compaiono 5 incognite. Per esempio, nel punto $(3,2)$ la forma è

$$f(3,1) + f(2,2) - 4f(3,2) + f(4,2) + f(3,3) = h^2 b(3,2)$$



In conclusione abbiamo $(n-1) \cdot (m-1)$ equazioni lineari in $(n-1) \cdot (m-1)$ incognite.
Occorre ordinare in qualche modo le incognite $f(i,j)$.
È conveniente usare l'ordinamento raffigurato a lato, per cui le incognite sono, nell'ordine

$$f(1,1), f(2,1), f(3,1), ... , f(1,2), f(2,2), ... , f(n-1, m-1)$$

In questo modo le equazioni formano un sistema lineare quadrato $Ax = b$ la cui matrice dei coefficienti è di formato $(n-1) \cdot (m-1)$. La matrice completa è

$$\left(\begin{array}{ccccccccccccc|l}
-4 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & h^2b(1,1) - f(1,0) - f(0,1) \\
1 & -4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & h^2b(2,1) - f(2,0) \\
0 & 1 & -4 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & h^2b(3,1) - f(3,0) \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\
1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -4 & 1 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & h^2b(1,2) - f(0,2) \\
0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -4 & 1 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & h^2b(2,2) \\
0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & h^2b(3,2) \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & -4 & 1 & 0 & \cdots & h^2b(1,3) - f(0,3) \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 1 & -4 & 1 & \cdots & h^2b(2,3) \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 1 & -4 & \cdots & h^2b(3,3) \\
 & & & & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & & & & \\
 & & & & & & \ddots & & & & & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & -4 & 1 & 0 & h^2b(\ ) - f(m-3,n) \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 1 & -4 & 1 & h^2b(\ ) - f(m-2,n) \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 1 & -4 & h^2b(\ ) - {\scriptstyle f(m-1,n) - f(m,n-1)}
\end{array}\right)$$

La matrice dei coefficienti è tridiagonale a blocchi ed è così strutturata

$$A = \begin{pmatrix}
\boxed{B} & \boxed{I} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\
\boxed{I} & \boxed{B} & \boxed{I} & 0 & 0 & \cdots \\
0 & \boxed{I} & \boxed{B} & \boxed{I} & 0 & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots
\end{pmatrix}$$

dove le $n-1$ matrici B sono tridiagonali di ordine $(m-1) \times (m-1)$ e la matrice I è la matrice identica di ordine $(m-1)$.
Inoltre la matrice è diagonalmente dominante (seppur debolmente) e questo consente l'impiego di metodi iterativi, indispensabili per la risolvere sistemi con un numero molto elevato di incognite.