Universitá degli Studi di Salerno

DIPARTIMENTO DI MATEMATICA
Scuola Dottorale in Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Ciclo XIII

Multi-Value Numerical Modeling for Special Differential Problems

Author:
Giuseppe De Martino

Principal Supervisor:
Prof. Beatrice Paternoster

Associate Supervisor:
Dr. Raffaele D'Ambrosio

PhD Director:
Prof. Patrizia Longobardi

A thesis presented for the degree of
Doctor of Philosophy

Abstract

Il soggetto di questa tesi è l'analisi e lo sviluppo di nuovi metodi numerici per Equazioni Differenziali Ordinarie (ODE). Questi studi sono motivatidal ruolo fondamentale svolto dalle ODE in matematica applicata e nelle scienze applicate in generale. In particolare, come è noto, le ODE sono usate con successo per descrivere fenomeni in evoluzione nel tempo, ma spesso è molto difficile o addirittura impossibile trovare una soluzione in forma chiusa, poiché non è mai stata trovata una formula generale per la soluzione esatta, eccetto alcuni casi particolari. I casi più importanti di applicazioni sono i sistemi di equazioni differenziali, la cui soluzione esatta è ancora più difficile da trovare; il ruolo svolto dagli integratori numerici per equazioni differenziali è dunque fondamentale per molti scienziati applicati. É probabilmente impossibile contare tutti i lavori scientifici che hanno fatto uso di integratori numerici e questo è sufficiente per riconoscerne l'importanza nel progresso della scienza moderna. Inoltre, nella ricerca moderna, si costruiscono modelli sempre più complicati, quindi è fondamentale continuare a migliorare l'efficienza e l'accuratezza degli integratori numerici.

Il primo, più semplice e più famoso integratore numerico è stato introdotto da Eulero nel 1768 ed è ancora oggi utilizzato molto spesso in molte situazioni, soprattutto in contesti educativi per la sua immediatezza, ma anche nella pratica per l'integrazione sistemi semplici di ODE. Da allora, molti matematici e scienziati applicati hanno dedicato il loro tempo alla ricerca di metodi nuovi e più efficienti (in termini di precisione e costo computazionale). Lo sviluppo di integratori numerici ha seguito sia gli interessi scientifici sia il progresso tecnologico dei secoli durante i quali sono stati sviluppati. Nel XIX secolo, quando la maggior parte dei calcoli erano eseguiti a mano o al massimo con calcolatrici meccaniche, Adams e Bashfort introdusserp i primi metodi lineari multistep (1855), mentre i primi metodi Runge-Kutta apparvero (1895-1905) nelle prime opere di Carl Runge e Martin Kutta. Sia i metodi multistep che i Runge-Kutta hanno generato un'incredibile quantità di ricerca e di grandi risultati, fornendo una grande comprensione di essi, il che li rende molto affidabili nell'integrazione numerica di un gran numero di problemi pratici.

Solo con l'avvento dei primi computer elettronici, il costo computazionale ha iniziato ad essere un problema meno cruciale e gli sforzi di ricerca hanno iniziato a muoversi verso lo sviluppo di metodi problem-oriented. Probabilmente è possibile dire che la prima classe di problemi che richiedono un trattamento numerico adhoc fu quello dei problemi stiff. Questi problemi richiedono integratori numerici altamente stabili o, nel peggiore dei casi, una riformulazione del problema stesso.

Contributi cruciali alla teoria degli integratori numerici per equazioni differenziali sono stati dati nel XX secolo da J.C. Butcher, che ha sviluppato una teoria dell'ordine per i metodi Runge-Kutta basata sugli alberi e ha introdotto la famiglia dei Metodi Generali Lineari (GLM) insieme a K. Burrage, che unifica tutte le famiglie conosciute di metodi per ODE del primo ordine sotto una sola formulazione. I GLM sono metodi a più stadi e a più valori che uniscono le caratteristiche dei Runge-Kutta e dei Lineari Multistep.

In tempi recenti, i ricercatori hanno iniziato a sviluppare nuovi metodi progettati per la soluzione efficiente di particolari problemi, cioè tenendo conto della espressione e delle proprietà del problema stesso e con attenzione alla conservazione delle

strutture intrinseche delle soluzioni nella approssimazione numerica . Questo è ad esempio il caso dei metodi exponential fitting, introdotti da L. Gr. Ixaru, che sono progettati specificatamente per problemi oscillatori o problemi periodici. Un altro esempio importante è quello degli integratori geometrici, che sono anche uno dei principali temi della presente tesi. L'idea principale dietro tali tecniche di integrazione è quella di preservare le proprietà geometriche della soluzione di un sistema ODE, come la presenza di invarianti o l'appartenenza della soluzione a una particolare superficie. Questo è ad esempio il caso di sistemi meccanici conservativi o di sistemi vincolati nello spazio. É ovvio che la soluzione numerica di tali problemi deve condividere queste proprietà di quella esatta, o la sua utilità pratica sarebbe poca e anche il suo significato sarebbe perso. Possiamo pensare ad esempio al movimento dei pianeti del Sistema Solare, che si muovono su traiettorie chiuse (ellissi): abbiamo bisogno di un integratore numerico che fornisca traiettorie chiuse, o l'integrazione del moto sarebbe del tutto inutile.

Il risultato principale ottenuto in questa tesi è la costruzione di quattro metodi quasi-conservativi appartenenti alla famiglia di metodi generali lineari. In particolare, due di questi metodi si sono rivelati molto efficaci anche rispetto ai metodi classici sia in termini di costo computazionale che di precisione. Abbiamo studiato anche alcuni aspetti teorici di queste tecniche, evidenziando la presenza di componenti parassite nella approssimazione numerica e trovato una condizione per il loro limitatezza. Le componenti parassite sorgono nell'applicazione di metodi generali lineari per loro natura multivalue e non possono essere rimosse completamente, ma solo controllate, al fine di evitare di distruggere la precisione generale dello schema numerico. Abbiamo trovato una condizione algebrica con la quale le componenti parassite danno un contributo limitato alla soluzione numerica e questo è abbastanza piccolo da evitare la perturbazione delle proprietà geometriche che ci proponiamo di preservare. Abbiamo anche affrontato la questione di che legame esiste tra la precisione di un sistema numerico e la sua capacità di preservare invarianti geometrici, fornendo un teorema per quanto riguarda la famiglia dei metodi B-serie non parassiti.

Un'altra importante classe di problemi che merita un trattamento speciale è che famiglia delle ODE autonome del secondo ordine. Per questi problemi, R. D'Ambrosio, E. Esposito e B. Paternoster hanno introdotto una famiglia generale di metodi numerici estendono le idee dei GLM. Questa nuova famiglia è chiamata dei Metodi Generali Lineari di Nyström (GLN) . Il contributo originale a questa teoria che viene presentato in questa tesi è la formulazione di una teoria algebrica dell'ordine basata su un particolare insieme di alberi bicolore. Poiché i GLN sono metodi multivalore, delle approssimazioni dei valori iniziali devono essere fornite dall'utente. Ciò può essere evitato mediante l'uso del vettore di Nordsieck, cioè richiedendo che il nostro metodo approssimi la soluzione e le sue derivate, le cui approssimazioni iniziali possono essere calcolate esattamente dal valore iniziale fornito dal problema. Abbiamo studiato in profondità questa importante sottoclasse di integratori numerici, sfruttando l'espressione delle condizioni d'ordine e dimostrando un teorema in cui è stata trovata l'espressione esplicita dell'errore locale di troncamento.