# 4 Brevi lezioni di Python

## Francesco Zeno Costanzo

(Do you remember the) 21(st night of) September 2024



I think, it's time we blow this scene. Get everybody and the stuff together. Ok three, two, one, let's jam. Seatbelts, Tank! (1999)

## Indice

1	Introduzione	3
2	Equazione al laplaciano in 2 dimensioni	3
3	Equazione delle corde musicali	10

#### 1 Introduzione

Uno dei problemi più frequenti che si pone durante la scrittura di programmi, è la questione performance: quando ci si approccia ad un problema che vogliamo risolvere non solo bisogna tenere bene a mente le limitazioni dell'hardware di cui disponiamo, ma anche di implementare un algoritmo che abbia un tempo di esecuzione il più piccolo possibile. Nella maggior parte dei casi è sufficiente implementare un algoritmo più efficiente per migliorare le prestazioni (per fare un esempio, per migliorare le performance nel calcolo della sequenza di Fibonacci è consigliato procedere con un algoritmo iterativo piuttosto che uno ricorsivo). Tuttavia, in alcuni casi, non è sufficiente: questo si rivela particolarmente vero nel caso in cui abbiamo una grande mole di dati e su ognuno di questi dobbiamo andare ad effettuare delle operazioni matematiche/logiche, che solitamente è un processo molto lento in termini di esecuzione. Un esempio da fisici può essere la simulazione numerica delle equazioni differenziali, dove dobbiamo andare a discretizzare lo spazio e il tempo ed effettuare su ognuno delle cellette una serie di operazioni matematiche.

Il motivo del lungo tempo di esecuzione nell'esempio riportato non è necessariamente da imputare ad un pessimo algoritmo: in realtà, per come sono nati e sono stati strutturati dei linguaggi come C++ e Python, il motivo deriva dal fatto che il microprocessore che esegue il programma itera singolarmente cella dopo cella. Quindi, nel caso di un gran numero di cellette, il tempo di esecuzioni ne risente particolarmente.

Il motivo è puramente storico: i computer, inizialmente, erano per lo più monoprocessore e, conseguentemente, i linguaggi di programmazione sono stati strutturati in modo tale da eseguire le operazioni in modo sequenziale. In Python tale blocco è dovuto alla presenza del cosiddetto GIL (global interpreter lock) che impedisce l'esecuzione di più thread (che per non scendere nel tecnico si può pensare come un processore) in parallelo<sup>1</sup>. Ad oggi, invece, i computer sono multiprocessore, ma la struttura vanilla dei linguaggi non è stata cambiata. E' possibile, però, attingere al vero potere delle risorse dei multiprocessori, e non solo, utilizzando delle librerie. Noi, tuttavia, vogliamo attaccare il problema della parallelizzazione introducendo uno strumento che sta prendendo sempre più piede in Python: i cosiddetti compilatori jit (just-in-time). Questi compilatori non permettono solo di parallelizzare il codice (siccome riescono a disabilitare il GIL) ma anche di ottimizzare il codice. Questi compilatori infatti, a differenza dell'interprete classico di Python, vanno a compilare, all'inizio dell'esecuzione del programma, le parti di codice che vengono "marcate" come da ottimizzare in un formato più vicino al linguaggio macchina (da qui il nome di compilatore just-in-time). Questo permette di migliorare le performance del codice per i seguenti motivi

- 1. il codice viene compilato in un linguaggio ottimizzato;
- 2. il codice compilato viene riutilizzato. Infatti, se indichiamo una funzione come da compilare, il compilatore, per ogni chiamata di quella funzione, inserirà un puntatore che punta all'indirizzo di memoria in cui sono contenute le istruzioni compilate della funzione;
- 3. (motivo tecnico): per come sono implementati questi compilatori, utilizzano delle politiche di compilazione che sono mirate per lo specifico processore della macchina su cui il codice viene eseguito. Questo consente su molti microprocessori, per esempio, di immagazzinare le istruzioni ottimizzate dalla compilazione direttamente in registri del microprocessore (detta cache), diminuendo così il tempo di lettura delle istruzioni e aumentando così le prestazioni.

La libreria che consente di effettuare tutte queste belle cose che abbiamo detto è la libreria numba. La documentazione di numba è molto vasta, quindi consiglio di leggerla per approfondire l'argomento, tuttavia spero che i seguenti esempi proposti siano comunque esaustivi per capire il funzionamento.

### 2 Equazione al laplaciano in 2 dimensioni

Uno dei problemi più complicati da risolvere in maniera analitica è il problema fondamentale dell'elettrostatica: l'equazione di Laplace. Il motivo per cui è abbastanza complicata è che spesso le condizioni al bordo di questa equazione fanno in modo che la soluzione non sia esprimibile sotto forma di serie e/o integrale. Tuttavia nella maggior parte dei casi è possibile dare una soluzione approssimata numericamente. Tale equazione è definita come

$$\nabla^2 V = 0,$$

e, ringraziando i nostri amici matematici, sappiamo che esiste sempre una soluzione a tale equazione. Mentre dal corso di Fisica 2 sappiamo che la soluzione è unica (permettendomi una perla del professore La Rocca, ai Fisici interessa solo l'unicità della soluzione: per verificare l'esistenza di una soluzione basta andare in laboratorio e verificare se effettivamente esiste). Possiamo procedere, come al solito, andando a discretizzare lo spazio e

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>in realtà il GIL non impedisce completamente la parallelizzazione del codice, perché non impedisce la creazione di più processi tuttavia lato performance è più lenta rispetto alla parallelizzazione dei thread

approssimando il laplaciano con le derivate discrete, che assume la seguente forma

$$\frac{u(x+ih_x,y)-2u(x,y)+u(x-ih_x,y)}{h_x^2} + \frac{u(x,y+ih_y)-2u(x,y)+u(x,y-ih_y)}{h_y^2} = 0,$$

dove  $h_x$  e  $h_y$  sono rispettivamente il passo fra le ascisse e il passo fra le ordinate. Esplicitando per u(x,y), risulta che

 $u(x,y) = \frac{1}{4}(u(x+ih_x,y) + u(x-ih_x,y) + u(x,y+ih_y) - u(x,y-ih_y)). \tag{1}$ 

In questo caso, siccome il laplaciano è un operatore che si comporta "abbastanza" bene, la nostra soluzione è sicuramente stabile per h << 1. La questione della stabilità non è banale e per questo si rimanda a delle trattazioni più accurate dell'argomento. Utilizzando numba, possiamo mettere delle condizioni al contorno più impegnative, ovvero possiamo mettere delle condizioni al bordo dove la nostra funzione è una sovrapposizioni di seni, coseni ed esponenziali, le quali sono decisamente più computazionalmente impattanti sul tempo di esecuzioni rispetto ai casi "soliti" che si vedono negli esercizi dove, per esempio, abbiamo un conduttore che è a potenziale costante. Prima di procedere con l'esempio, avevo "promesso" nelle scorse lezioni che ci saremmo soffermati un po' meglio per capirne come mai "funziona" (matematicamente) il metodo delle differenze finite (ovvero il procedimento adottato in cui discretizziamo lo spazio e approssimiamo le derivate a differenze), quindi cerchiamo di formalizzare questo processo un pochino: considerando l'operatore  $L: L^2((0,1)^2) \to L^2((0,1)^2)$  definito come

$$u \stackrel{L}{\mapsto} \nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

e indicando con  $\bar{\omega}_h$  la rete di punti che approssima il nostro spazio continuo  $(0,1)^2$ , osserviamo che preso un punto  $(x^*,y^*)$  interno alla griglia, allora si ha che la nostra soluzione, se sufficientemente regolare, possiamo affermare che

$$u(x^* \pm h, y^*) = u(x^*, y^*) \pm \partial_x u(x^*, y^*)h + o(h).$$

Chiaramente la relazione qua sopra è ben posta se abbiamo che  $u \in C^2$ . Osserviamo che approssimando l'operatore differenziale D :  $L^2((0,1)) \to L^2((0,1))$  tale che  $u \stackrel{\mathrm{D}}{\mapsto} \frac{d}{dx} u$  con  $L_{\pm}u(x^*,y^*) = \frac{u(x^* \pm ih_x,y^* \pm ih_y) - u(x^*,y^*)}{|\vec{h}|}$  abbiamo che

$$L_{\pm}u(x^*, y^*) - u'(x^*, y^*) = O(h).$$

Se  $\max_{\bar{\omega}_h} |L_{\pm}u(x^*, y^*) - u'(x^*, y^*)| \to 0$  per  $h \to 0$  deduciamo, com'era lecito aspettarsi, che per  $h \to 0$  si ha che  $L_{\pm}v \to v'$ .

Per approssimare la derivata qua abbiamo lavorato con un campione di due punti, ovvero abbiamo utilizzato solamente il punto successivo (nel caso di  $L_-$  abbiamo usato il punto precedente) e il punto nella nostra rete per approssimare la derivata. Nulla ci vieta di passare a un campione di tre punti: questo può essere particolarmente comodo nei sistemi meccanici per togliersi la dipendenza esplicita della velocità nel calcolo della posizione "aggiornata" di un punto materiale (integrazione di Verlet). Tuttavia è sconsigliato prendere un campione di troppi punti poiché rischieremmo di aumentare di troppo il numero di calcoli per delle correzioni misere.

Per le derivate seconde la cosa è leggermente più tricky, siccome per approssimare la derivata alla solita maniera è necessario (e questo si vede banalmente dai conti) che la nostra soluzione sia appartenente a  $C^4$ . Inoltre non è possibile approssimare la derivata seconda con un campione di due punti, quindi dobbiamo avere un campione almeno a tre punti: si ha dunque

$$u(x^* \pm ih, y^*) = u(x^*, y^*) \pm \partial_x u(x^*, y^*)h + \frac{h^2}{2}\partial_{xx}^2 u(x^*, y^*) \pm \frac{h^3}{3}\partial_{xxx}^3 u^{(3)}(x^*, y^*) + \frac{h^4}{24}\partial_{xxxx}^4 u(x^*, y^*) + o(h^4).$$

Si ricava che, posto  $\delta u(x^*,y^*) = \frac{u(x^*+ih,y^*+ih)-2u(x^*,y^*)+u(x^*-ih,y^*-ih)}{h}$ , abbiamo che

$$\delta u(x^*, y^*) - \partial_{xx}^2 u(x^*, y^*) = \frac{h^2}{12} \partial_{xxxx}^4 u + o(h).$$

Dunque per  $h \to 0$  questo errore diventa trascurabile.

Procediamo adesso a scrivere il codice:

```
import numpy as np
import numba
import matplotlib.pyplot as plt

"""

Immaginiamo di essere in una scatola (-1, 1)^2 e impostiamo le condizioni al bordo per la
nostra scatola
```

```
0.00
          edge = np.linspace(-1, 1, 300)
 8
 9
          bordo_supy = np.cos(np.pi * edge / 2)
          bord_infy = edge**4
10
          bordo_supx = 1/(np.e**(-1) - np.e) * (np.exp(edge)-np.e)
          bordo_infx = 0.5 * (edge**2 - edge)
12
14
          # Creiamo una meshgrid
15
         xv, yv = np.meshgrid(edge, edge)
16
         La funzione meshgrid crea un array dove tutte le possibili combinazioni dei vettori edge,
17
          vengono scissi in due matrici dove (xv[i, j], yv[i, j]) rappresenta un punto della griglia
18
19
20
21
22
           \verb"Onumba.jit("f8[:,:](f8[:,:], i8)", nopython=True, nogil=True) \\
23
          def sol_potential(potential, n_iter):
24
25
              Compute the solution of the Laplace equation through finite difference method
26
27
              Params:
28
29
30
                  potential: 2darray
                     matrix of zeros that will be filled with the values of the potential in each point of
31
              the grid
                  n inter: int
32
                      number of iterations for each point of the grid
33
34
35
              Return:
36
                  potential: 2darray
37
                     matrix cointaing the values of the potential evaluated in the each point of the grid
38
39
40
              length = len(potential[0])
              for n in range(n_iter):
41
42
                  for i in range(1, length-1):
                      for j in range(1, length-1):
43
                           potential[j][i] = \frac{1}{4} * (potential[j+1][i] + potential[j-1][i] + potential[j][i+1] + potential[j][i+1] + potential[j][i+1] + potential[j-1][i] + potential[j-1][
44
                potential[j][i-1])
              return potential
45
46
         # Settiamo le condizioni al bordo
47
         potenziale = np.zeros((300, 300))
48
         potenziale[0, :] = bordo_infy
49
         potenziale[-1, :] = bordo_supy
50
         potenziale[:, 0] = bordo_infx
51
         potenziale[:, -1] = bordo_supx
53
         potenziale = solve_potential(potenziale, n_iter=10000)
54
55
          # Grafico potenziale
         fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8,6))
56
          clr_plot = ax.contourf(xv, yv, potential, 30)
57
         ax.set_xlabel('x/a', fontsize=20)
58
          ax.set_ylabel('y/a', fontsize=20)
59
         fig.colorbar(clr_plot, label='$V/V_0$', fontsize=20)
         ax.set_title('Potential in square', fontsize=20)
61
62
          plt.show()
```

Osserviamo come funziona la libreria numba: si nota, innanzitutto, che il wrapper numba.jit viene chiamato immediatamente prima della della funzione e osserviamo quali sono gli argomenti che gli sono stati passati:

- il primo è la signature della funzione, in cui sono indicati i tipi di dati che la funzione restituisce e prende in ingresso. Nel nostro caso noi vogliamo che la funzione restituisca un array 2-dimensionale e prenda in ingresso un array 2-dimensionale e un intero: si osservi che questi vanno indicati riportando prima i tipi dei dati restituiti e poi quelli che prende in input, riportando questi ultimi fra parentesi e separandoli fra virgole. Nell'esempio qua sopra, sono riportati tramite la forma abbreviata che numba consente di utilizzare: in questo caso f8 sta per float64, dunque f8[:, :] rappresenta un array 2-dimensionale le cui entrate sono float64. Similmente, i8 sta per int64;
- il parametro nopython=True, il quale comunica a numba che noi vorremmo (se riesce) compilare la funzione per aumentare le performance. Il motivo di tale nome deriva dal fatto che la funzione compilata sarà compilata in C, quindi non sarà più il formato bytecode che l'interprete legge ed esegue
- il parametro nogil che, da quanto detto prima, è abbastanza chiaro che cosa faccia.

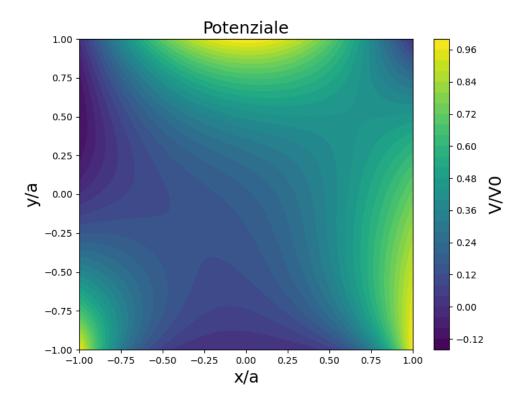


Figura 1: Soluzione numerica del potenziale nel quadrato. Il valore del potenziale è più alto per colori più chiari e più basso per colori più scuri

E' interessante, chiaramente, vedere se è migliorato e quanto è migliorato il tempo di esecuzione con numba: per fare ciò è sufficiente utilizzare la libreria time, limitandoci ad un numero di iterazioni pari a 1000.

```
numba_pot = np.copy(potenziale)
                start = time.time()
               numba_pot = sol_potential(potenziale, n_iter=1000)
  3
                end = time.time()
                print(f"La soluzione con numba e': {end-start}")
  6
                # Funzione risolvente senza il wrapper di numba
  8
                def no_numbed_sol_potential(potential, n_iter):
  9
 10
                      Compute the solution of the potential but without numba
12
13
                      Params:
14
15
                             same as sol_potential
16
17
                      Return:
18
                             same as sol_potential
19
20
21
                      length = len(potential[0])
22
23
                       for n in range(n_iter):
                             for i in range(1, length-1):
24
25
                                    for j in range(1, length-1):
                                           potential[j][i] = \frac{1}{4} * (potential[j+1][i] + potential[j-1][i] + potential[j][i+1] + potential[j][i+1] + potential[j][i+1] + potential[j-1][i] + potential[j-1][
26
                         potential[j][i-1])
27
                      return potential
28
29
30
                start = time.time()
                potenziale_notnumb = no_numbed_sol_potential(potenziale, n_iter=1000)
31
                end = time.time()
33
34
35
                print(f"La soluzione non numbata e': {end-start}")
                [Output]
36
```

```
La soluzione con numba e': 0.593531608581543

La soluzione non numbata e': 181.39348196983337
```

Risulta quindi che numba è circa 307 volte più veloce! Pazzesco, no?

Le magie però non sono ancora finite: potremmo anche pensare di inserire delle condizioni al contorno ancora più wild e inserire, per esempio, un blocco di potenziale all'interno della nostra scatola in cui il potenziale è fisso: per fare ciò supponiamo che in tale regione a potenziale costante si ha che V=1, dunque vi lascio al codice

```
def blocco_potenziale(x, y):
 1
 2
             Function that checks if (x, y) is a point of the grid which belongs to the area of
 3
             constant potential
 4
            return np.select([(x>0.3)*(x<0.6)*(y > 0.3)*(y<0.6), (x <= 0.3)* (x>= 0.6)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)*(y<=0.3)
 5
            >=0.6)], [1., 0])
 6
         # Graphical settings for the graph of the block
         plt.figure(figsize=(5,4))
         plt.contourf(xv, yv, blocco_potenziale(xv, yv))
 9
10
         plt.colorbar()
11
         \# Creation of a grid to easily evaluate if a point belongs to the block
12
         fixed = blocco_potenziale(xv, yv)
13
         _bool = fixed!= 0
14
16
         @numba.jit("f8[:, :](f8[:, :], b1[:, :], i8)",nopython=True, nogil=True)
17
         def solve_potential_fixed(potential, fixed_bool, n_iter):
18
19
             Compute the solution of the Laplace equation through finite difference method
20
21
             Params:
22
23
24
                 potential: 2darray
                   matrix of zeros that will be filled with the values of the potential in each point of
25
26
                fixed_bool: 2darray
                    matrix of boolean values to identify the points that are at constant potential
27
28
                 n_inter: int
                    number of iterations for each point of the grid
29
30
31
             Return:
32
                 potential: 2darray
33
                   matrix cointaing the values of the potential evaluated in the each point of the grid
34
35
             length = len(potential[0])
36
                 for n in range(n_iter):
37
                         for i in range(1, length-1):
38
                                 for j in range(1, length-1):
39
                                          if not(fixed_bool[j][i]):
40
41
                                                 potential[i][j] = 1/4 * (potential[i+1][j] + potential[i-1][j] +
            potential[i][j+1] + potential[i][j-1])
42
             return potential
43
         # Boundary conditions
44
45
         potenziale = np.zeros((300, 300))
         potenziale[0, :] = bordo_infy
46
        potenziale[-1, :] = bordo_supy
47
        potenziale[:, 0] = bordo_infx
48
         potenziale[:, -1] = bordo_supx
49
         potentiale[_bool] = fixed[_bool]
50
51
         # Compute the solution
52
         potenziale = solve_potential_fixed(potenziale, _bool, n_iter=10000)
53
55
         # Graphical settings of the graph of the potential
         fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8,6))
56
         clr_plot = ax.contourf(xv, yv, potential, 30)
57
         ax.set_xlabel('x/a')
58
59
         ax.set_ylabel('y/a')
        fig.colorbar(clr_plot, label='$V/V_0$')
60
         ax.set_title('Potential in square')
61
       plt.show()
```

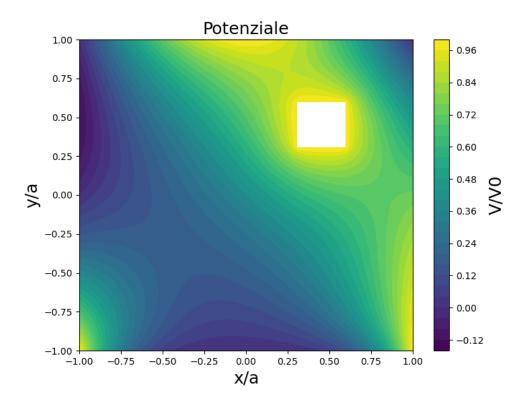


Figura 2: Soluzione del nostro potenziale con blocco a potenziale fissato.

Un problema che si pone negli esempi qua sopra proposti, tuttavia, è il fatto che il numero 10000 e tutti gli altri usati per valutare il tempo di esecuzione sono dei numeri arbitrari, conseguentemente vorremmo aggiungere un criterio con cui fermare la computazione della soluzione quando queste diventano abbastanza "vicine" fra un'iterazione e quella successiva. Chiaramente la "vicinanza" fra due soluzioni è una nozione ben posta solo definendo una norma: nel nostro esempio, possiamo pensare di prendere come norma la media integrale, ovvero l'integrale sull'area del potentiale che approssimiamo alla versione discretizzata tramite sommatoria

$$||\varphi|| = \frac{1}{m_2((-1,1)^2)} \int_{(-1,1)^2} |\varphi(x,y)| dx dy \approx \frac{1}{(N_x N_y)} \sum_{i,j}^N |\varphi_i^j|,$$

dove  $\varphi_i^j = \varphi(x_i, y_j)$  con  $(x_i, y_i)$  appartenenti alla griglia che discrettizza lo spazio. In questa maniera, possiamo passare alla funzione solve\_potential un parametro  $\tau$  che ferma l'iterazione quando

$$||\varphi^{(k+1)} - \varphi^{(k)}|| \approx \sum_{i,j}^{N} |\varphi_i^{j,(k+1)} - \varphi_i^{j,(k)}| < \tau,$$

dove  $\varphi_i^{j,(k)}$  è la soluzione numerica valutata nel punto  $(x_i, y_i)$  della griglia all'iterazione k-esima. Piuttosto che valutare se  $||\varphi^{(k+1)} - \varphi^{(k)}|| < \tau$ , nell'algoritmo andremo a valutare se  $|||\varphi^{(k+1)}|| - ||\varphi^{(k)}||| < \tau$ , che chiaramente è una condizione più debole rispetto alla precedente siccome

$$|||\varphi^{(k+1)}|| - ||\varphi^{(k)}||| \le ||\varphi^{(k+1)} - \varphi^{(k)}||,$$

ma per  $\tau$  sufficientemente piccoli, ci si aspetta che la differenza fra i due termini sia "piccola" perché fra due iterazioni successive la distanza fra gli elementi diventa sempre più piccoli (siccome convergono verso la soluzione esatta). Fare quest'ultima operazione snellisce sensibilmente il programma, siccome ci permette di memorizzare solamente l'integrale sul volume della precedente iterazione e la matrice del nuovo potenziale, piuttosto che tenere in memoria sia la matrice del nuovo potenziale che della vecchia computazione. Oltre a ciò, possiamo pensare di utilizzare il metodo SOR (Successive over Relaxation) che è "imparentato" al metodo usato qua: tale metodo consiste nel calcolare la soluzione successiva usando

$$\varphi_{j,(k+1)}^i = \omega \bar{\varphi}_i^{j,(k)} + (1 - \omega) \varphi_i^{j,(k)}.$$

Dove, nel nostro caso,  $\bar{\varphi}_i^{j,(k)} = \frac{1}{4}(\varphi_{i+1}^{j,(k)} + \varphi_{i-1}^{j,(k)} + \varphi_i^{j+1,(k)} + \varphi_i^{j-1,(k)})$  e  $\omega \in (0,2)$ . Scriviamo il codice

```
1 import numpy as np
 2 import numba
 3 import matplotlib.pyplot as plt
 4 import time
 6 @numba.jit("Tuple([f8[:, :], i8])(f8[:, :], f8, f8)", nopython=True, nogil=True, parallel=True
     def sol_potential(potential, tau, w):
 8
 9
             Compute the solution of 2D Laplacian
10
             Params
12
13
             potential: matrix
                    matrix representing the grid of the point in which the potential is valued
14
15
              tau:
                     difference between two successive iteration
16
17
                     relaxiation parameter for the SOR method
18
             Output:
19
20
             (potential, index): tuple
21
                     tuple contained as first element a matrix in which the potential is valued and the
22
             number of iterations needed
23
             length = len(potential[0])
24
             potential_0 = np.zeros((length, length), dtype="float64")
25
             index = 0
26
27
             integ0 = 0
28
             while True:
29
                     integ = 0
30
31
             for i in numba.prange(1, length-1):
32
33
                             for j in numba.prange(1, length-1):
                                      potential[j][i] = w * 0.25 * (potential[j+1][i] + potential[j-1][i] + potential[j-1]
34
             potential[j][i+1] + potential[j][i-1]) + (1-w)*potential[j][i]
                                      integ += np.abs(potential[j][i])
35
36
37
             if np.abs(integ - integ0)/((length)*(length)) > tau:
                              integ0 = integ
38
                              index += 1
39
                     else:
41
                             break
42
         return (potential, index)
43
44
45 # Boundary counditions
46 edge = np.linspace(-1, 1, 300)
47 bordo_supy = np.cos(np.pi * edge / 2)
48 bordo_infy = edge**4
49 bordo_supx = 1/(np.e**-1 - np.e) * (np.exp(edge)-np.e)
50 bordo_infx = 0.5 * (edge**2 - edge)
51
52 # Creation of the grid
potenziale = np.zeros((300, 300))
54 potenziale[0, :] = bordo_infy
55 potenziale[-1, :] = bordo_supy
56 potenziale[:, 0] = bordo_infx
57 potenziale[:, -1] = bordo_supx
xv, yv = np.meshgrid(edge, edge)
60 # Computing the solution and the time needed
61 start = time.time()
result = sol_potential(potenziale, tau=1e-8, w=1.99)
63 end = time.time()
65 # Graphical settings
fig, ax = plt.subplots(1, 1, figsize=(8,6))
67 clr_plot = ax.contourf(xv, yv, result[0], 30)
ax.set_xlabel('x/a', fontsize=18)
69 ax.set_ylabel('y/a', fontsize=18)
70 cbar = fig.colorbar(clr_plot)
71 cbar.set_label('V/V0', fontsize=18)
72 cbar.ax.tick_params(labelsize=10)
```

```
ax.set_title('Potenziale', fontsize=18)
plt.savefig("potenziale_senzablocco_GSA.png")
print(f"Sono state necessarie {result[1]} iterazioni e {end-start} secondi")
plt.show()

[Output]
Sono state necessarie 735 iterazioni e 0.14688754081726074 secondi
```

Allo stesso modo, si può implementare questo metodo anche nel caso della regione con un blocco a potenziale costante, il cui codice lo carico su GitHub (tanto basta modificare il programma leggermente come fatto qua sopra).

#### 3 Equazione delle corde musicali

Un altro esempio in cui possiamo giovare della parallelizzazione è sicuramente l'equazione delle corde musicali

$$\partial_{xx}^2 u - \frac{1}{c^2} \partial_{tt}^2 u - \gamma \partial_t u - l^2 \partial_{xxxx}^4 u = 0,$$

dove  $\gamma$  è il coefficiente di damping, ovvero il coefficiente correlato alla dispersione di energia dell'onda, e  $l^2$  il coefficiente di rigidità che ha le unità di misura di  $\frac{m^4}{s^2}$  e quantifica la forza esercitata dal corpo dinanzi a delle sollecitazioni (nel caso della corda, la forza che ogni oppone dinanzi al pizzicamento che la fa muovere). Ragionando come prima, approssimiamo l'equazione tramite derivate discrete, diventando così

$$\begin{split} \delta u = & \frac{y_{j+1}^m - 2y_j^m + y_{j-1}^m}{\Delta x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{y_j^{m+1} - 2y_j^m + y_{j-1}^m}{\Delta t^2} - \gamma \frac{y_j^{m+1} - y_j^m}{\Delta t} \\ & - l^2 \frac{y_{j-2}^m - 4y_{j-1}^m + 4y_j^m - 4y_{j+1}^m + y_{j+2}^m}{\Delta x^4} = 0. \end{split}$$

Esplicitando  $y_{i+1}^m$  otteniamo che

$$y_{j}^{m+1} = \left[ \frac{1}{c^{2} \Delta t^{2}} + \frac{\gamma}{2 \Delta t} \right]^{-1} \left[ \frac{1}{\Delta x^{2}} \left( y_{j+1}^{m} - 2y_{j}^{m} + y_{j-1}^{m} \right) - \frac{1}{c^{2} \Delta t^{2}} \left( y_{j}^{m-1} - 2y_{j}^{m} \right) + \frac{\gamma}{2 \Delta t} y_{j}^{m-1} - \frac{l^{2}}{\Delta x^{4}} \left( y_{j-2}^{m} - 4y_{j-1}^{m} + 6y_{j}^{m} - 4y_{j+1}^{m} + y_{j+2}^{m} \right) \right]$$

Possiamo vedere come questa equazione sia computazionalmente molto più gravosa rispetto a quella del laplaciano, siccome il valore dell'iterazione successiva obbliga il computer ad accedere a  $y_j^m$  e le sue celle limitrofe più volte rispetto al caso sopra studiato. Senza ottimizzazioni derivanti dalla compilazione, che evitano riletture ripetute della memoria e altri fattori, il processo diventa molto lento. Questo è uno dei casi dove la compilazione jit (che evita la rilettura ripetuta delle celle), la parallelizzazione e altre, eventuali, ottimizzazioni diventano quasi un must per migliorare significativamente il tempo di esecuzione di questi algoritmi. Studiando l'operatore differenziale approssimato si ottiene che la condizione di stabilità si ha per  $\frac{c\Delta t}{\Delta x} < 1$ : la condizione più stringente per la stabilità, sebbene ci siano derivate di ordine quartico, si ottiene per  $l^2 = \gamma = 0$ , tornando ad essere la semplice equazione delle onde. Dunque possiamo discretizzare il nostro spazio con  $N_x = d = 0.7$  m,  $\Delta x = 0.07$  mm,  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-6}$  s. Pertanto

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
  from matplotlib import animation
  from matplotlib.animation import PillowWriter
5 from scipy.io import wavfile
  from IPython.display import Audio
  import numba
10 # Values of the grid
11 Nx = 101
12 Nt = 500000
_{13} L = 0.7
14 dx = L/(Nx-1)
15 f = 440
16 c = 2*L*f
17 dt = 5e-6
18 1=5e-5
19 gamma=5e-5
```

```
# Boundary conditions
ya = np.linspace(0, 0.01, 70)
yb = np.linspace(0.01, 0, 31)
y0 = np.concatenate([ya, yb])
25
27 # Creation of the grid
28 sol = np.zeros((Nt, Nx))
29 \text{ sol}[0] = y0
30 \text{ sol}[1] = y0
31
32
  @numba.jit("f8[:,:](f8[:,:], i8, i8, f8, f8, f8, f8)", nopython=True, nogil=True)
33
  def compute_sol(d, times, length, dt, dx, l, gamma):
35
    Compute the solution via finite difference method
36
37
    Params
38
39
      d: 2d array
40
        Matrix representing the space-time grid where the solution is evaluated
41
       times: int
42
        Height of the grid (number of points the time is discretized)
43
44
      length: int
45
         Basis of the grid (number of points the x is discretized)
      dt: float
46
47
        Difference between two consecutive 'time' points
48
      dx: float
        Difference between two consecutive 'x' points
49
      1: float
50
        Damping coefficient
51
52
    Stifness term
      gamma: float
53
54
55
    for t in range(1, times-1):
      for i in range(2, length-2):
56
        outer_fact = (1/(c**2 * dt**2) + gamma/(2*dt))**(-1)
p1 = 1/dx**2 * (d[t][i-1] - 2*d[t][i] + d[t][i+1])
57
58
        p2 = 1/(c**2 * dt**2) * (d[t-1][i] - 2*d[t][i])
59
         p3 = gamma/(2*dt) * d[t-1][i]
60
         p4 = 1**2 / dx**4 * (d[t][i+2] - 4*d[t][i+1] + 6*d[t][i] - 4*d[t][i-1] + d[t][i-2])
61
         d[t+1][i] = outer_fact * (p1 - p2 + p3 - p4)
62
63
    return d
64
_{\rm 65} # Computing the solution and plotting some frames
sol = compute_sol(sol, Nt, Nx, dt, dx, 1, gamma)
plt.plot(sol[500], label="Frame 500")
68 plt.plot(sol[1000], label="Frame 1000")
69 plt.legend()
70 plt.savefig("frame1000.png")
71 plt.show()
^{73} # Generating an animation
74 def animate(i):
75
       ax.clear()
       ax.plot(sol[i*10])
76
       ax.set_ylim(-0.01, 0.01)
fig, ax = plt.subplots(1,1)
80 ax.set_ylim(-0.01, 0.01)
ani = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=500, interval=50)
ani.save('string.gif', writer='pillow', fps=20)
```

Può essere interessante vedere il grafico di qualche soluzione a qualche istante:

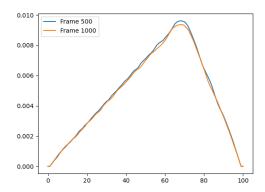


Figura 3: Grafico della soluzione al "frame" 500 e al "frame" 1000. Anche se non sembra, una corda musicale quando viene pizzicata assume queste "posizioni", tuttavia il nostro occhio non è il grado di vederle.

Possiamo fare molto di più: possiamo persino produrre dei file audio. Per fare questo utilizziamo il fatto che la nostra soluzione sarà una combinazione di seni, ma siccome la nostra soluzione sarà appartenente a  $L^2(0,d)$  allora possiamo estrarre il coefficiente che moltiplica il termine  $\sin(\frac{n\pi x}{L})$  usando la norma  $L^2$ 

$$c_n(t) \propto \int_0^L y(x,t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \approx \sum_{i=1}^{N_x} y_i^j \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Dove si è usata la convenzione (fatta anche prima) che  $y_i^t = y(x_i, t_j)$  ovvero la soluzione all'equazione valutata nel punto della griglia di coordinate  $(x_i, t_j)$ . Chiaramente il coefficiente sarà in funzione del tempo (siccome il segnale varia nel tempo), pertanto dovremmo fare il calcolo a t fissato. Oltre a questo, per produrre un file audio è necessario campionare il segnale e non è necessario prendere tutte le armoniche del segnale: ciò è dovuto al fatto che non siamo in grado di riprodurre perfettamente la "bontà" del segnale, anche se generato dal computer, per come vengono prodotti i suoni dalla scheda audio. Inoltre, non ha senso prendere tutte le armoniche che hanno un periodo T < dt (perché chiaramente non vengono simulati correttamente). Quindi è sufficiente restringersi alle prime 10 armoniche che, solitamente, sono quelle maggiormente influenti e, per come abbiamo preso il dt, campionare il segnale ogni 10 punti 'temporali' (questo è necessario per generare un .wav con un sampling rate di 20 kHz).

```
def get_integral_fast(n):
      Computing the coefficient of the n-th harmonic of the signal in all the point of 'time'
      Params
6
          number of the harmonics we want to find the coefficient
      Return
12
        arr: 1darray
          array cointaing in every cell the value that signal in
14
    sin_arr = np.sin(n*np.pi*np.linspace(0,1,101))
    return np.multiply(sol, sin_arr).sum(axis=1) # Sommiamo sulle x, ovvero sulle 'righe'
16
17
  # Estraiamo solamente le prime 10 armoniche tramite questa list comprension
18
  hms = [get_integral_fast(n) for n in range(10)]
19
20
  # Campioniamo l'ampiezzia del segnale campionando temporalmente dei punti a distanza di 10
  tot = sum(hms)[::10] # compute the instananeous value of the audio signal
  tot = tot.astype(np.float32)
  wavfile.write('la.wav',20000,tot)
```

Tramite il modulo wavefile della libreria scipy. io unire i suoni prodotti dalla sovrapposizione di due "note" da noi generate: runnando il programma mettendo come  $f=262~{\rm Hz}$  produrremo un DO4, con  $f=330~{\rm Hz}$  un MI4 e con  $f=392~{\rm Hz}$  produrremo un SOL4: con tali note è possibile creare l'accordo di DO maggiore e possiamo sovrapporre i segnali con

```
c = wavfile.read('do4.wav')[1]
e = wavfile.read('mi4.wav')[1]
```

```
g = wavfile.read('sol4.wav')[1]
wavfile.write('c_maj4.wav', 20000, 2 * c + 2 * e+ 2 * g)
c = c.astype(np.float32)
e = e.astype(np.float32)
g = g.astype(np.float32)
Audio('c_maj4.wav')
```