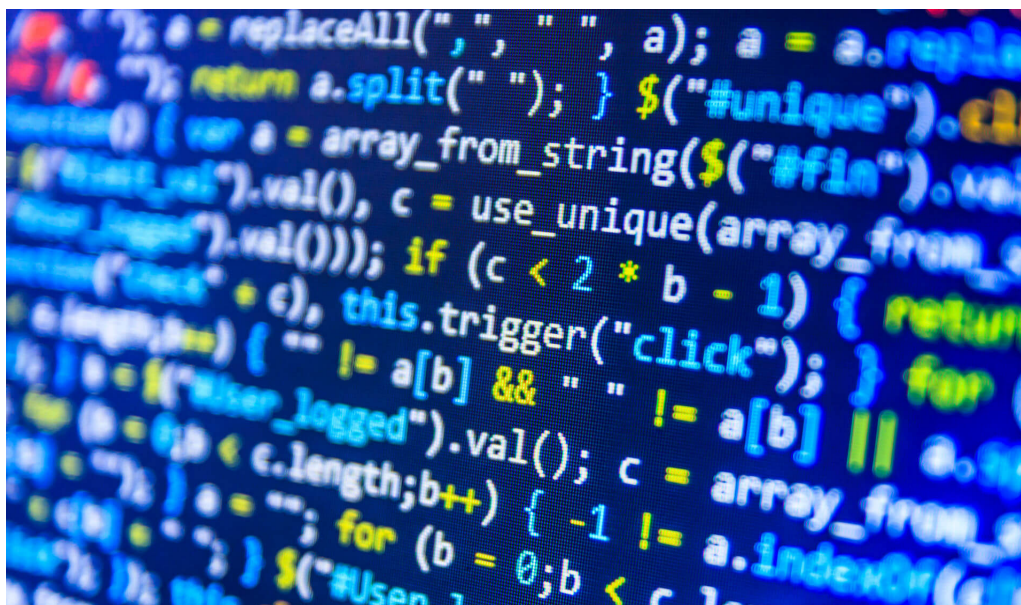

Metodi Computazionali della Fisica



ANNO ACCADEMICO 2017/2018

Autori:

Alessandro Colombi
Paolo Meliga
Giulia Scaffino

Docente:

Fulvio Piccinini

*“Non tutto ciò che può essere contato conta e non tutto ciò che conta può essere
contato.”*

Albert Einstein

Indice

1	Calcolo numerico di derivate	5
1.1	Derivata forward e derivata backward	5
1.2	Derivata centrale	6
1.3	Derivata a 5 punti	6
1.4	Derivata seconda	7
2	Metodi di integrazione numerica	9
2.1	Metodo del rettangolo	9
2.2	Metodo del trapezio	11
2.3	Metodo di Simpson	13
2.4	Variabile di controllo (Control Variates)	15
2.5	Tecnica di campionamento ad importanza	16
2.5.1	Integrali impropri	20
2.6	Valore principale	21
2.7	Algoritmo di integrazione di Gauss-Legendre	22
3	Simulazioni Monte Carlo	27
3.1	Generazione di numeri random	27
3.2	L'ago di Buffon	28
3.3	Calcolo di integrali col Metodo Monte Carlo	29
3.4	Calcolo del π col metodo Monte Carlo	30
3.5	Metodo di riduzione della varianza	31
3.6	Teorema della cumulativa	32
3.7	Generazione di numeri distribuiti gaussianamente	34
3.7.1	Metodo Box&Müller	34
3.7.2	Metodo Hit or Miss	35
3.7.3	Somma di numeri random	35
4	Ricerca degli zeri di una funzione	37
4.1	Algoritmo di bisezione	37
4.2	Algoritmo della secante	38
4.3	Algoritmo delle false posizioni	39
4.4	Algoritmo di Newton-Raphson	40
5	Equazioni differenziali	43
5.1	Equazione di oscillatore armonico	43
5.2	Metodo di Eulero	44
5.3	Metodo multistep di Lagrange	45
5.4	Criterio di stabilità di Von-Neumann	46

5.5	Metodo di Runge-Kutta	47
5.5.1	Soluzione equazione del pendolo	49
5.6	Shooting method	50
5.7	Algoritmo di Metropolis	51

Capitolo 1

Calcolo numerico di derivate

Si vuole ottenere una stima numerica della derivata di una funzione in un punto stabilito. La derivata esatta di una funzione $f(x)$ nel punto x_0 è data dal limite del rapporto incrementale in x_0 :

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (1.1)$$

Poiché nella realtà non è possibile risolvere numericamente la derivata facendo il limite, andremo ad introdurre una discretizzazione che sarà tanto migliore quanto più numerosi saranno i punti che considereremo.

1.1 Derivata forward e derivata backward

Una prima stima della derivata può essere fatta andando a considerare il rapporto

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (1.2)$$

dove h è un parametro piccolo scelto arbitrariamente. Dato che h è piccolo è possibile sviluppare la f in serie di Taylor centrata in x_0 :

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \dots \quad (1.3)$$

Riarrangiando il rapporto precedentemente scritto si ottiene

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) + \frac{h}{2}f''(x_0) + \dots \quad (1.4)$$

e quindi abbiamo che la derivata prima risulta

$$\boxed{f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h).} \quad (1.5)$$

La derivata forward converge alla derivata esatta in modo lineare, pertanto riducendo h di un ordine di grandezza si ha un guadagno in precisione di una cifra decimale.

Per quanto riguarda la derivata backward, al posto di usare il rapporto (1.2) si considera la quantità

$$\frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{-h}. \quad (1.6)$$

Analogamente a quanto fatto prima per la derivata forward, si ha che $f'(x)$ risulta stimata da

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{-h} + O(h) \quad (1.7)$$

Come si può notare, anche la derivata backward converge linearmente alla derivata vera con la stessa velocità della forward.

1.2 Derivata centrale

Una maggiore velocità di convergenza è garantita dal metodo della derivata centrale. Si consideri la differenza $f(x_0 + h) - f(x_0 - h)$. Utilizzando gli sviluppi in serie di Taylor

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.8)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.9)$$

è immediato vedere che

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + 2\frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + O(h^5) \quad (1.10)$$

da cui si ottiene

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + O(h^2). \quad (1.11)$$

Mentre nei metodi della derivata forward e backward per stimare la derivata nel punto x_0 era necessario conoscere rispettivamente il valore della funzione nel punto $x_0 + h$ e $x_0 - h$, adesso la funzione non viene stimata solo a destra ($x_0 + h$) o a sinistra ($x_0 - h$) ma da entrambi i lati. Questo comporta dover fornire all'algoritmo una maggiore quantità di informazioni, ma si ha una più alta precisione in quanto il risultato converge come h^2 . Riducendo h di un ordine di grandezza si ha un guadagno in precisione di due cifre decimali.

1.3 Derivata a 5 punti

Un algoritmo che garantisce una velocità di convergenza ancora maggiore è quello della derivata a 5 punti. Per ottenerlo bisogna considerare due ulteriori sviluppi in serie della funzione f :

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + 2hf'(x_0) + \frac{4h^2}{2!}f''(x_0) + \frac{8h^3}{3!}f'''(x_0) + O(h^4) \quad (1.12)$$

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - 2hf'(x_0) + \frac{4h^2}{2!}f''(x_0) - \frac{8h^3}{3!}f'''(x_0) + O(h^4) \quad (1.13)$$

Facendo la differenza tra questi, tutti i termini contenenti le derivate di ordine pari si eliminano e rimane:

$$f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h) = 4hf'(x_0) + \frac{16h^3}{3!}f'''(x_0) + O(h^5) \quad (1.14)$$

Grazie all'equazione (1.10), possiamo scrivere:

$$\frac{16h^3}{3!}f'''(x_0) = 8[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - 16hf'(x_0) + O(h^5) \quad (1.15)$$

Sostituendo nell'equazione precedente si ottiene:

$$f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h) - 8[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] = -12hf'(x_0) + O(h^5) \quad (1.16)$$

da cui si ricava:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + O(h^4) \quad (1.17)$$

La derivata a 5 punti, chiamata così in quanto, oltre al punto x_0 , vengono utilizzati altri quattro punti ($x_0 + 2h$, $x_0 + h$, $x_0 - h$ e $x_0 - 2h$), converge al valore vero della derivata con velocità h^4 : riducendo h di un ordine di grandezza si ha un guadagno in precisione di quattro cifre decimali. Nonostante questo, l'algoritmo non sempre rappresenta la scelta migliore. Per valori di h molto piccoli infatti i valori che la f assume nei punti utilizzati sono molto vicini tra loro. Dato che con questo metodo bisogna calcolare 3 differenze, è possibile che si perda precisione (anche a seconda del tipo di variabili utilizzate nell'algoritmo).

1.4 Derivata seconda

Dopo aver trattato il caso della derivata prima, è logico pensare ad algoritmi per le derivate successive. A lezione ci si è fermati al caso della derivata seconda e la trattazione si basa essenzialmente su quanto visto per la derivata prima. Partiamo dal rapporto che definisce numericamente la derivata seconda:

$$f''(x_0) = \frac{f'(x_0 + h) - f'(x_0)}{h} \quad (1.18)$$

che è la derivata seconda forward, mentre la seguente equazione

$$f''(x_0) = \frac{f'(x_0 - h) - f'(x_0)}{-h} \quad (1.19)$$

è la derivata seconda backward. A livello teorico, però, può risultare utile esplicitare il modo di ottenere la derivata seconda forward (e backward) per mettere in luce la convergenza della derivata, oltre che la sua espressione in termini della funzione. Richiamiamo brevemente gli sviluppi in serie già visti:

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + 2hf'(x_0) + \frac{4h^2}{2!}f''(x_0) + \frac{8h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.20)$$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.21)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.22)$$

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - 2hf'(x_0) + \frac{4h^2}{2!}f''(x_0) - \frac{8h^3}{3!}f'''(x_0) + \dots \quad (1.23)$$

A questo punto possiamo sommare opportunamente per poter isolare la derivata seconda forward come segue:

$$f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) = -f(x_0) + h^2f''(x_0) + O(h^3) \quad (1.24)$$

dalla quale si ottiene:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2} + O(h). \quad (1.25)$$

Analogamente si può procedere per la derivata backward usando $f(x_0 - 2h)$ e $f(x_0 - h)$ e arrivando a:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 2f(x_0 - h) + f(x_0)}{h^2} + O(h). \quad (1.26)$$

Come si vede esse sono derivate seconde a tre punti ($x_0 + 2h$, $x_0 + h$ e x_0 per la forward e $x_0 - 2h$, $x_0 - h$ e x_0 per la backward) e convergono linearmente in h : riducendo h di un ordine di grandezza si ha un guadagno in precisione di una cifra decimale.

Per ottenere una convergenza migliore, è possibile costruire la derivata seconda centrale come segue:

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) = 2f(x_0) + h^2 f''(x_0) + O(h^4) \quad (1.27)$$

da cui:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + O(h^2) \quad (1.28)$$

che è definita essenzialmente considerando l'intervallo simmetrico di semi-larghezza h centrato in x_0 . In questo caso, il risultato approssimato converge quadraticamente al valore vero, il che significa che riducendo h di un ordine di grandezza si ha un guadagno in precisione di due cifre decimali. Analogamente ci si può spingere oltre nel costruire la derivata seconda a cinque punti. Di seguito si tralasciano i conti pedanti e si mostra soltanto l'espressione che porta alla derivata seconda a cinque punti (il lettore volenteroso può verificare il risultato!):

$$f(x_0 + 2h) + f(x_0 - 2h) - 16(f(x_0 + h) + f(x_0 - h)) = -30f(x_0) - 12h^2 f''(x_0) + O(h^6). \quad (1.29)$$

Osservazione importante

Va detto che, nel codice, per la derivata seconda ci si basa sugli algoritmi della derivata prima: si definiscono gli algoritmi per la derivata prima; si sceglie un algoritmo e lo si deriva al fine di ottenere la derivata seconda. Ciò significa, ad esempio, che se si vuole calcolare la derivata seconda centrale si va a derivare la derivata prima centrale, ovvero si scrive:

$$f''(x_0) = \frac{f'(x_0 + h) - f'(x_0 - h)}{2h} + O(h^2) \quad (1.30)$$

dove qui le derivate prime sono da intendersi come derivate prime centrali valutate ora nei punti $x_0 + h$ e $x_0 - h$, vale a dire (esaminando solo il primo termine a numeratore):

$$f'(x_0 + h) = \frac{f(x_0 + h + h) - f(x_0 - h + h)}{2h} + O(h^2) \quad (1.31)$$

che corrisponde ad aver usato la (1.11) nel punto $x_0 + h$.

Questa procedura (malgrado porti a espressioni esplicite diverse da quelle teoriche scritte in questa sezione) permette di definire una sola volta (per la derivata prima) gli algoritmi da usare e implementarli per la derivata seconda e la procedura può essere estesa anche a derivate di ordine superiore. Inoltre si noti che in questo modo si mantiene per la derivata seconda la stessa velocità di convergenza che si aveva, con lo stesso algoritmo, per la derivata prima.

Capitolo 2

Metodi di integrazione numerica

In analisi numerica, l'integrazione numerica costituisce una vasta famiglia di algoritmi per il calcolo del valore numerico di un integrale definito.

In questo corso verranno analizzati due diversi approcci di integrazione numerica:

- deterministico: nell'intervallo di integrazione costruisco una griglia di punti in modo deterministico;
- stocastico (metodo Monte Carlo): nell'intervallo di integrazione distribuisco dei punti in modo pseudorandom.

Gli algoritmi di tipo deterministico sono più efficienti rispetto a quelli di tipo stocastico; essi hanno inoltre una maggiore velocità di convergenza.

2.1 Metodo del rettangolo

Il metodo del rettangolo va ad approssimare l'integrale di una funzione $f(x)$ con la somma delle aree di N piccoli rettangoli come mostrato in Figura 2.1. Ciascuno di questi rettangoli ha come base

$$\Delta x = \frac{(b - a)}{N} \quad (2.1)$$

e come altezza $f(\bar{x})$ dove \bar{x} è il punto medio di ciascun rettangolo. Segue pertanto che

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = f(\bar{x}_{i-1,i}) \Delta x. \quad (2.2)$$

Sviluppo $f(x)$ in serie di Taylor attorno a $\bar{x}_{i-1,i}$

$$f(x) = f(\bar{x}_{i-1,i}) + f'(\bar{x}_{i-1,i})(x - \bar{x}_{i-1,i}) + \frac{1}{2}f''(\bar{x}_{i-1,i})(x - \bar{x}_{i-1,i})^2 + O((x - \bar{x}_{i-1,i})^3) \quad (2.3)$$

A questo punto posso integrare i vari termini tra x_{i-1} e x_i . Tenendo conto del fatto che

$$\bar{x}_{i-1,i} = x_{i-1} + \frac{x_i - x_{i-1}}{2} = \frac{x_{i-1} + x_i}{2}$$

e ponendo $\Delta x = x_i - x_{i-1} = h$ si ottiene:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(\bar{x}_{i-1,i}) dx = f(\bar{x}_{i-1,i})h = I_{\bar{x}_{i-1,i}}^N$$

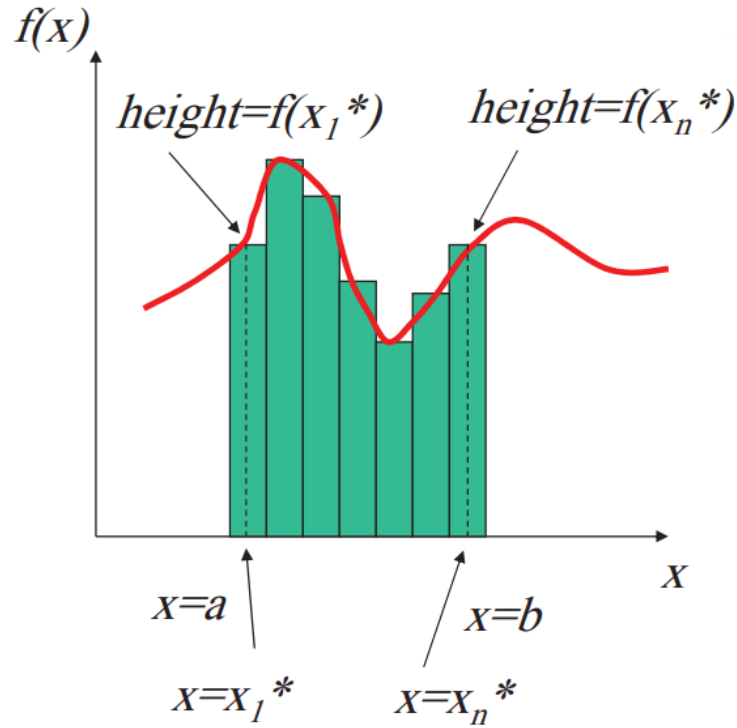


Figura 2.1: Metodo del rettangolo

$$\begin{aligned}
 \int_{x_{i-1}}^{x_i} f'(\bar{x}_{i-1,i})(x - \bar{x}_{i-1,i})dx &= f'(\bar{x}_{i-1,i}) \frac{(x - \bar{x}_{i-1,i})^2}{2} \Big|_{x_{i-1}}^{x_i} \\
 &= \frac{f'(\bar{x}_{i-1,i})}{2} \left[\left(x_i - \frac{x_{i-1} + x_i}{2} \right)^2 - \left(x_{i-1} - \frac{x_{i-1} + x_i}{2} \right)^2 \right] \\
 &= \frac{f'(\bar{x}_{i-1,i})}{2} \left[\left(\frac{x_i - x_{i-1}}{2} \right)^2 - \left(\frac{x_{i-1} - x_i}{2} \right)^2 \right] \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{2} f''(\bar{x}_{i-1,i})(x - \bar{x}_{i-1,i})^2 dx &= \frac{f''(\bar{x}_{i-1,i})}{2} \frac{(x - \bar{x}_{i-1,i})^3}{3} \Big|_{x_{i-1}}^{x_i} \\
 &= \frac{f''(\bar{x}_{i-1,i})}{6} \left[\left(x_i - \frac{x_{i-1} + x_i}{2} \right)^3 - \left(x_{i-1} - \frac{x_{i-1} + x_i}{2} \right)^3 \right] \\
 &= \frac{f''(\bar{x}_{i-1,i})}{6} \left[\frac{(x_i - x_{i-1})^3}{8} - \frac{(x_{i-1} - x_i)^3}{8} \right] \\
 &= \frac{f''(\bar{x}_{i-1,i})}{48} [(x_i - x_{i-1})^3 + (x_i - x_{i-1})^3] \\
 &= \frac{h^3}{24} f''(\bar{x}_{i-1,i})
 \end{aligned}$$

Raggruppando i vari termini si ottiene quindi:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = I_{\bar{x}_{i-1,i}}^N + \frac{h^3}{24} f''(\bar{x}_{i-1,i}) + O(h^5) \quad (2.4)$$

Eseguendo l'integrazione su un intervallo finito $[a, b]$ sommando solamente le aree dei rettangoli si ottiene:

$$I_{a,b} = \sum_{i=1}^N I_{\bar{x}_{i-1,i}}^N = \sum_{i=1}^N h f(\bar{x}_{i-1,i}) = h \sum_{i=1}^N f(\bar{x}_{i-1,i}) \quad (2.5)$$

La precisione di questo algoritmo può essere calcolata andando a considerare, tralasciando gli ordini superiori, la differenza tra il valore vero e il valore approssimato $I_{a,b}$:

$$\Delta I_{a,b} = \frac{h^3}{24} \sum_{i=1}^N f''(\bar{x}_{i-1,i}) = \frac{Nh^3}{24} f''(\xi) \quad (2.6)$$

dove nell'ultimo passaggio si è utilizzato il teorema della media integrale e $\xi \in (a, b)$. Poichè risulta che

$$h = \frac{b-a}{N} \quad (2.7)$$

si ottiene:

$$\Delta I_{a,b} = \frac{(b-a)^3}{24N^2} f''(\bar{x}). \quad (2.8)$$

Perciò il risultato approssimato ottenuto con il metodo del rettangolo converge al valore vero dell'integrale con una velocità pari a

$$\frac{1}{N^2} \quad (2.9)$$

Questo metodo risulta quindi tanto più accurato quanto più fitta è la suddivisione dell'intervallo di integrazione.

2.2 Metodo del trapezio

Un'altra utile regola di integrazione è data dal metodo del trapezio rappresentato nella Figura 2.2. Con questa regola, l'integrale viene valutato dividendo l'area in piccoli trapezi anziché rettangoli. Iniziamo a calcolare l'area di un singolo trapezio:

$$I_{i-1,i} = h \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \quad (2.10)$$

La somma di N trapezi di altezza infinitesima h risulta pertanto:

$$\begin{aligned} I_{a,b} &= \sum_{i=1}^N I_{i-1,i} \\ &= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) + \frac{h}{2}(f(x_1) + f(x_2)) + \dots + \frac{h}{2}(f(x_{N-1}) + f(x_N)) \\ &= h \left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N) \right] \end{aligned} \quad (2.11)$$

Per stimare l'errore (dove per errore si intende la precisione del risultato approssimato rispetto a quello vero) si utilizza lo sviluppo di Taylor di $f(x)$ calcolato in x_{i-1} e in x_i :

$$f(x) = f(x_{i-1}) + f'(x_{i-1})(x - x_{i-1}) + \frac{1}{2}f''(x_{i-1})(x - x_{i-1})^2 \quad (2.12)$$

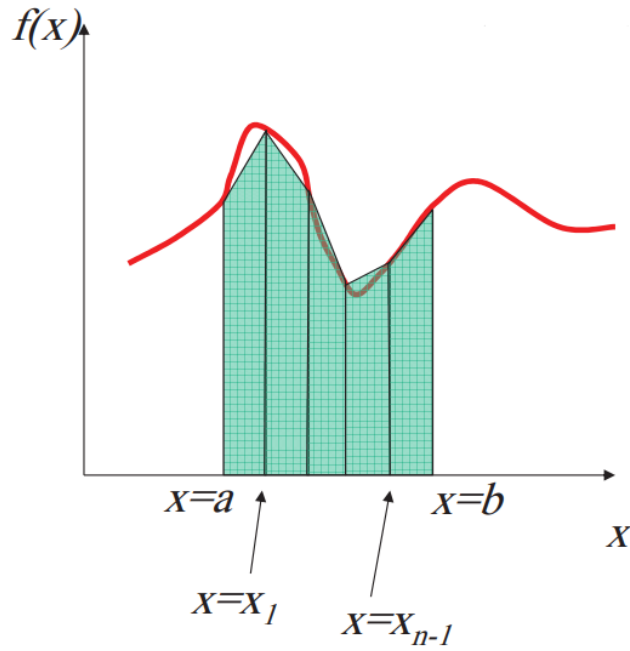


Figura 2.2: Metodo del trapezio

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i)(x - x_i)^2 \quad (2.13)$$

Da questi due sviluppi ottengo che

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) + \frac{1}{2}f'(x_{i-1})(x - x_{i-1}) + \frac{1}{2}f'(x_i)(x - x_i) \\ &\quad + \frac{1}{4}f''(x_{i-1})(x - x_{i-1})^2 + \frac{1}{4}f''(x_i)(x - x_i)^2 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Integrando la $f(x)$ all'interno di un trapezio infinitesimo si ha

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx &= \frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))(x_i - x_{i-1}) + \frac{1}{4}f'(x_{i-1})(x_i - x_{i-1})^2 \\ &\quad - \frac{1}{4}f'(x_i)(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{1}{12}f''(x_{i-1})(x_i - x_{i-1})^3 - \frac{1}{12}f''(x_i)(x_{i-1} - x_i)^3 \\ &= \frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))(x_i - x_{i-1}) + \frac{1}{4}(x_i - x_{i-1})^2 [f'(x_{i-1}) - f'(x_i)] \\ &\quad + \frac{1}{12}(x_i - x_{i-1})^3 [f''(x_{i-1}) + f''(x_i)]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Sia $(x_i - x_{i-1}) = h$.

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{h}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i)) + \frac{h^2}{4}(f'(x_{i-1}) - f'(x_i)) + \frac{h^3}{12}(f''(x_{i-1}) + f''(x_i)) \quad (2.16)$$

Estendendo l'integrale a tutto il dominio di integrazione $[a, b]$ si ottiene che

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x)dx &= h \left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N) \right) + \frac{h^2}{4} \left(f'(x_0) \right. \\
 &\quad \left. - f'(x_1) + f'(x_1) - f'(x_2) + f'(x_2) - \dots + f'(x_{N-1}) - f'(x_N) \right) \\
 &\quad + \frac{h^3}{12} \left(f''(x_0) + 2f''(x_1) + 2f''(x_2) + \dots + 2f''(x_{N-1}) + f''(x_N) \right) \\
 &= h \left(\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N) \right) \\
 &\quad + \frac{h^2}{4} \left(f'(x_0) - f'(x_N) \right) + \frac{h^3}{12} \left(\dots \right)
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

La differenza tra il valore esatto dell'integrale e quello stimato con l'equazione (2.11) è:

$$\Delta I = \frac{h^2}{4} \left(f'(x_0) - f'(x_N) \right) + \frac{h^3}{12} \left(\dots \right) \tag{2.18}$$

Perciò, dato che $h = \frac{(b-a)}{N}$, la precisione del metodo scala come $1/N^2$.

Osservazioni:

- La derivata prima è calcolata solo nel primo e nell'ultimo punto;
- Aggiungendo l'informazione sulla derivata prima si può migliorare la stima dell'integrale aggiungendo anche il termine in h^2 e considerare come errore il termine

$$\frac{h^3}{12} \left(\dots \right) \tag{2.19}$$

In questo modo, avendo un errore di $O(h^3)$ anziché $O(h^2)$, la velocità di convergenza dell'algoritmo va come $1/N^3$;

- Le $f(x)$ vengono pesate diversamente sull'intervallo: compaiono i coefficienti 1 e $\frac{1}{2}$.

2.3 Metodo di Simpson

Come si è visto, sia l'algoritmo del rettangolo che quello del trapezio, portano ad una stima degli integrali che convergono al valore vero con velocità $\frac{1}{N^2}$.

Un metodo più rapido è dato dall'algoritmo di Simpson. Per utilizzare questo metodo, l'intervallo di integrazione $[a, b]$ va suddiviso in un numero pari di sottointervalli di ampiezza

$$h = \frac{b-a}{N}$$

Considerando due sottointervalli adiacenti (x_{i-1}, x_i) e (x_i, x_{i+1}) e sviluppando la funzione integranda in serie di Taylor intorno al punto x_i , si ha:

$$\begin{aligned} I_{x_{i-1}, x_{i+1}} &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left[f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2}f''(x_i)(x - x_i)^2 + \frac{1}{3!}f'''(x_i)(x - x_i)^3 \right. \\ &\quad \left. + O((x - x_i)^4) \right] dx \end{aligned} \quad (2.20)$$

Calcolando i vari termini si ottiene:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x_i) dx = f(x_i)(x_{i+1} - x_{i-1}) = 2hf(x_i) \quad (2.21)$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f'(x_i)(x - x_i) dx = f'(x_i) \frac{(x_{i+1} - x_i)^2 - (x_{i-1} - x_i)^2}{2} = f'(x_i) \frac{h^2 - h^2}{2} = 0 \quad (2.22)$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \frac{1}{2}f''(x_i)(x - x_i)^2 dx = f''(x_i) \frac{(x_{i+1} - x_i)^3 - (x_{i-1} - x_i)^3}{6} = \frac{1}{3}h^3 f''(x_i) \quad (2.23)$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \frac{1}{3!}f'''(x_i)(x - x_i)^3 dx = f'''(x_i) \frac{(x_{i+1} - x_i)^4 - (x_{i-1} - x_i)^4}{24} = 0 \quad (2.24)$$

Perciò risulta:

$$I_{x_{i-1}, x_{i+1}} = 2hf(x_i) + \frac{1}{3}h^3 f''(x_i) + O(h^5) \quad (2.25)$$

La derivata seconda può essere stimata con l'equazione (1.28):

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

Sostituendo nella (2.25) si arriva all'espressione:

$$I_{x_{i-1}, x_{i+1}} = \frac{h}{3} [f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1}))] + O(h^5) \quad (2.26)$$

L'integrale di $f(x)$ nell'intervallo $[a, b]$ è quindi dato da:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=1}^N I_{x_{i-1}, x_i} \\ &= I_{x_0, x_2} + I_{x_2, x_4} + \dots + I_{x_{N-2}, x_N} \\ &= \boxed{\frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots + f(x_N)] + O(h^4)} \end{aligned} \quad (2.27)$$

dove l'ordine h^4 è dovuto al fatto che sto sommando $N/2$ termini ($N \sim 1/h$) di ordine h^5 . L'integrale di Simpson può quindi essere scritto sinteticamente nella forma:

$$I_{a,b}^{Simpson} = \sum_{i=0}^N \frac{h}{3} \omega_i f(x_i) \quad (2.28)$$

dove i pesi ω_i valgono 1 per i punti estremi dell'intervallo (x_0 e x_N), 4 per i punti interni di ordine dispari (x_1, x_3, \dots) e 2 per i punti interni di ordine pari (x_2, x_4, \dots).

Con questo metodo la differenza tra il valore esatto dell'integrale e quello stimato è di ordine h^4 e perciò la precisione dell'algoritmo di Simpson scala come $1/N^4$.

L'algoritmo di Simpson può essere ottenuto anche a partire dall'algoritmo del trapezio. Supponiamo di suddividere l'intervallo $[a, b]$ in 8 sottointervalli di ampiezza h . Usando per comodità la notazione $f(x_i) = f_i$, il metodo del trapezio fornisce la stima:

$$I_8^{Trap} = h \left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + \frac{1}{2}f_8 \right) \quad (2.29)$$

Unendo gli intervalli a due a due, ovvero suddividendo $[a, b]$ in 4 sottointervalli di ampiezza $2h$, si ottiene invece:

$$I_4^{Trap} = 2h \left(\frac{1}{2}f_0 + f_2 + f_4 + f_6 + \frac{1}{2}f_8 \right). \quad (2.30)$$

A questo punto considero la combinazione lineare:

$$\frac{4}{3}I_8^{Trap} - \frac{1}{3}I_4^{Trap} = \dots = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + 4f_5 + 2f_6 + 4f_7 + f_8).$$

Come si vede questa è esattamente la formula dell'algoritmo di Simpson per $N = 8$. Perciò:

$$I_N^{Simpson} = \frac{4}{3}I_N^{Trap} - \frac{1}{3}I_{N/2}^{Trap} \quad (2.31)$$

Osservazione: attraverso i codici Fortran è stato possibile osservare che il metodo di Simpson integra esattamente funzioni che siano polinomi di terzo grado.

2.4 Variabile di controllo (Control Variates)

Il metodo della variabile di controllo è una delle tante tecniche di riduzione della varianza e fornisce un valido aiuto nella risoluzione di integrali che non hanno una semplice primitiva analitica (o che non la hanno affatto).

Nel nostro caso, dato un integrale è possibile considerare la funzione integranda come prodotto di due funzioni $f(x)$ e $g(x)$ ed arrivare ad un risultato che è la somma di un valore analitico principale e di una correzione a tale valore. Supponiamo, ad esempio, che si debba risolvere numericamente il seguente integrale:

$$\int_a^b \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{(x - x_0)^2 + c^2} dx \quad (2.32)$$

con

$$f(x) = \frac{1}{(x - x_0)^2 + c^2} \quad \text{e} \quad g(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (2.33)$$

La funzione $f(x)$ (assimilabile ad una distribuzione lorentziana o di Cauchy) varia molto in x_0 mentre $g(x)$ no. Allora si ha che:

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x)g(x)dx &= \int_a^b \left[f(x)g(x) - f(x)g(x_0) + f(x)g(x_0) \right] dx \\
 &= \int_a^b f(x)g(x_0)dx + \int_a^b \left[f(x)g(x) - f(x)g(x_0) \right] dx \\
 &= \int_a^b f(x)g(x_0)dx + \int_a^b f(x) \left[g(x) - g(x_0) \right] dx \\
 &= g(x_0) \int_a^b f(x)dx + \int_a^b f(x) \left[g(x) - g(x_0) \right] dx
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

\uparrow
 $\simeq 0$

dove il primo termine del risultato (prodotto fra un valore costante $g(x_0)$ e l'integrale di $f(x)$) è calcolato analiticamente mentre il secondo è una correzione.

Si noti che questo metodo è molto efficace quando una delle due funzioni è integrabile analiticamente (in questo caso la $f(x)$), in modo che si riesca ad avere un valore numerico esatto a cui aggiungere solo un piccolo contributo. È possibile valutare quanto sia piccolo quest'ultimo calcolando l'integrale

$$\int_a^b f(x) \left[g(x) - g(x_0) \right] dx$$

usando i metodi già presentati. Se si esegue il calcolo numerico, considerando proprio le funzioni $f(x)$ e $g(x)$ scritte prima, si ottiene un valore che differisce dal primo termine (calcolato analiticamente) di circa 7 ordini di grandezza¹. Questo permette di poter usare una precisione più piccola rispetto a quanto si è soliti fare per ottenere la convergenza sperata, ed evita di far “affaticare” troppo il calcolatore, riducendo così il tempo di calcolo e portando lo stesso al risultato in modo soddisfacente. Le uniche accortezze da considerare sono che la funzione integranda deve variare di poco, e, una volta scomposta nel prodotto di due funzioni, una delle due funzioni deve essere integrabile analiticamente.

2.5 Tecnica di campionamento ad importanza

Il campionamento ad importanza è un metodo utile per ottimizzare i tempi di calcolo quando si deve integrare una funzione che presenta una grande varianza in alcune regioni e varianza minore in altre. Supponiamo di dover integrare una funzione con caratteristiche simili a quelle di Figura 2.3, che varia molto nell'intervallo $[a,b]$ e varia meno nell'intervallo $[b,c]$. Al fine di ottenere una stessa precisione in entrambe le regioni, occorre generare un maggior numero di punti nella regione $[a,b]$ rispetto alla regione $[b,c]$. A causa dell'elevata varianza della regione $[a,b]$, al fine di ottenere una buona precisione sul valore dell'integrale è necessario un numero elevato di punti che risulterebbe tuttavia eccessivo per l'intervallo $[b,c]$. Per questo motivo può essere più rapido generare spazature non uniformi (vedi

¹In realtà dipende dal valore dei parametri scelti. Nel nostro caso si è usato: $c = 10^{-6}$ e $x_0 = 0.5$. Con altri valori è intuibile che si trovino altri risultati, ma resta il fatto che il secondo contributo è quasi trascurabile rispetto al primo.

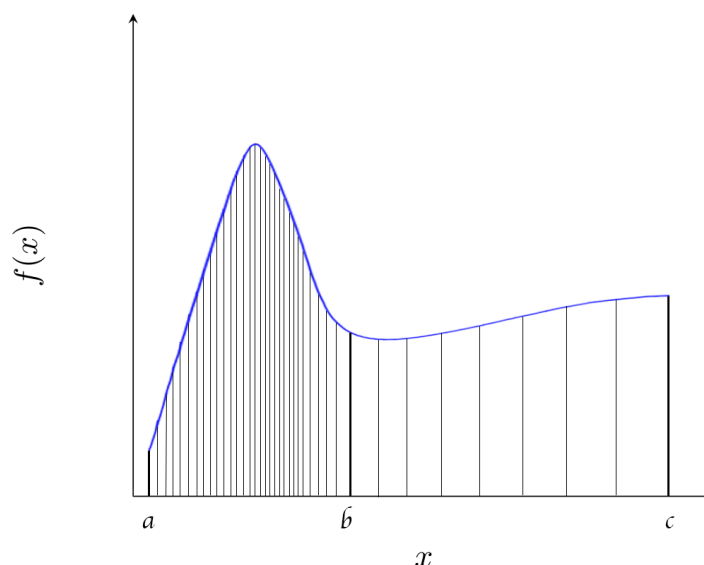


Figura 2.3: Funzione con diversi gradi di varianza e suddivisione non uniforme dell'intervallo di integrazione.

Figura 2.3).

Nel caso particolare di una funzione piatta, indipendentemente dal numero di sottointervalli, l'algoritmo fornisce un valore esatto (errore pari a zero).

Per poter distribuire in modo adeguato i punti all'interno dell'intervallo di integrazione, è possibile utilizzare il metodo di sostituzione. Consideriamo ad esempio di voler calcolare l'integrale

$$I = \int_1^5 \frac{1}{x} dx.$$

Effettuando la sostituzione:

$$\frac{dx}{x} = dy \quad \text{ovvero} \quad y = \ln x + c$$

la funzione da integrare risulta ora la funzione costante pari a 1:

$$I = \int_0^{\ln 5} dy.$$

Passando dalla variabile x alla variabile y possiamo suddividere in modo equispaziato il nuovo intervallo di integrazione. Questa scelta, come si può osservare dalla Figura 2.4, comporta una suddivisione non equispaziata nella variabile x .

Come si vede, i punti sono più concentrati vicino all'origine dove la funzione varia molto con x e più diradati per x più grandi. Il fatto di andare a pesare maggiormente una regione dell'intervallo di integrazione piuttosto che un'altra è il motivo per cui il metodo è detto campionamento ad importanza.

Questo metodo risulta più semplice e particolarmente vantaggioso nel caso in cui la funzione da integrare si possa fattorizzare nel prodotto $f(x)g(x)$ dove

- $f(x)$ è integrabile analiticamente ed eventualmente molto variabile;
- $g(x)$ è poco variabile e non necessariamente integrabile analiticamente.

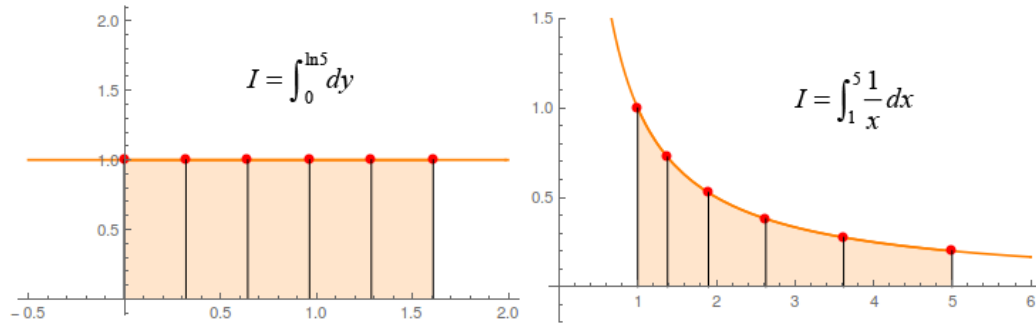


Figura 2.4: Ad una suddivisione equispaziata nella variabile y corrisponde una suddivisione non equispaziata nella variabile x .

In questi casi, si va pertanto a scrivere un'uguaglianza del tipo

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = \int_{y_1}^{y_2} g(x(y))dy \quad (2.35)$$

avendo effettuato la sostituzione

$$f(x)dx = dy \quad (2.36)$$

Per gli estremi di integrazione possiamo individuare due casi:

- un estremo è scelto in modo arbitrario mentre l'altro è fissato dal valore dell'integrale al primo membro;
- entrambi gli estremi y_1 e y_2 sono scelti in modo arbitrario e pertanto occorre moltiplicare l'integrale a secondo membro per un fattore di normalizzazione² in modo da garantire l'uguaglianza tra gli integrali.

Per poter scrivere il secondo membro dell'equazione (2.35) è necessario:

- 1) calcolare il secondo estremo di integrazione o il coefficiente di normalizzazione;
- 2) scrivere x in funzione di y .

Si voglia ad esempio integrare

$$\int_a^b \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{(x-x_0)^2 + c^2} dx \quad (2.37)$$

con

$$f(x) = \frac{1}{(x-x_0)^2 + c^2} \quad \text{e} \quad g(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (2.38)$$

Punto 1: scegliamo in modo arbitrario y_1 e calcoliamo y_2 .

Per fare questo bisogna risolvere

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{y_1}^{y_2} dy \quad (2.39)$$

In questo caso si arriva ad avere

$$y_2 - y_1 = \int_a^b \frac{1}{(x-x_0)^2 + c^2} dx = \dots = \frac{1}{c} \left[\arctan\left(\frac{b-x_0}{c}\right) - \arctan\left(\frac{a-x_0}{c}\right) \right] \quad (2.40)$$

²Il fattore di normalizzazione è dato da $\frac{N}{y_2-y_1}$ dove $N = \int_a^b f(x)dx$.

Punto 2: scriviamo x in funzione di y .

Per fare questo dobbiamo risolvere l'equazione

$$\int_a^x f(x)dx = \int_{y_1}^y dy \quad (2.41)$$

e otteniamo

$$y - y_1 = \frac{1}{c} \left[\arctan \left(\frac{x - x_0}{c} \right) - \arctan \left(\frac{a - x_0}{c} \right) \right] \quad (2.42)$$

Ricavando la x da questa equazione si trova

$$x = x_0 + c \tan \left[\arctan \left(\frac{a - x_0}{c} \right) + c(y - y_1) \right] \quad (2.43)$$

A questo punto l'integrale di partenza da calcolare risulta essere

$$\int_a^b \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{(x - x_0)^2 + c^2} dx = \int_{y_1}^{y_2} e^{-\frac{1}{2} \{x_0 + c \tan [\arctan (\frac{a-x_0}{c}) + c(y-y_1)]\}^2} dy \quad (2.44)$$

Nel caso di funzione non fattorizzabile bisogna trovare una funzione $f(x)$ integrabile analiticamente che approssimi la funzione $g(x)$. In questo modo è possibile scrivere

$$\int_a^b g(x)dx = \int_a^b \frac{g(x)}{f(x)} f(x)dx \quad (2.45)$$

La richiesta che $f(x)$ approssimi la $g(x)$ serve per garantire che il rapporto $\frac{g(x)}{f(x)}$ sia poco variabile (≈ 1).

Se la funzione da integrare presenta più picchi (come in Figura 2.5), si può procedere in due modi:

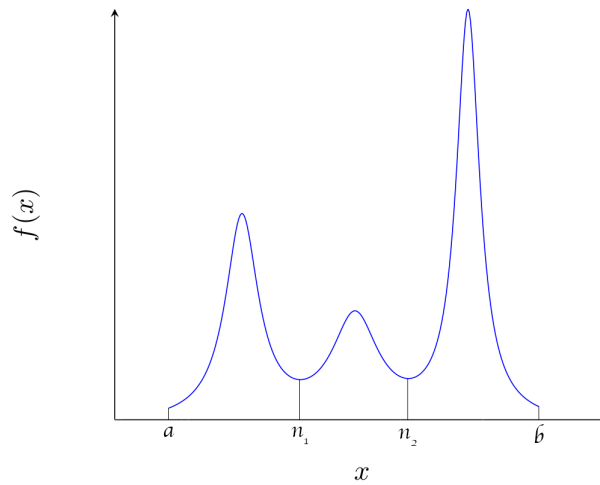


Figura 2.5: Funzione con più picchi.

- è possibile spezzare l'integrale in $[a, b]$ come somma di integrali su sottointervalli $[a, n_1]$, $[n_1, n_2]$, $[n_2, b]$ che contengono ciascuno un solo picco. Questo metodo non è particolarmente consigliato in quanto comporta l'introduzione di parametri esterni (in questo caso n_1 e n_2) al cui variare si possono ottenere risultati diversi.

- è possibile risolvere il seguente integrale

$$\int_a^b g(x)dx = \int_a^b \frac{f_1(x) + f_2(x) + f_3(x)}{f_1(x) + f_2(x) + f_3(x)} g(x)dx \quad (2.46)$$

dove $f_1(x)$, $f_2(x)$ e $f_3(x)$ sono delle funzioni definite tra $[a,b]$ che approssimano rispettivamente i picchi 1, 2 e 3. In questo modo l'integrale viene sempre scritto come somma di tre integrali ma tutti all'interno dello stesso intervallo senza l'introduzione di nuovi parametri.

Osservazione: rispetto al control variates, la tecnica di campionamento ad importanza permette di risolvere l'integrale in un solo "colpo".

2.5.1 Integrali impropri

Un caso particolare di applicazione della tecnica di campionamento ad importanza riguarda la risoluzione degli integrali impropri, cioè quelli in cui uno degli estremi di integrazione tende all'infinito (oppure ad un numero reale finito):

$$\int_a^\infty f(x)dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x)dx. \quad (2.47)$$

Per poterlo risolvere si procede con un'adeguata sostituzione tale da ricondursi ad un integrale i cui estremi di integrazione siano finiti. Si consideri per esempio il seguente integrale:

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^2} dx \quad (2.48)$$

e procediamo con la sostituzione:

$$x \rightarrow \frac{1}{y} \quad \text{ovvero:} \quad \frac{dx}{x^2} = -dy \quad (2.49)$$

che si riflette sugli estremi di integrazione come segue:

$$x_1 = 1 \rightarrow y_1 = 1 \quad \text{e} \quad x_2 = \infty \rightarrow y_2 = 0$$

da cui segue che:

$$\int_1^\infty \frac{1}{x^2} dx = - \int_1^0 y dy = \int_0^1 y dy. \quad (2.50)$$

In questo caso, la tecnica del campionamento ad importanza ottenuta tramite sostituzione ha permesso di trasformare un integrale improprio (non risolvibile numericamente) in uno proprio (che invece può essere risolto).

2.6 Valore principale

Un'altra tipologia di integrali da considerare per il calcolo numerico è l'integrale in parte principale, noto anche come valore principale di Cauchy (Principal Value = PV). Può succedere di dover integrare una funzione, non definita ovunque, in un intervallo che comprende punti in cui la funzione non è definita. Il valore principale consiste nell'integrare la funzione in un intervallo simmetrico rispetto alla singolarità, ovvero è un modo per poter "oltrepassare" la singolarità e risolvere l'integrale. Alcuni esempi possono aiutare a chiarire meglio il concetto. Si consideri il seguente integrale:

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{x} dx \quad (2.51)$$

che non esiste (non è integrabile) secondo Riemann nell'intervallo considerato, poiché la funzione $f(x) = \frac{1}{x}$ ha un asintoto verticale in $x = 0$. Tuttavia si può procedere lo stesso a calcolare l'integrale facendo:

$$\begin{aligned} PV \left(\int_{-1}^1 \frac{1}{x} dx \right) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-1}^{-\varepsilon} \frac{1}{x} dx + \int_{\varepsilon}^1 \frac{1}{x} dx \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\ln|x| \Big|_{-1}^{-\varepsilon} + \ln|x| \Big|_{\varepsilon}^1 \right) \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\ln \varepsilon - \ln \varepsilon) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.52)$$

A questo punto, immaginiamo di voler eseguire numericamente l'integrale:

$$PV \int_a^b \frac{g(x)}{x-c} dx, \quad \text{dove } c \in [a, b]. \quad (2.53)$$

Si potrebbe pensare di procedere suddividendo l'intervallo di integrazione in due sottointervalli come segue:

$$\int_a^c \frac{g(x)}{x-c} dx + \int_c^b \frac{g(x)}{x-c} dx \quad (2.54)$$

ma, a patto che la funzione $g(x)$ non sia proporzionale a $(x-c)$, gli integrali appena scritti non esistono dal momento che la funzione integranda diverge nell'estremo c con velocità $1/x$. Perciò è necessario procedere diversamente. Ricorrendo alla definizione di valore principale si arriva a scrivere:

$$PV \int_a^b \frac{g(x)}{x-c} dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_a^{c-\varepsilon} \frac{g(x)}{x-c} dx + \int_{c+\varepsilon}^b \frac{g(x)}{x-c} dx \quad (2.55)$$

Tuttavia, volendo risolvere l'integrale per via numerica al calcolatore, non risulta possibile svolgere il limite. Perciò si procede secondo i seguenti step:

- 1) si fissa una certa precisione per il risultato numerico;

- 2) si considera un parametro ε_1 (piccolo a piacere) e si svolgono i due integrali;
- 3) si considera un $\varepsilon_2 < \varepsilon_1$ e si svolgono nuovamente gli integrali;
- 4) si considera la differenza tra i risultati ottenuti con ε_1 e con ε_2 ;
- 5) se è minore della precisione scelta si accetta il valore più preciso (calcolato con ε_2) altrimenti si ripete il procedimento con un $\varepsilon_3 < \varepsilon_2$.

Mano a mano che si scelgono dei valori di ε più piccoli, il tempo di calcolo richiesto per calcolare i due integrali aumenta in quanto ci si sta avvicinando alla singolarità: poiché la funzione integranda diventa sempre più variabile, sono necessarie sempre più chiamate dell'algoritmo di integrazione per raggiungere la precisione richiesta.

Tuttavia, con questo metodo si ottiene una precisione sul risultato finale sempre inferiore a quella con cui si calcolano i due integrali da sommare. Questo è dovuto al fatto che, essendo vicini ad una singolarità, i valori dei singoli integrali sono molto grandi e, dato che hanno segno opposto, nel momento in cui si sommano si ha una parziale compensazione. Si noti che aumentando la precisione occorre scegliere un adeguato valore di ε , dal momento che il numero di chiamate diventerà elevato.

Infine, è possibile migliorare il metodo precedente usando quello delle *antithetic variables* che consiste nel prendere una coppia di punti scelti in modo che siano simmetrici rispetto all'asintoto. Se prima si faceva somma di due integrali, ora si calcola un solo integrale e perciò la compensazione non è più a livello di integrale, ma di funzione integranda. Questo metodo permette di trattare valori più piccoli (rispetto al caso della somma di due integrali) con un minor numero di chiamate.

Per poter applicare il metodo è necessario sapere bene dove sia la singolarità, per potersi mettere a cavallo in modo simmetrico.

2.7 Algoritmo di integrazione di Gauss-Legendre

Come già visto, con i metodi di integrazione del trapezio e di Simpson si riescono ad integrare esattamente, con un numero finito di punti, funzioni polinomiali fino al primo e al terzo grado rispettivamente. L'algoritmo di Gauss è invece un algoritmo che permette di integrare esattamente con n punti funzioni polinomiali fino al grado $2n - 1$.

Consideriamo una generica funzione f ; vogliamo scrivere il suo integrale nell'intervallo $[-1,1]$ come:

$$I = \int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (2.56)$$

dove ω_i sono dei pesi fissati automaticamente dalla scelta di n .

Per trovare i pesi ω_i e i punti x_i consideriamo il caso in cui la funzione f sia un polinomio qualsiasi di grado $2n - 1$, ovvero:

$$f(x) = p_{2n-1}(x)$$

Per prima cosa utilizziamo il polinomio di Legendre $P_n(x)$ di grado n per scrivere la scomposizione:

$$p_{2n-1}(x) = p_{n-1}(x) P_n(x) + q_{n-1}(x) \quad (2.57)$$

dove $p_{n-1}(x)$ e $q_{n-1}(x)$ sono rispettivamente i polinomi quoziente e resto. L'integrale da calcolare diventa quindi:

$$I = \int_{-1}^1 [p_{n-1}(x) P_n(x) + q_{n-1}(x)] dx \quad (2.58)$$

Sfruttando la proprietà dei polinomi di Legendre

$$\int_{-1}^1 P_i(x) P_j(x) dx = \frac{2}{2j+1} \delta_{ij} \quad \text{con} \quad \delta_{i=j} = 1, \quad \delta_{i \neq j} = 0 \quad (2.59)$$

e scomponendo $p_{n-1}(x)$ in polinomi di Legendre come:

$$p_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k P_k(x) \quad (2.60)$$

si ha che:

$$\int_{-1}^1 p_{n-1}(x) P_n(x) dx = \int_{-1}^1 \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k P_k(x) P_n(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k \int_{-1}^1 P_k(x) P_n(x) dx = \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k \frac{2}{2k+1} \delta_{kn} = 0 \quad (2.61)$$

Perciò risulta:

$$I = \int_{-1}^1 q_{n-1}(x) dx \quad (2.62)$$

A questo punto si decompone anche $q_{n-1}(x)$ in polinomi di Legendre:

$$q_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k P_k(x) \quad (2.63)$$

e si sostituisce. Tenendo anche conto che $P_0(x) = 1$ si ottiene:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-1}^1 dx \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k P_k(x) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \int_{-1}^1 P_k(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \int_{-1}^1 P_0(x) P_k(x) dx \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \frac{2}{2k+1} \delta_{0k} \\ &= 2\beta_0 \end{aligned} \quad (2.64)$$

L'integrale I può quindi essere calcolato esattamente a patto di trovare il coefficiente β_0 della scomposizione in polinomi di Legendre del polinomio q_{n-1} . Indicando con x_i gli n punti in cui $P_n(x)$ si annulla, vale la relazione puntuale:

$$p_{2n-1}(x_i) = q_{n-1}(x_i) \quad \forall x_i \quad (2.65)$$

Questo equivale al sistema di equazioni lineari dato da:

$$p_{2n-1}(x_i) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k P_k(x_i) \quad (2.66)$$

che può essere scritta in forma matriciale come:

$$p_i = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k P_{ki} \quad (2.67)$$

Invertendo il sistema si trova:

$$\beta_k = \sum_{i=1}^n (P^{-1})_{ik} p_i \quad (2.68)$$

dove $(P^{-1})_{ik}$ è l'inverso della matrice P_{ik} . Si ottiene quindi:

$$I = 2\beta_0 = 2 \sum_{i=1}^n (P^{-1})_{i0} p_i = \sum_{i=1}^n (2P^{-1})_{i0} p_{2n-1}(x_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (2.69)$$

ovvero una relazione della forma data dall'equazione (2.56). L'algoritmo fornisce quindi l'integrale esatto per qualsiasi funzione polinomiale di grado $2n - 1$ usando solamente n punti. Nel caso in cui la funzione f non sia un polinomio, ciò che si deve fare è cercare un polinomio $p_{2n-1}(x)$ che approssimi bene la funzione f in tutto l'intervallo $[-1, 1]$.

Una volta identificato tale polinomio si costruisce la matrice P_{ik} , la si inverte e si calcolano i pesi ω_i come:

$$\omega_i = (2P^{-1})_{i0} \quad (2.70)$$

e si stima l'integrale come:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (2.71)$$

dove x_i sono gli zeri del polinomio di Legendre $P_n(x)$. Questo metodo tuttavia non permette di stimare in alcun modo l'errore che si commette nella valutazione dell'integrale perchè questo dipende essenzialmente da quanto bene p_{2n-1} approssimi f .

Normalmente per trovare il miglior polinomio approssimante la funzione da integrare si ricorre al metodo dei minimi quadrati andando a variare i coefficienti del polinomio fino a minimizzare la distanza tra esso e la funzione f .

L'algoritmo di Gauss-Legendre è un caso particolare del più generale algoritmo di Gauss, con il quale si scrive:

$$\int_b^a W(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (2.72)$$

A seconda dei valori degli estremi di integrazione a e b e del tipo di funzione W , i pesi ω_i si calcolano come nel caso dell'algoritmo di Gauss-Legendre andando però ad utilizzare un diverso set completo di polinomi ortogonali. I punti x_i sono sempre i punti in cui il polinomio n -esimo di tale set si annulla. I set di polinomi da utilizzare per alcune classi particolari di funzioni sono i seguenti:

- $\int_{-1}^1 f(x) dx \longrightarrow$ polinomi di Legendre
- $\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \longrightarrow$ polinomi di Čebyšëv
- $\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} f(x) dx \longrightarrow$ polinomi di Laguerre
- $\int_{-\infty}^\infty e^{-x^2} f(x) dx \longrightarrow$ polinomi di Hermite
- $\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta f(x) dx \longrightarrow$ polinomi di Jacobi

Nel caso in cui si voglia sfruttare il metodo di Gauss per integrare una funzione che non rientra in queste classi, bisogna costruire caso per caso un set completo di polinomi ortogonali che si adattano al problema in esame. Per fare questo si ricorre al metodo di ortogonalizzazione di Gram-Schmidt.

Capitolo 3

Simulazioni Monte Carlo

Di seguito menzioneremo alcune prime significative applicazioni del metodo Monte Carlo, fondamentali per comprendere lo sviluppo di questo approccio risolutivo e la sua naturale estensione ai problemi di simulazione.

3.1 Generazione di numeri random

Per la buona riuscita di un calcolo con metodo Monte Carlo è essenziale che i numeri casuali siano generati con distribuzione uniforme nell'intervallo desiderato. Ottenere numeri casuali sarebbe possibile soltanto connettendo il calcolatore ad un apparecchio che misuri un fenomeno stocastico della natura, ad esempio un contatore Geiger posto in prossimità di una sorgente radioattiva o un voltmetro che misuri rumore elettrico privo di segnali periodici: tale soluzione non è solamente poco pratica ma anche sconsigliata, poiché in diverse occasioni, soprattutto in fase di debugging dei software di simulazione, può essere utile risalire a quali valori casuali sono stati elaborati dall'algoritmo. I calcolatori elettronici, nell'impossibilità di generare numeri casuali, includono dei "Pseudo-random number generators" (pRNG), algoritmi che generano ogni X_{n+1} -esimo numero in funzione dei precedenti X_n .

$$X_{n+1} = f(X_n, X_{n-1}, X_{n-2}, \dots, X_0) \quad (3.1)$$

Il numero di partenza X_0 è chiamato *seed* e un pRNG produrrà sempre la stessa sequenza di numeri pseudocasuali se non si cambia seed da un'esecuzione alla successiva. Il primo pRNG implementato su calcolatori elettronici fu il Generatore Lineare Congruenziale (LGC), di immediata comprensione e computazionalmente molto leggero:

$$X_{n+1} = (a \cdot X_n + c) \mod m \quad (3.2)$$

Un'opportuna scelta dei parametri a , c ed m permette di generare, come visualizzato graficamente in Figura 3.1, numeri pseudocasuali sufficientemente scorrelati da essere utili per la maggior parte delle applicazioni più semplici, in particolare è necessario scegliere un valore di m molto grande, poiché le sequenze generate da LGC sono periodiche con periodo circa uguale ad m .

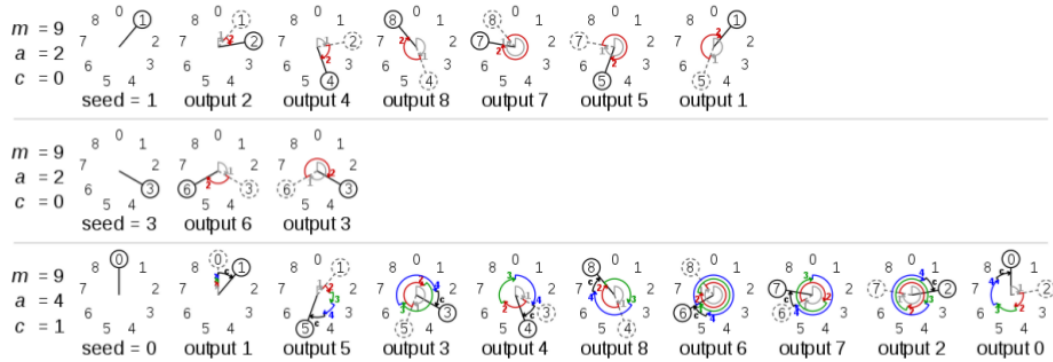


Figura 3.1

3.2 L'ago di Buffon

Il problema dell'ago di Buffon fu posto nel 1777 da Georges-Louis Leclerc, conte di Buffon, come esercizio di calcolo probabilistico: si chiede di calcolare la probabilità che un ago lasciato cadere su un tappeto con motivo a strisce parallele ha di intersecare la linea di separazione tra due strisce. Utilizzando la geometria integrale emerge una dipendenza del risultato da π , rendendo questo esperimento una valida tecnica Monte Carlo per un suo calcolo approssimato. Chiamiamo l la lunghezza dell'ago, D la distanza tra due linee di separazione e limitiamoci a considerare il caso, più interessante, in cui $l \leq D$: l'ago rappresentato in Figura 3.2 toccherebbe la linea di separazione superiore se fosse verificata

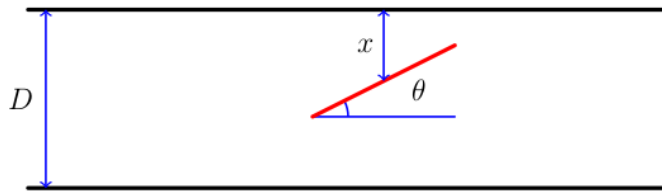


Figura 3.2

la condizione $x \leq \frac{l}{2} \sin \theta$, dove x rappresenta la distanza del centro dell'ago dalla linea e θ l'angolo acuto formato dall'ago con la parallela alla linea. La densità di probabilità della distanza x compresa tra 0 e $\frac{D}{2}$ e quella dell'angolo θ compreso tra 0 e $\frac{\pi}{2}$ sono rispettivamente:

$$\frac{2}{D} dx \quad , \quad \frac{2}{\pi} d\theta \quad (3.3)$$

ed essendo x e θ due variabili aleatorie indipendenti, la densità di probabilità congiunta si fattorizza come prodotto delle due densità di probabilità:

$$p(x, \theta) dx d\theta = \frac{4}{D\pi} dx d\theta \quad (3.4)$$

La soluzione al problema di Buffon si ottiene integrando la densità di probabilità congiunta:

$$p = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{l \sin \theta}{2}} \frac{4}{\pi D} dx d\theta = \frac{2l}{\pi D} \quad (3.5)$$

Ribaltando il risultato si giunge ad una definizione di π dipendente dalla probabilità p non nota a priori ma che può essere ottenuta come probabilità frequentista attraverso

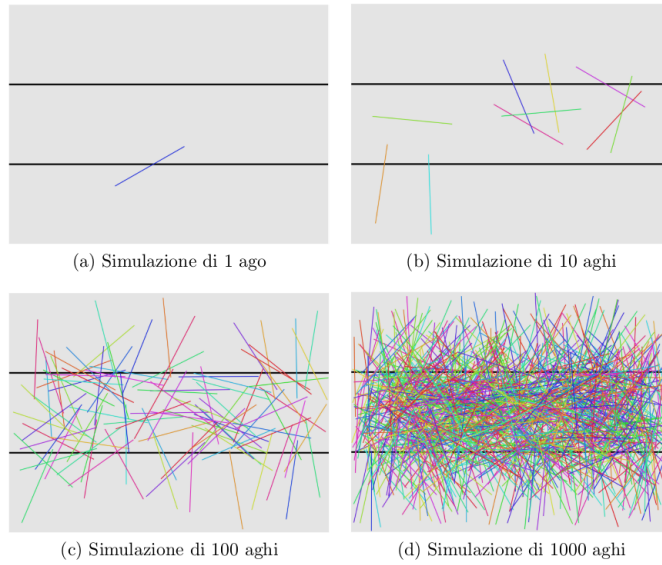


Figura 3.3

esperimenti reali o simulazioni, avendo cura di generare dei valori casuali di x e θ distribuiti uniformemente sui due intervalli di integrazione; ad un numero maggiore di lanci eseguiti corrisponderà una migliore approssimazione del risultato:

$$\pi \sim \frac{2l}{PD} \quad (3.6)$$

Poiché la probabilità considerata è binomiale, il numero medio di intersezioni è:

$$\langle \text{numero intersezioni} \rangle = \langle n \rangle = Np. \quad (3.7)$$

La varianza risulta pertanto:

$$\sigma^2(n) = Np(1-p) \quad (3.8)$$

$$\sigma^2\left(\frac{n}{N}\right) = \frac{1}{N^2}\sigma^2(n) = \frac{Np(1-p)}{N^2} = \frac{p(1-p)}{N} \quad (3.9)$$

La deviazione standard è definita come:

$$\sigma = \Delta p = \sqrt{\frac{p(1-p)}{N}} \quad (3.10)$$

È importante osservare che nel metodo Monte Carlo l'errore scala come $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

3.3 Calcolo di integrali col Metodo Monte Carlo

Si consideri una funzione $f(x)$ e si calcoli l'integrale:

$$\int_0^1 f(x)dx \quad (3.11)$$

attraverso la generazione di numeri casuali.

L'obiettivo è quello di ottenere una sequenza di numeri casuali $\{\xi_i\}$ distribuiti secondo

la funzione f ; per far questo possiamo partire da una generica sequenza $\{x_i\}$ distribuita secondo la distribuzione di probabilità $p(x)$. Applicando la f ad ogni punto della sequenza otteniamo $\{f(x_i)\}$. Chiamando per semplicità $\xi_i = f(x_i)$, questa sequenza è distribuita secondo la distribuzione di probabilità:

$$p(\xi) = \int_0^1 p(x) \delta(f(x) - \xi) dx \quad (3.12)$$

dove la δ di Dirac serve ad imporre la condizione $\xi_i = f(x_i)$. La distribuzione $p(\xi)$ risulta normalizzata per ogni distribuzione di probabilità $p(x)$; infatti si ha:

$$\int p(\xi) d\xi = \int d\xi \int_0^1 dx p(x) \delta(f(x) - \xi) = \int_0^1 dx p(x) \int d\xi \delta(f(x) - \xi) = \int_0^1 p(x) dx = 1 \quad (3.13)$$

Se scegliamo gli x distribuiti uniformemente, ovvero $p(x) = 1$, si ha che l'integrale che vogliamo calcolare risulta il valor medio della variabile ξ :

$$\langle \xi \rangle = \int \xi p(\xi) d\xi = \int d\xi \int_0^1 \xi \delta(f(x) - \xi) dx = \int_0^1 dx \int d\xi \xi \delta(f(x) - \xi) = \int_0^1 f(x) dx. \quad (3.14)$$

Dalla statistica, sappiamo che uno dei modi per valutare approssimativamente $\langle \xi \rangle$ è quello di calcolare la media di N valori $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_N)$ con x_1, x_2, \dots, x_N scelti casualmente ed in modo uniforme nell'intervallo $[0,1]$. Questa approssimazione fornisce lo stimatore φ :

$$\varphi = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \simeq \int_0^1 f(x) dx \quad (3.15)$$

Calcoliamo ora la varianza dello stimatore:

$$\sigma^2(\varphi) = \text{Var} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right] = \frac{1}{N^2} \text{Var} \left[\sum_{i=1}^N f(x_i) \right] = \frac{1}{N} \text{Var}[f(x_i)] = \frac{\sigma^2(f(x_i))}{N} \quad (3.16)$$

La deviazione standard risulta:

$$\sigma(\varphi) = \frac{\sigma(f(x_i))}{\sqrt{N}} \quad (3.17)$$

Per funzioni ad una dimensione, il calcolo Monte Carlo risulta sempre meno efficiente degli altri metodi di approssimazione numerica la cui velocità di convergenza va come N^{-k} con $k \geq 2$. Nel caso multidimensionale, tuttavia, l'errore del Monte Carlo è indipendente dalla dimensionalità d dell'integrale mentre la precisione delle altre tecniche numeriche varia come $N^{-k/d}$ con $k \geq 2$ (un procedimento che richiede N punti in una dimensione, ne richiederà, a parità di precisione, N^2 in due dimensioni, N^3 in tre dimensioni e così via).

3.4 Calcolo del π col metodo Monte Carlo

Nella geometria piana π viene definito come il rapporto tra la lunghezza della circonferenza e quella del suo diametro, o anche come l'area di un cerchio di raggio 1.

Si consideri pertanto un cerchio inscritto in un quadrato di raggio 1, come rappresentato in Figura 3.4.

Se si generano all'interno del quadrato N punti casuali uniformemente distribuiti $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$, e si conta il numero N_S di successi, vale a dire il numero di volte

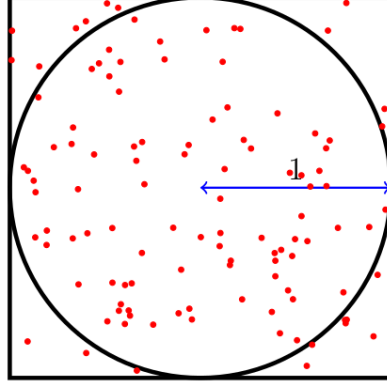


Figura 3.4

in cui un punto (x_i, y_i) cade all'interno del cerchio, attraverso il rapporto N_S/N si ottiene una valutazione approssimata di π :

$$\pi = \frac{N_S}{N} \cdot A_{quadrato} = 4 \frac{N_S}{N} \quad (3.18)$$

Per ricavare l'errore ad esso associato, basta osservare che N_S segue una distribuzione binomiale di media $Np = N\pi$ e varianza $Np(1-p)$; otteniamo quindi:

$$\sigma^2 \left(\frac{N_S}{N} \right) = \frac{1}{N^2} \cdot \sigma^2(N_S) = \frac{1}{N^2} \cdot Np(1-p) = \frac{p(1-p)}{N} \quad (3.19)$$

con $p = \frac{N_S}{N}$. La deviazione standard risulta pertanto:

$$\sigma \left(\frac{N_S}{N} \right) = \sqrt{\frac{p(1-p)}{N}} = \sqrt{\frac{\frac{N_S}{N} \left(1 - \frac{N_S}{N} \right)}{N}}. \quad (3.20)$$

3.5 Metodo di riduzione della varianza

Consideriamo nuovamente una funzione come quella in Figura 3.5. Come nel caso di integrazione col metodo deterministico, le tecniche di riduzione della varianza possono essere applicate anche al calcolo Monte Carlo a patto di usare una distribuzione degli x_i non uniforme. Consideriamo i punti x_i distribuiti secondo una generica $p(x_i)$. L'analogo della formula (3.14) diventa ora:

$$\begin{aligned} \langle \xi \rangle &= \int \xi p(\xi) d\xi \\ &= \int d\xi \int \xi p(x) \delta(f(x) - \xi) dx \\ &= \int dx p(x) \int d\xi \xi \delta(f(x) - \xi) \\ &= \int p(x) f(x) dx \\ &= \frac{1}{N} \sum_i f(x_i) \end{aligned} \quad (3.21)$$

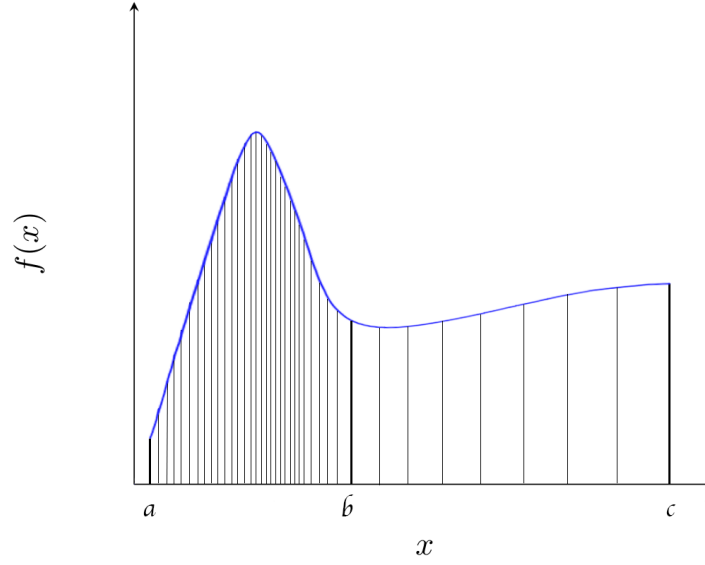


Figura 3.5: Funzione con diversi gradi di varianza e generazione non uniforme di punti nell'intervallo di integrazione.

L'ultimo integrale presente nella formula (3.21) non è però quello desiderato; siamo infatti interessati all'integrale:

$$\int f(x)dx. \quad (3.22)$$

Per ottenere quest'integrale è necessario non considerare $\langle \xi \rangle$ bensì $\left\langle \frac{\xi}{p} \right\rangle$. Infatti:

$$\left\langle \frac{\xi}{p} \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_i \frac{f(x_i)}{p(x_i)} = \varphi \quad (3.23)$$

Di conseguenza la varianza di φ risulta essere ridotta di un fattore $\frac{1}{p}$ rispetto alla varianza riportata nell'equazione (3.17) appartenente al caso di distribuzione di probabilità uniforme:

$$\sigma^2(\varphi) = \frac{1}{N} \sigma^2 \left(\frac{f(x_i)}{p(x_i)} \right) \quad (3.24)$$

3.6 Teorema della cumulativa

La distribuzione di una variabile aleatoria viene solitamente espressa in termini della funzione cumulativa o di ripartizione, che dà la probabilità che la variabile aleatoria assuma valori minori o uguali di un certo valore assegnato x . Se X è una variabile aleatoria, continua o discreta, la funzione cumulativa o di ripartizione:

$$C(X) = P\{X \leq x\} \quad (3.25)$$

rappresenta la probabilità che X assuma un valore non superiore ad un valore assegnato x . Sia $p(x)$ una generica distribuzione di probabilità e sia $C(x)$ la sua funzione cumulativa:

$$C(X) = \int_{-\infty}^x p(x') dx'. \quad (3.26)$$

La distribuzione di probabilità della funzione cumulativa risulta essere:

$$p(C) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx p(x) \delta \left(\int_{-\infty}^x p(x') dx' - C \right) \quad (3.27)$$

Facendo variare x si vede che:

- per $x = -\infty$ allora $C = 0$
- per $x = +\infty$ allora $C = 1$.

Da queste considerazioni si nota che la distribuzione della cumulativa varia tra 0 e 1 ed è normalizzata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1 \quad (3.28)$$

Chiamiamo:

$$g(x) = \int_{-\infty}^x p(x') dx' - C \quad (3.29)$$

per le proprietà della δ di Dirac composta con una funzione si ha che:

$$\delta(g(x)) = \frac{\delta(x - \bar{x})}{|g'(\bar{x})|} \quad \text{con} \quad g'(\bar{x}) = p(\bar{x}) \quad (3.30)$$

L'equazione (3.27) diventa pertanto:

$$p(C) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx p(x) \frac{\delta(x - \bar{x})}{p(\bar{x})} = \frac{p(\bar{x})}{p(\bar{x})} = 1 \quad (3.31)$$

e dimostra che la variabile aleatoria cumulativa C è uniforme¹ in $[0,1]$ qualunque sia la distribuzione $p(x)$ di partenza. Se l'integrale (3.26) è noto per via analitica, allora i valori della variabile cumulativa C sono esprimibili come una funzione nota $c = F(x)$. Se questa funzione è invertibile, allora la variabile:

$$X = F^{-1}(C) \quad (3.32)$$

ha densità $p(x)$. Se si dispone di un generatore di variabili uniformi in $[0, 1]$, si possono generare variabili aventi una densità di probabilità qualsiasi utilizzando l'equazione:

$$X = F^{-1}(\text{random}). \quad (3.33)$$

Per generare numeri $\{x_i\}$ distribuiti secondo la densità di probabilità $p(x)$ occorre dunque:

- calcolare la normalizzazione N ;
- generare numeri $0 \leq \xi_i \leq 1$ e risolvere rispetto a x l'integrale:

$$\xi_i = C = \frac{1}{N} \int_a^{x_i} p(x') dx' \quad \longrightarrow \quad \xi_i N = CN = \int_a^{x_i} p(x') dx' \quad (3.34)$$

Sia $G(x)$ la primitiva di $p(x')$:

$$CN = G(x_i) - G(a) \quad \longrightarrow \quad G(x_i) = G(a) + CN \quad (3.35)$$

$$\implies x_i = G^{-1}(G(a) + CN) \quad (3.36)$$

I numeri x_i sono distribuiti secondo la densità di probabilità $p(x)$.

¹La distribuzione continua uniforme è una distribuzione di probabilità continua che è uniforme su un insieme, ovvero che attribuisce la stessa probabilità a tutti i punti appartenenti ad un dato intervallo $[a,b]$ contenuto nell'insieme. Una variabile aleatoria X continua è uniforme quando ha una densità di probabilità costante.

3.7 Generazione di numeri distribuiti gaussianamente

Per generare dei punti distribuiti in modo gaussiano, si possono applicare tre diversi metodi:

- metodo Box&Müller;
- metodo Hit or Miss;
- somma di numeri random.

3.7.1 Metodo Box&Müller

Contrariamente a quel che si potrebbe supporre, è più facile generare una coppia di variabili gaussiane indipendenti piuttosto che generarne una sola. Si considerino due numeri random uniformi x_1, x_2 e si vogliano generare due numeri y_1, y_2 distribuiti gaussianamente. Questo è possibile applicando la legge di trasformazione:

$$y_1 = \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2) \quad (3.37)$$

$$y_2 = \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2) \quad (3.38)$$

che consente di scrivere le nuove variabili in funzione delle vecchie:

$$y_1 = y_1(x_1, x_2) \quad (3.39)$$

$$y_2 = y_2(x_1, x_2) \quad (3.40)$$

La distribuzione di probabilità nelle nuove variabili sarà il prodotto tra lo Jacobiano della trasformazione e la vecchia distribuzione di probabilità:

$$p(y_1, y_2) = \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| p(x_1, x_2) \quad (3.41)$$

Per calcolare lo Jacobiano, ricaviamo ora l'espressione analitica di x_1 e x_2 in funzione di y_1 e y_2 .

$$y_1^2 + y_2^2 = -2 \ln x_1 \quad \longrightarrow \quad x_1 = e^{-\frac{y_1^2 + y_2^2}{2}} \quad (3.42)$$

$$\frac{y_1}{y_2} = \tan(2\pi x_2) \quad \longrightarrow \quad x_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{y_1}{y_2}\right) \quad (3.43)$$

È ora possibile calcolare lo Jacobiano:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial y_1} &= -x_1 y_1 \\ \frac{\partial x_1}{\partial y_2} &= -x_1 y_2 \\ \frac{\partial x_2}{\partial y_1} &= -\frac{1}{2\pi} \frac{y_2}{y_1^2 + y_2^2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial y_2} &= \frac{1}{2\pi} \frac{y_1}{y_1^2 + y_2^2} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Lo Jacobiano risulta pertanto:

$$\left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{y_1^2 + y_2^2}{2}}. \quad (3.45)$$

Ricordo che $p(x_1, x_2) = 1$ (perchè è una distribuzione uniforme), la distribuzione di probabilità nelle nuove variabili risulta:

$$p(y_1, y_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_1^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_2^2}{2}} \quad (3.46)$$

ed è fattorizzabile in y_1 e y_2 . Le trasformazioni (3.37)-(3.38) non sono lineari e quindi partendo da $x_1, x_2 \in [0,1]$ si ottengono $y_1, y_2 \in]-\infty, +\infty[$ e distribuite gaussianamente.

3.7.2 Metodo Hit or Miss

Un secondo modo per generare numeri distribuiti in modo gaussiano (o secondo una qualsiasi altra distribuzione) consiste nell'utilizzare il cosiddetto metodo Hit or Miss. Supponiamo per esempio di voler generare numeri casuali che seguono la distribuzione gaussiana standard (centrata nell'origine e con deviazione standard unitaria):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (3.47)$$

nell'intervallo $[-a, a]$. Per far ciò occorre generare delle coppie di punti (x, y) distribuiti uniformemente negli intervalli $[-a, a]$ e $[0, 1/\sqrt{2\pi}]$ rispettivamente. Se con RND si indica un qualsiasi algoritmo che genera numeri pseudocasuali distribuiti uniformemente nell'intervallo $[0, 1]$, i numeri x e y si possono ottenere come:

$$\boxed{x = 2 a RND - a} \quad (3.48)$$

$$\boxed{y = \frac{RND}{\sqrt{2\pi}}} \quad (3.49)$$

A questo punto si accetta il punto x se è verificata la condizione $y < f(x)$ e lo si scarta in caso contrario. La sequenza di punti x così ottenuta seguirà quindi la distribuzione data dalla funzione f . Poichè in questo caso la funzione f ha come valore massimo $1/\sqrt{2\pi}$, per ottimizzare i tempi di calcolo, risulta conveniente generare i numeri y nell'intervallo $(0, 1/\sqrt{2\pi})$: scegliendo un intervallo più ampio saranno meno i punti che soddisfano la condizione (3.49) e si otterranno quindi meno punti x . Scegliendo un intervallo più stretto, invece, gli y sono generati in un intervallo più stretto dell'ampiezza della f e allora esisterà un intervallo di x per cui $f(x) > y$ qualunque sia l' y generato. Questo significa che la condizione di accettazione è sempre verificata e perciò nel momento in cui generiamo un x in tale intervallo lo accetteremo sempre indipendentemente dal valore di y . Questo vuol dire che la probabilità di accettare gli x in quell'intervallo non è data dalla f ma è la distribuzione uniforme 1.

3.7.3 Somma di numeri random

Il Teorema del Limite Centrale afferma che una qualsiasi variabile aleatoria X_n , ottenuta come combinazione lineare di n variabili aleatorie indipendenti Y_i aventi tutte varianza

finita e dello stesso ordine di grandezza, converge alla distribuzione gaussiana quando $n \rightarrow \infty$. Poiché la convergenza è molto rapida, il teorema risulta valido con ottima approssimazione già per $n > 10$.

Grazie a questo risultato è possibile quindi ottenere numeri distribuiti gaussianamente semplicemente sommando tra loro dei numeri distribuiti uniformemente in $[0,1]$. Dato che la somma di n numeri compresi tra 0 e 1 si distribuisce intorno al valore $n/2$ con varianza $\sigma^2 = n/12$, per ricondursi alla gaussiana standard bisogna utilizzare l'algoritmo:

$$x = \frac{y - \frac{n}{2}}{\sqrt{\frac{n}{12}}} \quad (3.50)$$

dove:

$$y = \sum_{i=1}^n RND_i \quad (3.51)$$

Capitolo 4

Ricerca degli zeri di una funzione

In matematica si presentano spesso problemi che richiedono di calcolare uno zero di una funzione di variabile reale $f(x)$ o, secondo un'espressione equivalente, trovare una radice reale di un'equazione della forma $f(x) = 0$. La risoluzione del problema dipende strettamente dalla forma della funzione f : ad esempio, se essa è un polinomio o una funzione razionale, esistono, per i gradi più bassi, formule che permettono di determinare in modo preciso tutti gli zeri, senza approssimazioni. In tutti gli altri casi, come ad esempio per una funzione esponenziale o trigonometrica (più in generale trascendente) ma anche per un polinomio di grado maggiore di 4, a parte alcuni casi elementari risolvibili attraverso le definizioni, non esistono metodi algebrici per ricavare con esattezza i valori degli zeri. Per questo tipo di problema si preferisce parlare di algoritmi per la soluzione di equazioni, sottintendendo che questi metodi possono applicarsi sia ad equazioni lineari che ad equazioni non lineari.

4.1 Algoritmo di bisezione

In analisi numerica il metodo di bisezione (o algoritmo dicotomico) è il metodo numerico più semplice per trovare le radici di una funzione. La sua efficienza è scarsa e presenta lo svantaggio di richiedere ipotesi particolarmente restrittive: gli zeri della funzione devono essere distinti e finiti e la funzione non deve avere asintoti. Questo metodo ha però il notevole pregio di essere stabile in ogni occasione e quindi di garantire sempre la buona riuscita dell'operazione.

Data l'equazione $f(x) = 0$ definita e continua in un intervallo $[a, b]$, tale che $f(a) \cdot f(b) < 0$, è allora possibile calcolarne un'approssimazione in $[a, b]$ grazie al teorema degli zeri¹. Si procede dividendo l'intervallo in due parti eguali e calcolando il valore della funzione nel punto medio di ascissa $\frac{a+b}{2} = c$. Se risulta $f(c) = 0$ allora c è la radice cercata; altrimenti, tra i due intervalli $[a, c]$ e $[c, b]$ si sceglie quello ai cui estremi la funzione assume valori di segno opposto. Si ripete per questo intervallo il procedimento di dimezzamento. Procedendo in questo modo si ottiene una successione di intervalli ognuno incluso nel precedente. Questi intervalli hanno come ampiezze:

$$b_n - a_n = \frac{b - a}{2^n} \quad \text{per } n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (4.1)$$

¹Il teorema degli zeri per le funzioni continue, assicura l'esistenza di almeno una radice delle funzioni continue reali che assumano segni opposti ai due estremi di un intervallo

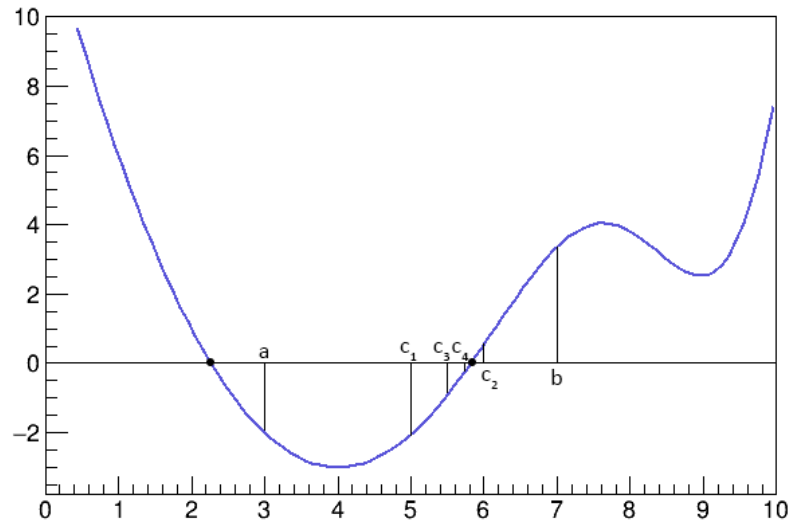


Figura 4.1: Esempio di applicazione del metodo di bisezione per individuare lo zero della funzione nell'intervallo $[a, b]$.

I valori a_i sono valori approssimati per difetto della radice, i valori di b_i sono invece i valori della radice approssimati per eccesso. Gli a_n formano una successione crescente limitata ed i b_n formano una successione decrescente limitata. Le due successioni ammettono lo stesso limite che è la radice dell'equazione esaminata. Come approssimazione della radice α si considera il punto medio degli intervalli, cioè:

$$c_n = \frac{a_n + b_n}{2} \quad \text{per } n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (4.2)$$

L'algoritmo viene arrestato quando $f(c_n)$ è abbastanza vicino a 0 e/o quando l'ampiezza dell'intervallo $[a_n, b_n]$ è inferiore ad una certa tolleranza ε . La stima del numero di passi/iterazioni che si compiono è data da:

$$n = \log_2 \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon}. \quad (4.3)$$

4.2 Algoritmo della secante

In matematica, e in particolare in analisi numerica, il metodo delle secanti (o metodo delle secanti con estremi variabili) è uno dei metodi più semplici per il calcolo approssimato di una soluzione di un'equazione della forma $f(x) = 0$. Esso si applica dopo avere determinato un intervallo $[a, b]$ che contiene una sola radice.

Il metodo consiste nel trovare l'intersezione x_2 con l'asse x della retta passante per due punti iniziali $a = (x_0, f(x_0))$ e $b = (x_1, f(x_1))$. A questo punto si considera il nuovo punto $c = (x_2, f(x_2))$ e si ripete il procedimento usando i punti b e c . Si itera il procedimento usando i punti c e d , d ed e , etc.

È facile dimostrare che i punti x_n si calcolano tramite la formula ricorsiva:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n) \quad (4.4)$$

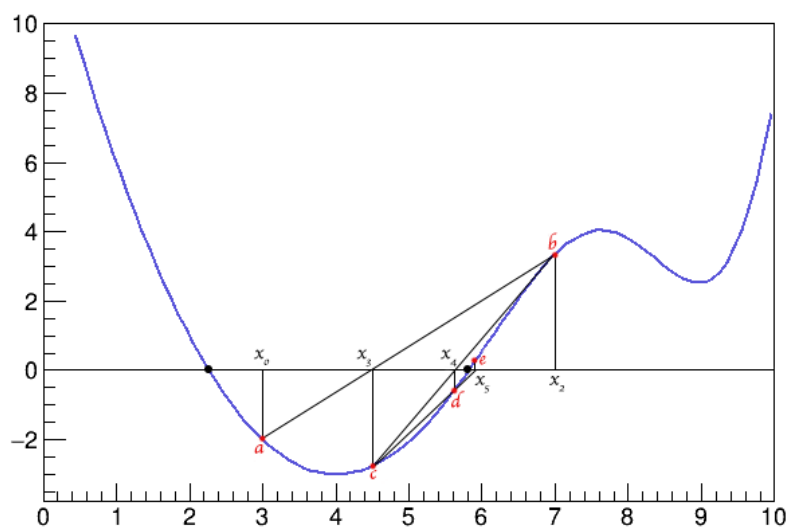


Figura 4.2: Esempio di applicazione del metodo della secante per individuare lo zero della funzione nell'intervallo $[a,b]$.

4.3 Algoritmo delle false posizioni

Questo algoritmo è l'unione dei due metodi precedenti e si basa sulla costruzione di punti attraverso il metodo della secante ma, a differenza di questo, i punti da utilizzare nelle successive iterazioni si scelgono seguendo il criterio del metodo della bisezione. Infatti, se in una determinata iterazione si utilizzano i punti a e b per trovare il punto c , alla successiva iterazione occorre tenere il punto c e scegliere tra a e b quello che ha ordinata opposta a c .

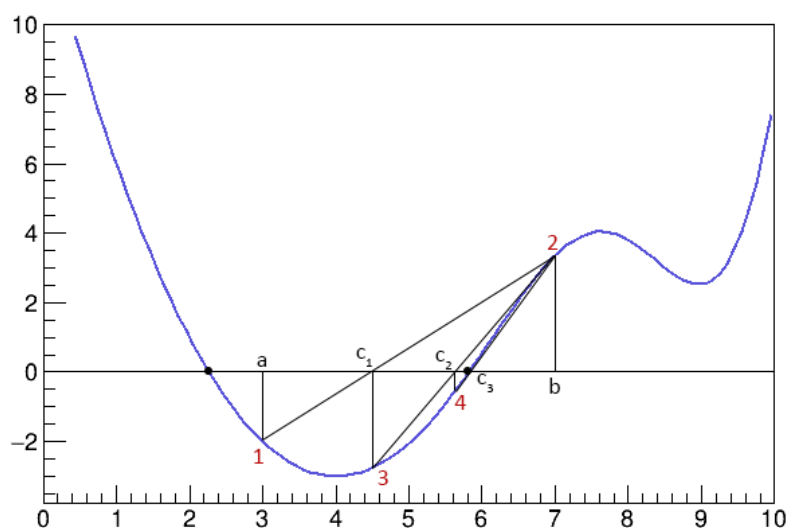


Figura 4.3: Esempio di applicazione del metodo delle false posizioni per individuare lo zero della funzione nell'intervallo $[a,b]$.

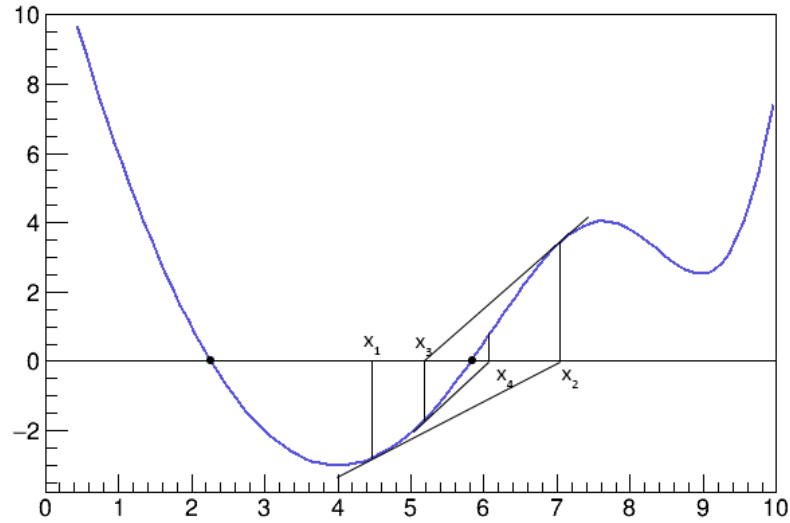


Figura 4.4: Esempio di applicazione del metodo di Newton-Raphson.

4.4 Algoritmo di Newton-Raphson

Questo metodo per il calcolo dello zero di una funzione risulta particolarmente efficace ma richiede, a differenza degli altri metodi, non solo la continuità della funzione ma anche la sua derivabilità. Partendo da una stima x_1 dello zero x_0 della funzione, il metodo richiede di calcolare l'intersezione tra l'asse x e la tangente alla curva nel punto $(x_1, f(x_1))$:

$$y = f'(x_1)(x - x_1) + f(x_1) \quad \text{equazione della tangente} \quad (4.5)$$

Poichè per definizione x_2 è l'intersezione della tangente con l'asse delle x , per $x = x_2$ risulta:

$$0 = f'(x_1)(x_2 - x_1) + f(x_1) \quad (4.6)$$

da cui si ricava

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \quad (4.7)$$

Tale intersezione x_2 risulta essere la nuova stima di x_0 . Fissata una determinata precisione ε si assume come zero della funzione x_2 se $f(x_2) < \varepsilon$. In caso contrario si ripete il procedimento andando a calcolare il punto x_3 .

Generalizzando si ottiene la formula ricorsiva:

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}} \quad (4.8)$$

Mentre negli algoritmi visti in precedenza la velocità di convergenza era lineare, questo metodo presenta una velocità di convergenza di tipo quadratico. Questo si può dimostrare sfruttando l'espansione di Taylor della f attorno a x_0 . Se x_i è la stima di x_0 al passo i -esimo possiamo scrivere $x_0 = x_i + \delta_i$ dove il δ_i può avere segno sia positivo che negativo. Dato che i δ_i sono in modulo piccoli, nello sviluppo ci si può arrestare al termine quadratico ed essendo per definizione x_0 uno zero della funzione si ha:

$$0 = f(x_0) = f(x_i + \delta_i) = f(x_i) + f'(x_i)\delta_i + \frac{1}{2}f''(x_i)\delta_i^2 \quad (4.9)$$

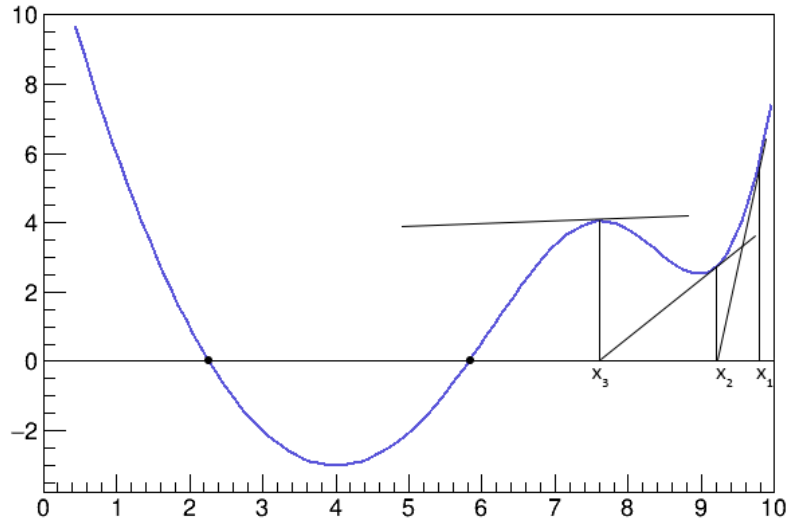


Figura 4.5: Esempio in cui il metodo di Newton-Raphson va utilizzato insieme alla bisezione per non allontanarsi troppo dalla soluzione. In questo caso, dato che il punto x_3 è molto vicino ad un punto di massimo della funzione, il punto x_4 va calcolato tramite la bisezione nell'intervallo $[x_2, x_3]$.

Dividendo per $f'(x_i)$ si ottiene:

$$-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)} - \delta_i = \frac{1}{2} \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)} \delta_i^2 \quad (4.10)$$

Sfruttando la formula (4.8) si ricava:

$$x_i - x_{i+1} + \delta_i = -\frac{1}{2} \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)} \delta_i^2 \quad (4.11)$$

Sostituendo $\delta_i = x_0 - x_i$ si ottiene:

$$x_0 - x_{i+1} = -\frac{1}{2} \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)} \delta_i^2 \quad (4.12)$$

ovvero:

$$\delta_{i+1} = -\frac{1}{2} \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)} \delta_i^2 \quad (4.13)$$

Da questa espressione si vede che la precisione della stima dello zero scala quadraticamente ad ogni iterazione.

Può capitare, se ci si avvicina ad un massimo o ad un minimo della f , che uno dei punti x_i identifichi un punto della funzione $(x_i, f(x_i))$ in cui la tangente risulta quasi parallela all'asse x . Come si vede in Figura 4.5, in questi casi il punto successivo x_{i+1} sarebbe molto lontano dallo zero della funzione. Quando capita questo, risulta pertanto conveniente utilizzare un metodo ibrido in cui quest'ultima iterazione viene sostituita da una bisezione. In questo modo ci si allontana dal punto di minimo o massimo e si può riutilizzare il metodo di Newton-Raphson senza allontanarsi troppo dal punto x_0 .

Capitolo 5

Equazioni differenziali

5.1 Equazione di oscillatore armonico

Consideriamo l'equazione di oscillatore armonico:

$$\frac{d^2\varphi(t)}{dt^2} + \omega^2 \varphi(t) = 0. \quad (5.1)$$

Per poterla risolvere numericamente, bisogna discretizzare la derivata e fornire le condizioni iniziali:

$$\begin{cases} \varphi(t_0) = \varphi_0 \\ \varphi'(t_0) = \varphi'_0 \end{cases} \quad (5.2)$$

Il metodo di Eulero, nella trattazione di evoluzione *forward*, consiste nel fare evolvere le condizioni iniziali dal tempo t_0 al generico tempo $t > t_0$. Per fare ciò si suddivide inizialmente l'intervallo (t_0, t) in n sottointervalli di ampiezza $h_i = t_{i+1} - t_i = h$.

Il modo più semplice per discretizzare la derivata seconda, consiste nell'utilizzare la formula data dall'Equazione (1.25). Sostituendo nell'equazione di oscillatore armonico si ottiene:

$$\boxed{\frac{1}{h^2} [\varphi(t_{i+1}) - 2\varphi(t_i) + \varphi(t_{i-1})] + \omega^2 \varphi(t_i) = 0} \quad (5.3)$$

Questa può essere utilizzata come formula ricorsiva per calcolare il valore della soluzione nel nuovo punto $\varphi(t_{i+1})$ a patto di conoscere la soluzione nei due punti precedenti ($\varphi(t_i)$ e $\varphi(t_{i-1})$). Per poter utilizzare questo metodo è quindi necessario avere informazioni sulla φ in due punti distinti. La prima discende direttamente dalla condizione iniziale $\varphi(t_0) = \varphi_0$, mentre la seconda, ovvero $\varphi(t_1)$, può essere ricavata dalla condizione iniziale sulla derivata prima.

Consideriamo per esempio il problema di Cauchy dato dalle seguenti condizioni iniziali:

$$\begin{cases} \varphi(t_0) = 1 \\ \varphi'(t_0) = 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

Scrivendo la φ' con la formula (1.5) di derivata prima forward si ottiene:

$$0 = \varphi'(t_0) = \frac{\varphi(t_1) - \varphi(t_0)}{h} \quad \Rightarrow \quad \varphi(t_1) = \varphi(t_0) = 1 \quad (5.5)$$

A questo punto, conoscendo $\varphi(t_0)$ e $\varphi(t_1)$ è possibile ricavare $\varphi(t_2)$ dalla formula ricorsiva (5.3). Usando $\varphi(t_1)$ e $\varphi(t_2)$ è dunque possibile trovare $\varphi(t_3)$; iterando l'algoritmo si ricostruisce esplicitamente per punti la soluzione dell'equazione differenziale nell'intervallo $[t_0, t]$. Poiché la derivata usata nell'algoritmo non è esatta ma ricavata numericamente, si ha un errore legato a questa approssimazione che cresce ad ogni passaggio a causa della propagazione degli errori.

Questo metodo è applicabile anche a equazioni differenziali di ordine superiore. Per farlo basta andare a discretizzare tutte le derivate in modo da ottenere una formula ricorsiva che, partendo dalle condizioni iniziali, permetta di ricostruire puntualmente la soluzione.

5.2 Metodo di Eulero

Il metodo di Eulero è uno dei metodi più semplici per risolvere numericamente equazioni differenziali del primo ordine. Tuttavia risulta estremamente utile anche nel caso di equazioni differenziali di ordine $n > 1$ dal momento che è sempre possibile riscrivere tali equazioni come sistema di n equazioni del primo ordine. Consideriamo quindi un'equazione differenziale al primo ordine della forma:

$$\begin{cases} \frac{dy(x)}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (5.6)$$

Utilizzando la forma forward della derivata prima, si ottiene:

$$\frac{y(x_i + h) - y(x_i)}{h} = f(x_i, y) \quad (5.7)$$

da cui si ottiene la formula ricorsiva:

$$\boxed{y(x_i + h) = y(x_i) + h f(x_i, y) + O(h^2)} \quad (5.8)$$

che permette, partendo dalla condizione iniziale, di ricostruire tutta la $y(x)$.

Per cercare di ridurre l'aumento dell'errore che si ha ad ogni passaggio, si potrebbe pensare di usare un metodo più preciso per il calcolo della derivata, come, ad esempio, quello della derivata centrale. Tuttavia la formula ricorsiva risultante non potrebbe essere risolta in quanto richiede la conoscenza della y in due punti, mentre il problema fornisce una sola condizione iniziale. Ciononostante la precisione può essere aumentata mediante il *metodo di Eulero modificato*. Consideriamo l'espansione di Taylor al second'ordine:

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + O(h^3) \quad (5.9)$$

dove $y'_n = f(x_n, y_n)$ è fornita dall'equazione differenziale mentre y''_n si ottiene come:

$$y''_n = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \quad (5.10)$$

Perciò, sostituendo nell'Equazione (5.9):

$$\boxed{y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right]_n + O(h^3)} \quad (5.11)$$

Nonostante questo metodo sfrutti sempre la derivata forward, risulta più preciso del metodo di Eulero semplice: da precisione h^2 si arriva a precisione h^3 .

¹Per meglio comprendere questa notazione, consideriamo un esempio pratico. Considerando la funzione $y(x) = e^{x^2}$, si ottiene $\frac{dy(x)}{dx} = 2x e^{x^2} = 2x y(x) = f(x, y)$.

5.3 Metodo multistep di Lagrange

Consideriamo nuovamente l'equazione differenziale:

$$\begin{cases} \frac{dy(x)}{dx} = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (5.12)$$

Il metodo di risoluzione di Lagrange consiste nell'andare a suddividere l'intervallo in cui si cerca la soluzione in tanti sottointervalli di ampiezza infinitesima $h = x_{n+1} - x_n$ e di riscrivere in ciascuno di essi l'equazione differenziale nella forma integrale:

$$\int_{y_n}^{y_{n+1}} dy = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \quad (5.13)$$

da cui si ricava:

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y) dx \quad (5.14)$$

Saper risolvere analiticamente l'integrale equivale a saper risolvere analiticamente l'equazione differenziale. Suppongo quindi di non saper trovare la soluzione analitica. La prima cosa che può venire in mente, dato che l'intervallo di integrazione ha ampiezza molto piccola, è di andare ad approssimare la funzione f con una retta:

$$f(x, y) = \frac{x - x_n}{x_{n+1} - x_n} f_{n+1} + \frac{x - x_{n+1}}{x_n - x_{n+1}} f_n \quad (5.15)$$

Questo equivale ad approssimare la f con una spezzata all'interno dell'intervallo in cui si cerca la soluzione. Sostituendo nell'Equazione (5.14) e risolvendo l'integrale si ottiene:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{f_{n+1}}{2h} h^2 + \frac{f_n}{2h} h^2 \quad (5.16)$$

Tuttavia questa formula non può essere utilizzata ricorsivamente in quanto, per calcolare y_{n+1} , bisogna usare f_{n+1} che però può essere calcolata solo se si conosce già y_{n+1} . Il problema non può quindi essere risolto utilizzando l'approssimazione (5.15).

Se invece si approssima la f come:

$$f(x, y) = \frac{x - x_{n-1}}{h} f_{n+1} - \frac{x - x_n}{h} f_n \quad (5.17)$$

si ottiene²:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2} f_n - \frac{1}{2} f_{n-1} \right) \quad (5.18)$$

che invece può essere utilizzata ricorsivamente per costruire passo a passo la soluzione. Questo metodo è detto *multistep* in quanto ogni nuovo punto viene calcolato sfruttando i due punti precedenti. Il problema di Cauchy fornisce però una sola condizione iniziale e quindi questo algoritmo si può utilizzare solamente dopo aver calcolato con un altro metodo (per esempio quello di Eulero) il valore y_1 .

Un altro algoritmo di tipo multistep consiste nell'utilizzare la definizione di derivata centrale per scrivere:

$$\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} = f(x_n, y_n) \quad \Rightarrow \quad y_{n+1} = y_{n-1} + 2h f(x_n, y_n) \quad (5.19)$$

Anche questo metodo però può essere utilizzato dopo aver calcolato in altri modi y_1 .

²In letteratura, questo metodo è chiamato "Adams-Bashforth two-step method"

5.4 Criterio di stabilità di Von-Neumann

Per risolvere numericamente un'equazione differenziale, si usano algoritmi che la approssimano: la soluzione si ottiene quindi risolvendo l'equazione approssimata.

Poiché l'equazione approssimante è affetta da errore, si possono avere due tipi di soluzione:

- *Soluzione stabile* se iterando l'algoritmo non si ha amplificazione degli errori e la soluzione che si trova sarà allora una buona stima della soluzione vera;
- *Soluzione instabile* se si ha un'amplificazione incontrollata degli errori ad ogni step successivo e la soluzione fornita dall'algoritmo tenderà a scostarsi sempre di più da quella reale.

Il criterio di Von-Neumann è un buon metodo di analisi per lo studio della stabilità della soluzione.

Consideriamo l'equazione differenziale:

$$\begin{cases} \frac{dy(x)}{dx} = f(x, y) = -y \\ y(x_0) = 1 \end{cases} \quad (5.20)$$

e applichiamo il metodo utilizzando prima l'approssimazione data dall'Equazione (5.18) e poi quella data dall'Equazione (5.19).

Algoritmo di Lagrange

Approssimiamo l'equazione da risolvere con:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right) \quad (5.21)$$

Sostituendo la soluzione di prova $y_n = A r^n$, dove A è un coefficiente di normalizzazione e r è il parametro da trovare per ottenere la soluzione corretta, si ottiene:

$$A r^{n+1} = A r^n + h \left(-\frac{3}{2}A r^n + \frac{1}{2}A r^{n-1} \right) \quad (5.22)$$

Dividendo per $A r^{n-1}$ si ricava l'equazione:

$$r^2 + \left(\frac{3}{2}h - 1 \right) r - \frac{h}{2} = 0 \quad (5.23)$$

che ha come soluzioni³:

$$r_+ \simeq 1 - h \quad \rightarrow \quad |r_+| < 1 \quad (5.24)$$

$$r_- \simeq -\frac{h}{2} \quad \rightarrow \quad |r_-| < 1 \quad (5.25)$$

Di queste due soluzioni, quella corretta viene selezionata dalla condizione iniziale.

Questa, tuttavia, a causa della precisione limitata fornita dai computer, non può essere definita esattamente; l'algoritmo fornisce in realtà una combinazione di r_+ e r_- e quindi la soluzione corretta è contaminata da quella non corretta.

La stabilità della soluzione dipende dal valore del parametro r della soluzione di prova:

³Si trascura il termine di ordine superiore ad h , ossia quello in h^2 .

- a) $r < -1$. In questo caso si avranno gli y_n positivi per n pari e negativi per n dispari (o viceversa, a seconda del segno di A). Inoltre, essendo $|r| > 1$, gli y_n assumono valori in modulo sempre più grandi. La soluzione risulta pertanto oscillante e divergente.
- b) $-1 < r < 0$. In questo caso si avranno gli y_n positivi per n pari e negativi per n dispari (o viceversa, a seconda del segno di A). La soluzione risulta pertanto oscillante ma, essendo $|r| < 1$, non divergente.
- c) $0 < r < 1$. In questo caso gli y_n hanno sempre lo stesso segno, e dato che $|r| < 1$, la soluzione risulta non oscillante e non divergente.
- d) $r > 1$. In questo caso gli y_n hanno sempre lo stesso segno ma, essendo $|r| > 1$, la soluzione risulta non oscillante ma divergente.

Pertanto la soluzione risulta stabile (non divergente), quando $|r| < 1$. Come si vede dalle equazioni (5.24) e (5.25), il metodo di Lagrange fornisce una soluzione stabile dell'Equazione (5.20).

Algoritmo della derivata centrale

Approssimiamo l'equazione da risolvere con:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2h f(x_n, y_n) \quad (5.26)$$

Sostituendo ancora la soluzione di prova $y_n = A r^n$, si ottiene, dividendo per $A r^{n-1}$:

$$r^2 + 2h r - 1 = 0 \quad (5.27)$$

che porta alle due soluzioni:

$$r_+ \simeq 1 - h \quad \rightarrow \quad |r_+| < 1 \quad (5.28)$$

$$r_- \simeq -1 - h \quad \rightarrow \quad |r_-| > 1 \quad (5.29)$$

Pertanto, essendo la soluzione fornita dall'algoritmo una combinazione di r_+ e di r_- ed essendo $|r_-| > 1$, la soluzione dell'equazione (5.20) risulta instabile in quanto divergente.

5.5 Metodo di Runge-Kutta

I metodi di Runge-Kutta sono una famiglia di metodi iterativi discreti utilizzati nell'approssimazione numerica di soluzioni di equazioni differenziali ordinarie e più specificatamente per problemi ai valori iniziali. Fanno parte della famiglia più generale di metodi discreti per le equazioni differenziali ordinarie, ovvero di quella classe di metodi numerici che fornisce un'approssimazione della soluzione di un'equazione differenziale (o più precisamente di un problema di Cauchy) in un insieme discreto di punti.

Il metodo di Runge-Kutta più diffuso è quello al IV ordine ma, per semplicità, analizzeremo nel dettaglio quello al II ordine.

Consideriamo la generica equazione:

$$\frac{dy}{dt} = f(y(t), t) \quad (5.30)$$

e sviluppiamo la sua soluzione in serie di Taylor:

$$y(t_0 + h) = y_0 + h f_0 + \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f}{\partial y} \right)_{t_0, y_0} + O(h^3) \quad (5.31)$$

- $y_0 \equiv y(t_0)$;
- $f_0 \equiv f(y_0, t_0)$.

Con questo metodo è possibile evitare il calcolo delle derivate che se sviluppato in modo numerico potrebbe portare ad una amplificazione degli errori. Questo si ottiene sostituendo le derivate con una combinazione lineare della funzione f valutata in punti diversi (ma vicini) del punto iniziale $(t_0, y(t_0))$. Questo si traduce in:

$$y(t_0 + h) = y_0 + h [\alpha f_0 + \beta f(y_0 + \delta h f_0, t_0 + \gamma h)] \quad (5.32)$$

dove α , β , γ , δ sono dei parametri che vanno scelti in modo da minimizzare la differenza tra (5.31) e (5.32). Poiché sia i parametri introdotti che l'incremento h hanno valori piccoli, è possibile sviluppare il secondo termine dell'equazione presente in parentesi quadra:

$$f(y_0 + \delta h f_0, t_0 + \gamma h) = f_0 + \gamma h \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_0, y_0} + \delta h f_0 \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{t_0, y_0} + O(h^2) \quad (5.33)$$

In questo sviluppo possiamo arrestarci al primo ordine perché, sostituendolo nell'equazione (5.32), otteniamo complessivamente termini fino all'ordine h^2 . Se avessimo considerato anche i termini al secondo ordine, con la sostituzione avremmo ottenuto termini di ordine h^3 che avremmo dovuto scartare per coerenza con l'equazione (5.31). Effettuando la sostituzione e raccogliendo i termini proporzionali ai vari ordini di h , otteniamo che:

$$\begin{aligned} y(t_0 + h) &= y_0 + h \left[\alpha f_0 + \beta \left(f_0 + \gamma h \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_0, y_0} + \delta h f_0 \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{t_0, y_0} \right) \right] \\ &= y_0 + h(\alpha + \beta)f_0 + h^2 \beta \left[\gamma \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{t_0, y_0} + \delta f_0 \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{t_0, y_0} \right] + O(h^3) \end{aligned} \quad (5.34)$$

Confrontiamo questa espressione con la (5.31) e si ottiene che:

$$\begin{cases} \alpha + \beta = 1 \\ \beta\gamma = \frac{1}{2} \\ \beta\delta = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.35)$$

dove si vede che $\gamma = \delta$ e si hanno pertanto due equazioni indipendenti e tre incognite: questo comporta l'esistenza di infinite soluzioni per il sistema. Tra queste scegliamo quella che va a minimizzare il primo termine trascurato, ossia quello di ordine h^3 , in modo da rendere più precisa possibile l'approssimazione. Andando a calcolare questo termine, risulta che viene minimizzato da:

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{3} \\ \beta = \frac{2}{3} \\ \gamma = \delta = \frac{3}{4} \end{cases} \quad (5.36)$$

Il metodo Runge-Kutta al II ordine può essere generalizzato a qualsiasi ordine n andando a considerare una scrittura della forma:

$$y(t_0 + h) = y_0 + \alpha_1 k_1 + \alpha_2 k_2 + \dots + \alpha_n k_n \quad (5.37)$$

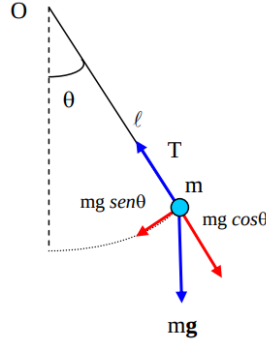


Figura 5.1: Pendolo semplice

dove:

$$\begin{cases} k_1 = hf_0 \\ k_2 = hf(y_0 + \beta_{21}k_1, t + \beta_{21}h) \\ \dots \\ k_n = hf\left(y_0 + \sum_{l=1}^{n-1} \beta_{nl}k_l, t + \sum_{l=1}^{n-1} \beta_{nl}h\right) \end{cases} \quad (5.38)$$

5.5.1 Soluzione equazione del pendolo

L'equazione del moto di un pendolo semplice, in presenza di un termine forzante e di uno smorzante, può essere ricavata esplicitando i termini dell'equazione:

$$m\vec{a}_T = \vec{f}_{gravitazionale} + \vec{f}_{forzante} + \vec{f}_{smorzante} \quad (5.39)$$

dove a_T è l'accelerazione tangenziale. Si ottiene pertanto:

$$ml \frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg \sin \theta + f_f^0 \cos(\omega_0 t) - k \frac{d\theta}{dt} \quad (5.40)$$

Ponendo $b \equiv \frac{f_f^0}{ml}$, $q \equiv \frac{k}{ml}$ e $\frac{g}{l} = 1$ si ottiene l'equazione:

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + q \frac{d\theta}{dt} + \sin \theta = b \cos(\omega_0 t). \quad (5.41)$$

Come anticipato nel paragrafo 5.2, è possibile riscrivere questa equazione differenziale al secondo ordine come sistema di due equazioni differenziali al primo ordine. Ponendo $y_1 = \theta(t)$ e $y_2 = \frac{d\theta}{dt} = \dot{\theta}(t)$, tale sistema risulta essere:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dt} = y_2 \\ \frac{dy_2}{dt} = -qy_2 - \sin y_1 + b \cos(\omega_0 t) \end{cases} \quad (5.42)$$

Nell'approssimazione di piccole oscillazioni si può porre $\sin y_1 = y_1$.

Questo sistema di equazioni è stato risolto con il metodo di Runge-Kutta e nel seguito sono presentati i grafici (sulle ascisse θ e sulle ordinate $\dot{\theta}$) realizzati con diverse condizioni iniziali.

Uno studio più complicato può essere svolto risolvendo le equazioni differenziali non lineari che descrivono il moto del pendolo di Kapitza⁴. La particolarità e la complessità di questo

⁴Per questo studio, Kapitza ricevette il premio Nobel nel 1951.

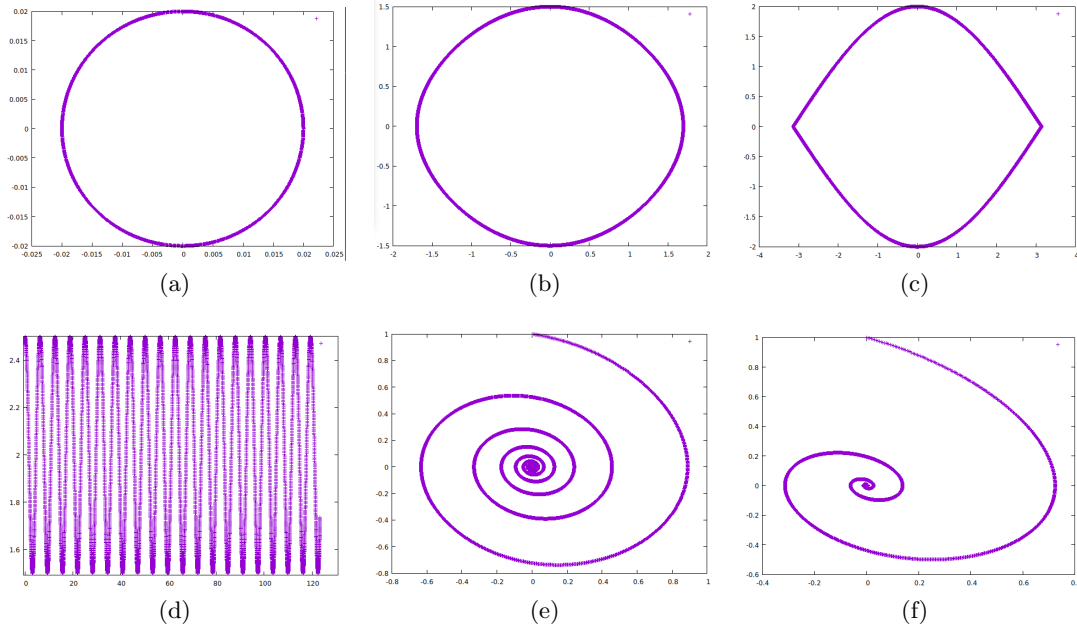


Figura 5.2: (a) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 0.002$ rad/s, $q = 0$, $b = 0$; (b) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 1.5$ rad/s, $q = 0$, $b = 0$; (c) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 2$ rad/s, $q = 0$, $b = 0$; (d) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 2.5$ rad/s, $q = 0$, $b = 0$; (e) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 1$ rad/s, $q = 0.2$, $b = 0$; (f) $\theta = 0$, $\dot{\theta} = 1$ rad/s, $q = 0.5$, $b = 0$.

Osservazione: per $\theta = \pi$ con $\pi = \text{real} * 8$, il pendolo non si muove. π risulta preciso fino a 10^{-15} : per vedere il pendolo muoversi, il codice deve fare almeno 10^{15} iterazioni.

pendolo è data dal fatto che il suo punto di attacco oscilla e l'energia del sistema non viene conservata perchè serve energia dall'esterno per alzare e abbassare il pendolo. Non appena il pendolo di Kapitza inizia ad oscillare, tali oscillazioni vengono fortemente amplificate. La posizione di equilibrio stabile di un pendolo semplice (pendolo in verticale rivolto verso il basso) non è una posizione di equilibrio per il pendolo di Kapitza. Il pendolo di Kapitza può trovare equilibrio quando è posizionato verticalmente ma rivolto verso l'alto.

5.6 Shooting method

Tutti i metodi multistep visti richiedono la conoscenza di due punti iniziali per poter essere utilizzati. A questo punto si può procedere in due modi:

- Come visto finora, una possibilità consiste nello sfruttare la condizione iniziale come primo punto e da questa, tramite per esempio il metodo di Eulero, ricavare (con buona precisione) il secondo punto.
- Un metodo diverso, noto come *shooting method*, può essere utilizzato quando si hanno a disposizione le condizioni al contorno $y(x_{iniziale})$ e $y(x_{finale})$.

In quest'ultimo metodo, il primo punto è sempre dato dalla condizione iniziale mentre il secondo viene scelto in modo tale da minimizzare la differenza tra la soluzione numerica data dall'algoritmo nel punto finale e la seconda condizione al contorno.

5.7 Algoritmo di Metropolis

Sebbene gli algoritmi di generazione di numeri random discussi in precedenza siano molto efficienti, risulta difficile o addirittura impossibile generalizzarli per generare campioni distribuiti secondo complicate funzioni multidimensionali. Un metodo generale che produce variabili random distribuite secondo una data distribuzione di probabilità di forma arbitraria, è fornito da Metropolis. Poiché per utilizzare questo algoritmo è soltanto richiesta la capacità di calcolare delle funzioni pesate, il metodo di Metropolis è ampiamente utilizzato in problemi di meccanica statistica, dove la funzione pesata dell'insieme canonico può essere una complicata funzione dei parametri del sistema.

Le distribuzioni alle quali meglio si applica sono quelle specificate da densità scritte come:

$$p(x) = \frac{W(x)}{Z} \quad (5.43)$$

dove x è un vettore aleatorio d -dimensionale. A causa della condizione di normalizzazione, si deve avere $Z = \sum_x W(x)$ nel caso discreto e $Z = \int_x h(x)dx$ in quello continuo. La costante di normalizzazione Z è indispensabile per ricavare qualsiasi quantità legata a $p(x)$ (come media, varianza e percentili), tuttavia in alcuni casi il calcolo può rivelarsi in pratica impossibile.

Questo avviene, ad esempio, nell'ambito della fisica o della chimica quando si studiano sistemi composti da un gran numero d di identici componenti elementari come le molecole in un gas o in un solido cristallino (tipicamente 10^{23} , numero che rappresenta grosso modo il numero di atomi contenuti in un cm^3 di materia). Supponiamo che ciascun componente elementare possa assumere k stati. Se $g(x)$ esprime un parametro macroscopico del sistema (come temperatura, pressione, momento magnetico), il calcolo della sua media, $\sum_x g(x)p(x)$, richiederebbe di valutare $W(x)$ per ognuna delle k^d possibili configurazioni del sistema, un numero che può essere enorme rispetto alle nostre risorse di calcolo.

L'algoritmo di Metropolis è molto potente per risolvere questi problemi, in quanto non è necessario conoscere Z , né valutare $W(x)$ per tutti i valori di x . L'idea è quella di generare una sequenza di numeri la cui distribuzione di frequenza asintotica tenda a $p(x)$.

Supponiamo di voler generare una sequenza di punti distribuiti secondo $W(x)$. Più punti si aggiungono alla sequenza, tanto meglio questa approssimerà $W(x)$. Sia x_n un numero appartenente alla sequenza; per generare il punto x_{n+1} facciamo uno step di prova al punto x_t scelto in modo arbitrario (per esempio scelto uniformemente all'interno di un cubo multidimensionale di lato δ centrato in x_n). Questo nuovo numero è accettato o rigettato andando ad esaminare il rapporto:

$$r = \frac{x_t}{x_n} \quad (5.44)$$

Se r è maggiore o uguale a 1 allora il punto x_t è accettato (si pone perciò $x_{n+1} = x_t$), altrimenti, se r è minore di 1, r viene confrontato con un numero random ξ uniformemente distribuito nell'intervallo $[0,1]$ e il nuovo punto x_t viene accettato con probabilità r solo se $r \leq \xi$. Se x_t viene rigettato, si pone $x_{n+1} = x_n$ e si ripete il procedimento partendo da x_{n+1} . Per dimostrare che l'algoritmo appena descritto generi effettivamente una sequenza di punti distribuiti secondo $W(x)$ si consideri un gran numero di punti (walkers) che evolvono da diversi punti iniziali e si muovono indipendentemente nello spazio. Se $N(x)$ è la densità di questi walkers dopo n di steps, allora il numero netto di walkers che si muovono dal punto X al punto Y nello step successivo è uguale a:

$$\Delta N(x) = N_n P(X \rightarrow Y) - N_n P(Y \rightarrow X) = N_n P(X \rightarrow Y) \left[\frac{N_n(X)}{N_n(Y)} - \frac{P(Y \rightarrow X)}{P(X \rightarrow Y)} \right] \quad (5.45)$$

dove $P(X \rightarrow Y)$ rappresenta la probabilità che un walker faccia una transizione da X a Y (e viceversa per $P(Y \rightarrow X)$).

Si ha equilibrio quando il numero di walkers che transitano da X a Y risulta uguale al numero di walkers che vanno da Y a X, ossia:

$$\frac{N_n(X)}{N_n(Y)} = \frac{N_{eq}(X)}{N_{eq}(Y)} \equiv \frac{P(Y \rightarrow X)}{P(X \rightarrow Y)} \implies \Delta N(x) = 0 \quad (5.46)$$

Rimane ora da dimostrare che la probabilità di transizione dell'algoritmo di Metropolis conduce ad una distribuzione all'equilibrio uguale a $N_e(x) \sim W(x)$. La probabilità di compiere uno step da X a Y, è:

$$P(X \rightarrow Y) = T(X \rightarrow Y)A(X \rightarrow Y) \quad (5.47)$$

dove T è la probabilità di fare uno step di prova da X a Y e A è la probabilità di accettare lo step. Se Y può essere raggiunto da X in un singolo step, allora si ha che $T(X \rightarrow Y) = T(Y \rightarrow X)$, così che l'equilibrio dei random walkers di Metropolis soddisfa l'uguaglianza:

$$\frac{N_{eq}(X)}{N_{eq}(Y)} = \frac{A(Y \rightarrow X)}{A(X \rightarrow Y)}. \quad (5.48)$$

Se $W(X) > W(Y)$, allora la probabilità che una transizione $X \rightarrow Y$ venga accettata è circa uguale a 1 e pertanto si può porre $A(X \rightarrow Y) = 1$ e

$$A(X \rightarrow Y) = \frac{W(Y)}{W(X)} \quad (5.49)$$

mentre, se $W(X) < W(Y)$ allora si ha $A(Y \rightarrow X) = 1$ e:

$$A(Y \rightarrow X) = \frac{W(X)}{W(Y)}. \quad (5.50)$$

Quindi, in entrambi i casi, la popolazione dei walkers di Metropolis all'equilibrio soddisfa:

$$\frac{N_{eq}(X)}{N_{eq}(Y)} = \frac{W(X)}{W(Y)} \quad (5.51)$$

Essi sono pertanto distribuiti secondo la corretta distribuzione: il rapporto il numero di walkers da X a Y è uguale al rapporto tra le probabilità.

L'algoritmo di Metropolis ha due difetti:

- I punti della sequenza sono tra loro fortemente correlati (si ricava infatti il punto successivo partendo da quello precedente e X_{n+1} si troverà vicino a X_n);
- La successione di numeri generata ha una forte dipendenza dal punto iniziale.

Sebbene i punti ottenuti si distribuiscano secondo la distribuzione di probabilità desiderata quando la sequenza diventa sufficientemente lunga, essi non sono tra loro indipendenti e risulta necessario adottare degli accorgimenti quando vengono usati per risolvere degli integrali. Per esempio, se si calcola:

$$I = \frac{\int W(X)f(X)dX}{\int W(X)dX} \quad (5.52)$$

calcolando la media di f sui punti del random walk, la stima della varianza con la formula:

$$\sigma_I^2 \simeq \frac{1}{N}\sigma_f^2 = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{I=1}^N f_I^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{I=1}^N f_I \right)^2 \right] \quad (5.53)$$

non risulta valida perché le $f(X_i)$ non sono tra loro statisticamente indipendenti. Il grado di correlazione dei punti di Metropolis può essere valutato attraverso il coefficiente di correlazione C :

$$C(k) = \frac{\langle f_i f_{i+k} \rangle - \langle f_i \rangle^2}{\langle f_i \rangle^2 - \langle f_i^2 \rangle}. \quad (5.54)$$

dove:

$$\langle f_i f_{i+k} \rangle = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^{N-k} f(X_i) f(X_{i+k}) \quad (5.55)$$

Questa problematica può essere risolta calcolando l'integrale e la sua varianza facendo uso di punti della sequenza separati tra loro da un intervallo fissato. Tale intervallo deve essere scelto grande tanto quanto basta per considerare i numeri tra loro non correlati.

La scelta del punto iniziale X_0 risulta ininfluente una volta che il sistema si è termalizzato dopo un certo numero di step. Al fine di rimuovere la dipendenza della sequenza dal punto iniziale, è opportuno calcolare alcuni step di termalizzazione prima di iniziare il vero campionamento.

L'algoritmo di Metropolis è utilizzato nel *modello di Ising*⁵ per spiegare alcuni comportamenti osservati nella magnetizzazione dei materiali. Questo modello ha importanti applicazioni anche in ambiti completamente diversi dalla fisica, perché descrive bene la evoluzione di sistemi in cui vi sono cambiamenti di stato a seguito di interazioni di contatto tra gli individui. Quando la temperatura lo consente, l'interazione esistente tra gli spin nucleari a livello microscopico determina il comportamento del materiale a livello macroscopico, conferendogli proprietà ferromagnetiche o antiferromagnetiche. In assenza di un campo magnetico esterno, a ciascuna configurazione viene associata una probabilità che dipende dall'energia $H(x)$ del sistema e dalla temperatura T :

$$p(x) = \frac{e^{-\frac{H(x)}{T}}}{\sum_x e^{-\frac{H(x)}{T}}} \equiv \frac{h(x)}{Z} \quad (5.56)$$

L. Onsager nel 1944 ha risolto il problema della trattazione analitica esatta del modello di Ising in due dimensioni, come ad esempio quello del calcolo del numero atteso di atomi con spin 1 a una data temperatura, utile per determinare il momento magnetico totale del materiale. Le configurazioni ammissibili di tutti gli spin nel caso bidimensionale sono 2^n , quindi non è possibile, se non per n molto ridotto, calcolare tutte le $p(x)$ e procedere alla simulazione diretta. Tuttavia il più realistico modello in tre dimensioni non è stato risolto e bisogna ricorrere alla simulazione.

⁵Per una più completa trattazione del modello di Ising si consiglia di consultare i libri:
 “Probabilità, statistica e simulazione” A. Rotondi, P. Pedroni, A. Pievatolo
 “Computational Physics” S. Koonin