Consegna 5 relazioni (una per coppia) :

Possibilmente (verrà **premiata la puntualità**; comunque **prima** dell’esame orale) :

- le ***prime 2*** entro il **9 novembre 2009**;

- le ***seconde 3*** entro il 1**4 dicembre 2009** .

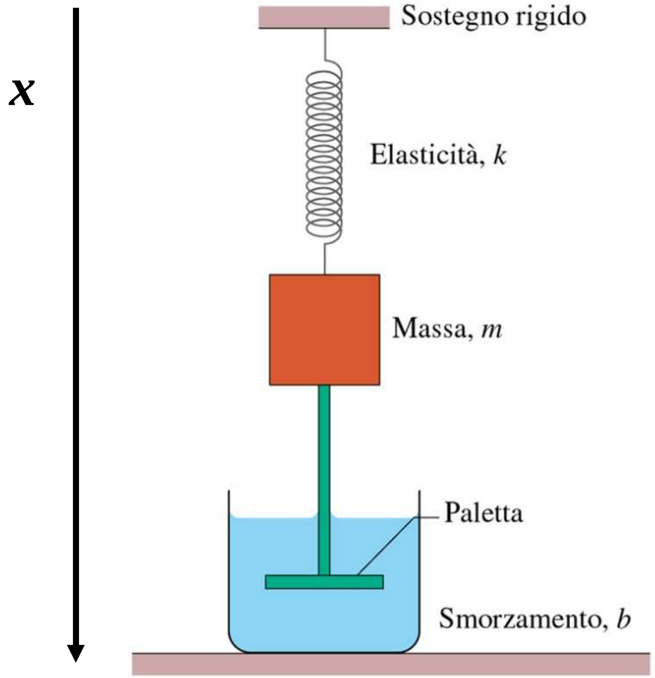
N.B. : l’esame finale (colloquio orale sulle relazioni) è comunque individuale !

Metodi Computazionali della Fisica

Equazioni differenziali ordinarie
(Ordinary Differential Equations, ODE)

Problema da risolvere

Molte leggi fisiche sono formulate in termini di **equazioni differenziali**, es. **oscillatore armonico smorzato**:



$$ma = -kx - bv\,, \quad v = \frac{dx}{dt}\,, \quad a = \frac{d^2x}{dt^2} \quad \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad m\frac{d^2x}{dt^2} + b\frac{dx}{dt} + kx = 0$$

Problema da risolvere

- Risolvere **numericamente** equazioni differenziali è una delle operazioni più frequenti quando si vuol descrivere sistemi fisici mediante **modelli**
- La forma più generale di un'equazione differenziale ordinaria (**ODE**) è un'insieme di M equazioni **al prim'ordine**, accoppiate:

$$\frac{d\vec{y}}{dx} = \vec{f}(x, \vec{y})$$

Problema da risolvere

Nell'equazione $$\frac{d\vec{y}}{dx} = \vec{f}(x,\vec{y}) \qquad (1)$$

x è la variabile **indipendente**, $\vec{y}$ è un'insieme di M variabili **dipendenti** e $\vec{f}$ è in generale un vettore di M componenti

N.B. equazioni differenziali di ordine **superiore** possono essere espresse nella forma **(1)** introducendo opportune **funzioni ausiliarie**

Problema da risolvere

Esempio: moto in **1D** di una particella di massa *m*, sottoposta ad un campo di forza *F(x)* (equazione differenziale al **second'ordine**):

$$ma = m\frac{d^2x}{dt^2} = F(x) \quad (2)$$

definendo il **momento** (o **quantità di moto**, funzione **ausiliaria**):

$$\boxed{p(t) = mv = m\frac{dx}{dt}}$$

Problema da risolvere

allora la **(2)** è equivalente all'insieme delle 2 equazioni differenziali al **prim'**ordine (**ODE**) (equazioni di Hamilton) accoppiate:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \qquad\qquad \frac{dp}{dt} = F(x)$$

che sono proprio nella forma **(1)**; allora **è sufficiente** considerare in dettaglio solo i metodi che si applicano alle equazioni differenziali al **primo** ordine (**ODE**)

Problema da risolvere

Per semplicità (la generalizzazione non è difficile) consideriamo solo il caso particolare in cui ci sia una **singola** variabile dipendente *y(x)* :

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (3)$$

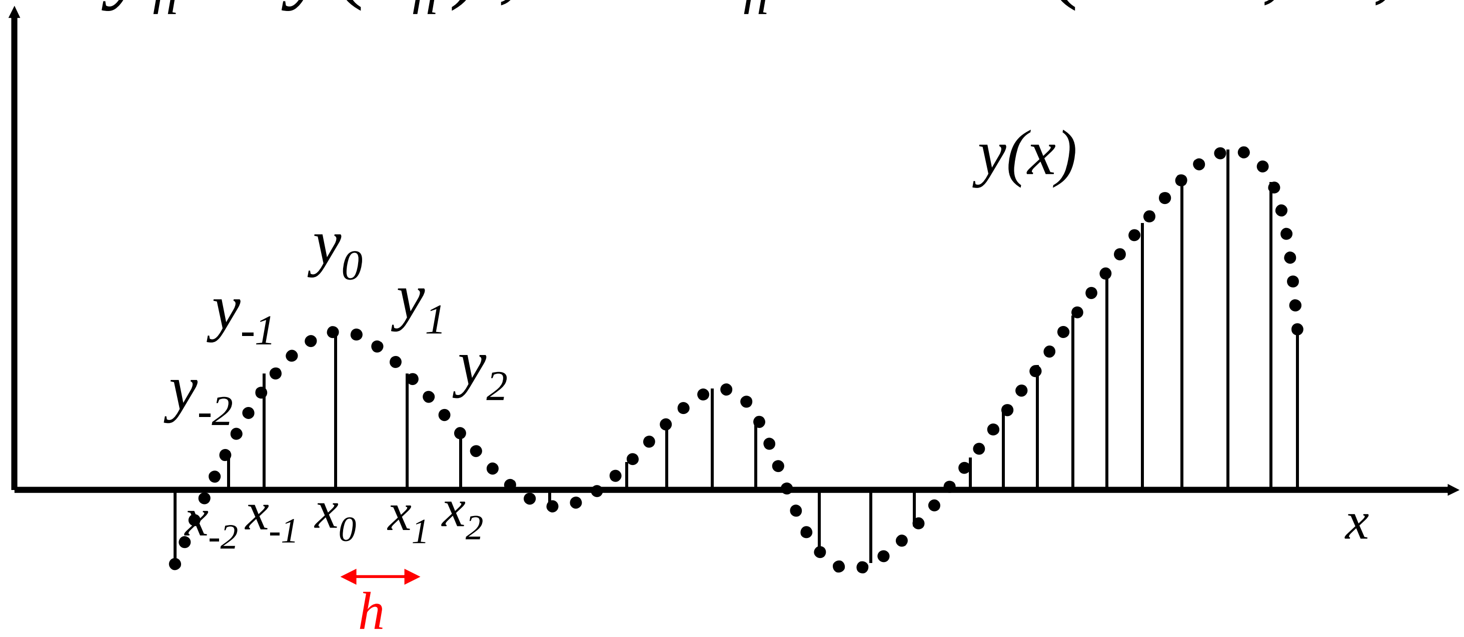
Obiettivo: trovare *y(x)*, che soddisfa la (3), dato il valore di y in qualche punto iniziale, ad esempio $y(x=0)=y_0$;

questo è, ad esempio, il caso quando sono dati la **posizione** ed il **momento iniziali** di una particella e si vuole trovare il moto negli istanti successivi usando le equazioni di Hamilton scritte precedentemente.

Derivazione numerica

Supponiamo di voler calcolare la **derivata prima** di una data funzione $y(x)$ per $x=x_0=0$ (la generalizzazione ad un punto qualsiasi è banale), $y'(x)$, supponendo di conoscere y su di una **griglia equispaziata** di valori di x:

$$y_n = y(x_n)\,, \qquad x_n = nh \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$$



Derivazione numerica

L'**obiettivo** è quello di calcolare un valore **approssimato** di *y'(0)* in termini dei valori $\{y_n\}$; cominciamo con usare la **serie di Taylor** per espandere *y* vicino a $x=0$:

$$y(x) = y_0 + x y' + \frac{x^2}{2!} y'' + \frac{x^3}{3!} y''' + \ldots$$

dove tutte le derivate sono calcolate per $x=0$; è facile verificare che:

$$y_{\pm 1} \equiv y(x = \pm h) = y_0 \pm h y' + \frac{h^2}{2} y'' \pm \frac{h^3}{6} y''' + \vartheta(h^4) \qquad (1)$$

$$y_{\pm 2} \equiv y(x = \pm 2h) = y_0 \pm 2h y' + 2h^2 y'' \pm \frac{4h^3}{3} y''' + \vartheta(h^4) \qquad (2)$$

Derivazione numerica

sottraendo y_{-1} da y_1 si ha:

$$y' = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} y''' + \vartheta(h^4)$$

e quindi si ottiene l'approssimazione "**a 3 punti**":

$$\boxed{y' \approx \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} \qquad (3)}$$

la (3) sarebbe **esatta** se *y* fosse un polinomio di **secondo grado** nell'intervallo *[-h,h]*, poichè allora la derivata terza e quelle di ordine più alto sarebbero nulle, quindi la (3) assume che sia **valida** un'interpolazione polinomiale **quadratica** nei 3 punti $x=-h,0,h$ (ovviamente l'accuratezza dell'approssimazione (3) aumenta col **diminuire** del "passo" *h*).

Derivazione numerica

N.B. la (3) ("**simmetrica**" o "**centrale**") è **più accurata**, di un ordine in *h*, rispetto alle formule alternative "**forward** difference" (differenza "in avanti") o "**backward** difference" (differenza "all'indietro"):

$$y' = \frac{y_1 - y_0}{h} + \vartheta(h)$$

$$y' = \frac{y_0 - y_{-1}}{h} + \vartheta(h)$$

queste formule "**a 2 punti**" sono basate sull'assunzione che *y* sia ben approssimata da una funzione **lineare** negli intervalli tra $x=0$ e $x=h$ e tra $x=-h$ e $x=0$, rispettivamente.

Derivazione numerica

Esempio: consideriamo il problema di calcolare **numericamente** $y'(x=1)$, con $y(x)=sin(x)$ e x in radianti, usando le formule precedenti; ovviamente la soluzione **esatta** è $cos(1)=0.540302$

Derivazione numerica

La seguente **tabella** riporta i risultati prodotti da un tale programma, per vari valori di *h* (usando variabili in **singola precisione** per mettere in evidenza l'errore numerico), confrontati con quelli ottenuti con le formule "a 2 punti":

h	**symmetric**	**forward**	**backward**
	3-point	**2-point**	**2-point**
0.50000	0.022233	0.228254	-0.183789
0.20000	0.003595	0.087461	-0.080272
0.10000	0.000899	0.042938	-0.041139
0.05000	0.000225	0.021258	-0.020808
0.02000	0.000037	0.008453	-0.008380
0.01000	0.000010	0.004224	-0.004204
0.00500	0.000010	0.002108	-0.002088
0.00200	-0.000014	0.000820	-0.000848
0.00100	-0.000014	0.000403	-0.000431
0.00050	0.000105	0.000403	-0.000193
0.00020	-0.000163	-0.000014	-0.000312
0.00010	-0.000312	-0.000312	-0.000312
0.00005	0.000284	0.001476	-0.000908

Derivazione numerica

Come si può osservare il risultato **migliora** al **diminuire** di *h*, ma solo **fino ad un certo punto**, dopodichè la situazione peggiora; questo è dovuto alla precisione limitata dell'aritmetica su computer (in **singola precisione** 6-7 cifre decimali) e al fatto che, quando si calcolano le differenze nei numeratori delle formule precedenti, queste sono soggette ad **errori di arrotondamento** grandi se *h* è piccolo e quindi y_1 ed y_{-1} sono **quasi uguali** ;

ad **esempio** (con **6** cifre significative), se $h=10^{-6}$ allora:

$$y_1 = \sin(1.000001) = 0.841472$$

$$y_{-1} = \sin(0.999999) = 0.841470$$

$$\Rightarrow \quad y_1 - y_{-1} = 0.000002 \quad \Rightarrow \quad y' \approx 1.000000$$

che è una stima **pessima** (y'(esatto)=0.540302) !

Derivazione numerica

Invece con **10** cifre significative (ad esempio in **doppia precisione**):

$$y_1 = 0.8414715251$$

$$y_{-1} = 0.8414704445$$

$$\Rightarrow \quad y' \approx 0.540300$$

che è un'**ottima** stima (y'(esatto)=0.540302) !

N.B. la derivazione numerica è un processo intrinsecamente **instabile** (non esiste un limite ben definito per $h \to 0$) e perciò deve essere usata con **attenzione** !

Derivazione numerica

Formule per calcolare derivate di **ordine superiore** possono essere costruite utilizzando sempre opportune combinazioni della (1) e (2); ad esempio è facile vedere che:

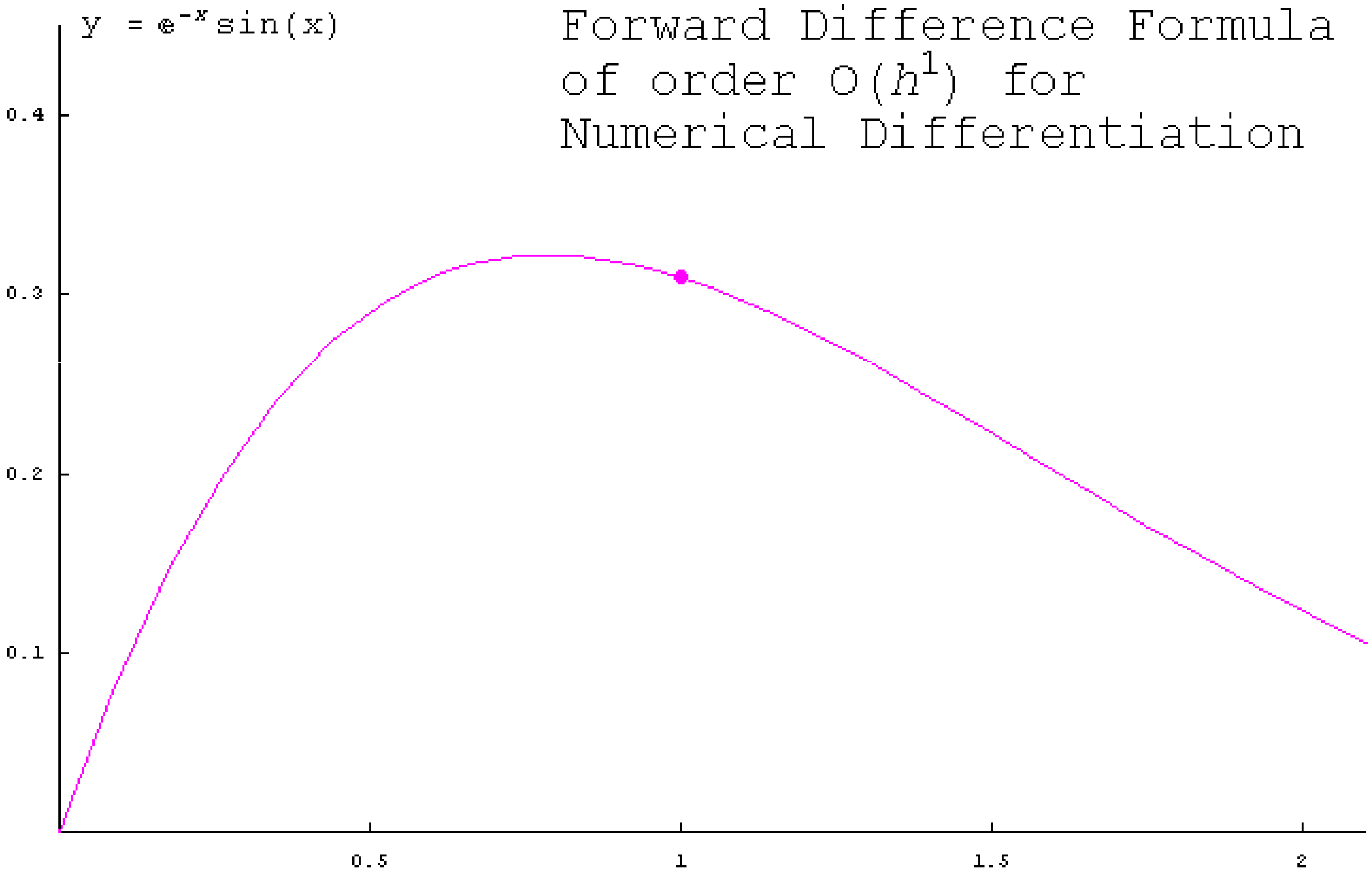
$$y_1 - 2y_0 + y_{-1} = h^2 y'' + \vartheta(h^4)$$

allora un'approssimazione di ordine $\theta(h^2)$ per la derivata **seconda** è:

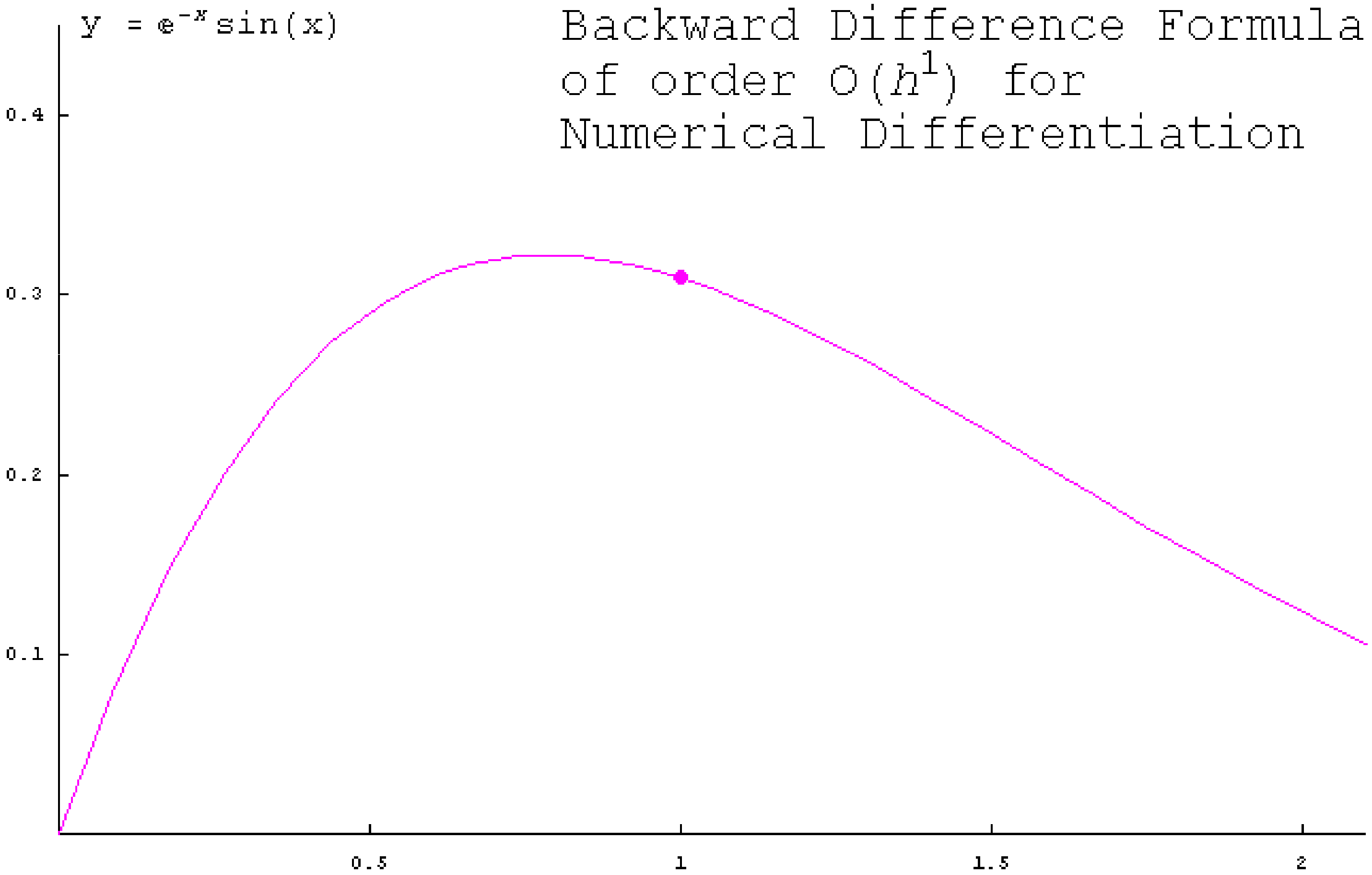
$$y'' \approx \frac{y_1 - 2y_0 + y_{-1}}{h^2}$$

e analogamente per derivate di ordine **superiore**.

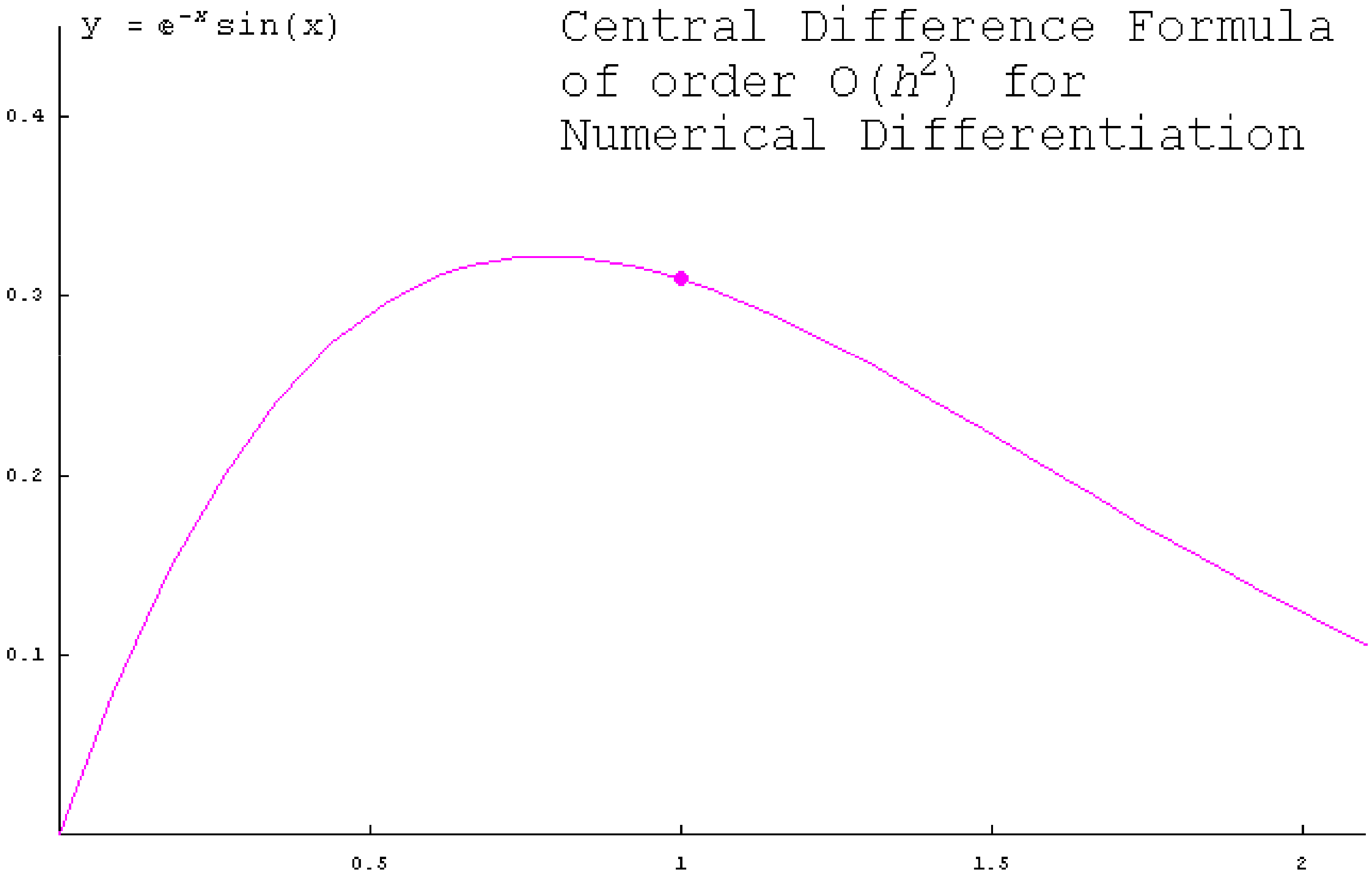
Derivazione numerica



Derivazione numerica



Derivazione numerica



Problema da risolvere

Torniamo al nostro problema originale in cui, per semplicità (la generalizzazione non è difficile), consideriamo solo il caso particolare in cui ci sia una **singola** variabile dipendente $y(x)$:

$$\boxed{\frac{dy}{dx} = f(x, y) \qquad (3)}$$

Obiettivo: trovare $y(x)$, che soddisfa la (3), dato il valore di y in qualche punto iniziale, ad esempio $y(x=0)=y_0$;

Metodo di Eulero

rappresenta uno degli algoritmi **più semplici** per trovare la soluzione dell'ODE:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

con la condizione iniziale $y(x=0)=y_0$

Se vogliamo trovare il valore di y per un particolare valore di x, ad esempio $x=1$, allora la **strategia generale** è la seguente:

Metodo di Eulero

- **suddividere** l'intervallo *[0,1]* in un numero (grande) *N* di **sottointervalli** equispaziati di lunghezza $h=1/N$
- sviluppare una **formula ricorsiva** che stabilisca una relazione tra y_n e $\{y_{n-1}, y_{n-2}, \dots\}$, essendo y_n l'approssimazione per $y(x_n=nh)$

La formula ricorsiva consentirà allora **un'integrazione "passo-dopo-passo"** dell'ODE da $x=0$ a $x=1$; in particolare si considera l'ODE:

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \quad (3)$$

Metodo di Eulero

nel generico punto x_n, sostituendo la derivata dy/dx con l'approssimazione alle differenze finite "**in avanti**" ("forward difference approximation") $(y_{n+1}-y_n)/h$, allora la (3) diventa:

errore

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{h}+\vartheta(h)=f(x_n,y_n)$$

dalla quale si ricava subito la **formula ricorsiva**:

$$\boxed{y_{n+1}=y_n+h\,f(x_n,y_n)+\vartheta(h^2)}$$

Metodo di Eulero

N.B. l'errore locale (nel singolo passo da y_n a y_{n+1}) è $\theta(h^2)$, ma **l'errore globale** (per ottenere $y(1)$ compiendo N passi per integrare da $x=0$ a $x=1$) è $N\theta(h^2)=\theta(h)$, cioè l'errore diminuisce solo **linearmente** al diminuire di h: per dimezzare l'errore nel risultato finale $y(1)$ è necessario usare $h'=h/2$ e $N'=2N$; notare che ad ogni passo il **costo numerico** è essenzialmente un **singolo calcolo** di f.

Esempio:

$$\frac{dy}{dx} = -xy \qquad y(0) = 1 \qquad (4)$$

in questo caso esiste la soluzione **analitica**: $y = e^{-x^2/2}$

Metodo di Eulero

La seguente **tabella** riporta gli **errori** relativi a

$y(1)=e^{-1/2}=0.606531$ e $y(3)=e^{-9/2}=0.011109$, per vari valori di h:

h	y(1)	y(3)
0.500	-0.143469	0.011109
0.200	-0.046330	0.006519
0.100	-0.021625	0.003318
0.050	-0.010453	0.001665
0.020	-0.004098	0.000666
0.010	-0.002035	0.000333
0.005	-0.001014	0.000167

come previsto l'**errore** diminuisce **linearmente** diminuendo h, tuttavia **l'errore relativo** (=errore diviso per il valore di y) **aumenta** con x, poiché, a parità di h, **aumenta** il numero di passi N e, inoltre, y diventa **più piccolo**

N.B. una **"misura"** dell'errore relativo dell'algoritmo si può ottenere usando il valore **finale** di y come condizione **iniziale** e integrando "all'indietro" ("backward") dal valore finale di x al punto iniziale: la **discrepanza** tra il valore risultante di y e quello iniziale originale dà una stima dell'errore.

Metodo di Eulero

Il metodo di Eulero in generale non è soddisfacente a causa della sua **bassa accuratezza**.

In linea di principio si può ridurre *h* se *x* aumenta, però in questo modo si **perde** rapidamente in efficienza.

Esempio:

$$\frac{dy}{dt} = 1 - t\sqrt[3]{y} \qquad y(0) = 1$$

per t tra 0 e 5, cambiando il numero N di sottointervalli, cioè il valore di h

Metodo di Eulero