

Calcolo Numerico. Soluzione numerica di equazioni differenziali alle derivate ordinarie (ODE)

Laboratorio di Metodi Computazionali e Statistici (2022/2023)

Fabrizio Parodi e Roberta Cardinale

Dipartimento di Fisica - Università di Genova

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione
- differenziazione

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione
- differenziazione
- ricerca di zeri

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione
- differenziazione
- ricerca di zeri
- ricerca di massima e minimi relativi

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione
- differenziazione
- ricerca di zeri
- ricerca di massima e minimi relativi
- soluzione di equazioni differenziali

Calcolo Numerico

Il Calcolo Numerico è uno strumento fondamentale in Fisica.

Qualsiasi problema di Fisica implica l'uso di almeno uno di questi strumenti:

- integrazione
- differenziazione
- ricerca di zeri
- ricerca di massima e minimi relativi
- soluzione di equazioni differenziali

...e solo in pochi casi è possibile eseguire questo compito analiticamente !

Espansione in serie di Taylor

Uno strumento di base che utilizzeremo spesso nel seguito è l'espansione in serie di Taylor di una funzione $f(x)$ intorno al punto x :

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \dots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(x)$$

La serie di Taylor permette, noto il valore di una funzione e di tutte le sue derivate in un punto x , di determinare il valore della funzione in un punto generico $x+h$.

Se h è piccolo l'approssimazione è buona anche se ci si ferma ai primi termini.

Derivate: Rapporto incrementale

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + \mathcal{O}(h^2)$$

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Derivate: Differenza centrale

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \mathcal{O}(h^3)$$

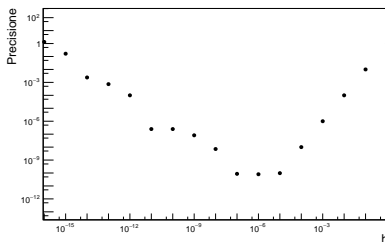
$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \mathcal{O}(h^3)$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Troncamento, arrotondamento e precisione numerica

- A causa della rappresentazione finita delle variabili floating point la precisione del calcolo della differenza centrale è limitata (arrotondamento). Questa componente diminuisce con l'aumentare di h .
- Inoltre vi è un errore di troncamento dovuto al fatto che ci siamo fermati al secondo grado dell'espansione in serie di Taylor. Questa componente diminuisce con il diminuire di h .

Esempio: precisione della derivata numerica di x^3 in $x = 1$



- Si potrebbe pensare di ottimizzare di volta in volta h . Di fatto si diminuisce h finché la precisione sulla derivata non è accettabile.

Calcolo esplicito se: $f(x) \sim f'''(x)$

A causa della rappresentazione finita delle variabili floating point la precisione del calcolo della differenza centrale è limitata (per il double, $\varepsilon = 1 \cdot 10^{-16}$)

$$\Delta_\varepsilon(f') = \Delta_\varepsilon\left(\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}\right) = \frac{2\Delta f}{2h} = \frac{\varepsilon f(x)}{h}$$

Errore di troncamento dovuto al fatto che ci siamo fermati al secondo grado dell'espansione in serie di Taylor

$$\Delta_t = \frac{h^2}{3} f'''(x)$$

Nel caso in cui $f(x) \sim f'''(x)$ si può ricavare il valore ottimale di h .

$$\frac{\varepsilon f(x)}{h} = \frac{h^2}{3} f'''(x) \xrightarrow{\text{se } f(x) \sim f'''(x)} h = (3\varepsilon)^{1/3} \sim 10^{-5}$$

Derivata seconda

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(x) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$f'' = \frac{f(x+h) + f(x-h) - 2f(x)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Integrale di Riemann

Calcolo dell'integrale definito di $f(x)$ nell'intervallo $[a, b]$. Date n sottodivisioni (partizione \mathcal{P}) dell'intervallo $[a, b]$ si definiscono

$$m_k = \inf_{x \in [x_k, x_{k+1}]} f(x)$$

$$M_k = \sup_{x \in [x_k, x_{k+1}]} f(x)$$

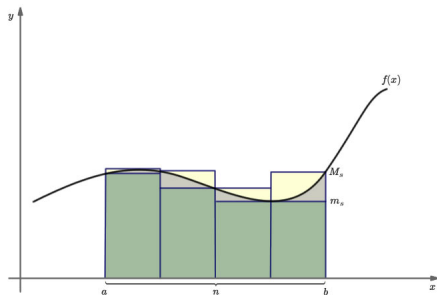
e quindi

$$s(\mathcal{P}, f) = \sum_{k=1}^n m_k (x_{k+1} - x_k)$$

$$S(\mathcal{P}, f) = \sum_{k=1}^n M_k (x_{k+1} - x_k)$$

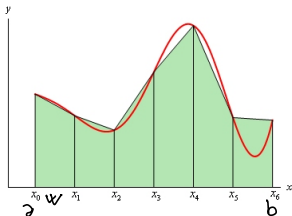
L'integrale di $f(x)$ tra a e b è definito come

$$\int_a^b f(x) dx = \sup_{\mathcal{P}} s(\mathcal{P}, f) = \inf_{\mathcal{P}} S(\mathcal{P}, f)$$



Integrazione: metodo dei trapezi *non può entrare*

Approssimiamo l'integrale su ciascun sotto-intervallo con l'area del trapezio definito dai suoi estremi (n sotto-intervalli, $n + 1$ estremi)



$$w = \frac{(b - a)}{n}$$

$$Area = \frac{1}{2} (base\ 1 + base\ 2)$$

$$I = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{w}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

Il metodo è, ovviamente, esatto per una retta ed, in generale, L'errore è proporzionale a w^3 .

Come possiamo evitare il ricalcolo delle funzioni agli estremi dei sotto-intervalli ?

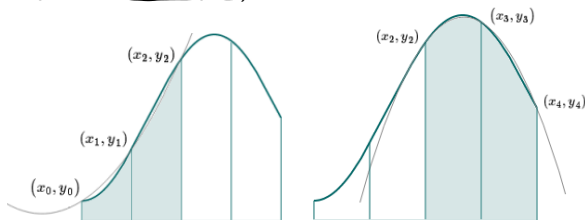
$$I = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{w}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

$$\hookrightarrow I = \frac{w}{2} [f(a) + f(b)] + w \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)$$

Integrazione: metodo di Simpson

Maggiore precisione si può ottenere interpolando con un polinomio di secondo grado.

Siccome occorrono tre punti per definire un polinomio di secondo grado il metodo di Simpson richiede che il numero di intervalli pari (e quindi il numero di campionamenti dispari).



$$I = \sum_{i=0}^{n-2} \frac{w}{6} (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}))$$

Il metodo è esatto per una parabola ed, in generale, l'errore è proporzionale a w^5 .

Integrali

In generale non si fissa a priori un numero di intervalli ma:

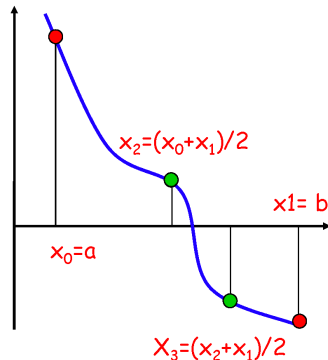
- si parte da un numero abbastanza piccolo di intervalli
- si raddoppia il numero di intervalli finché non si raggiunge una data precisione
- la precisione è valutata come differenza tra gli integrali ottenuti in due iterazioni successive

$$\varepsilon = |I_{iter+1} - I_{iter}|$$

Ricerca di zeri: bisezione

Dall'analisi (teorema degli zeri) sappiamo che: "se una funzione continua assume, agli estremi di un intervallo, valori discordi in segno essa si annulla in almeno un punto all'interno dell'intervallo". Il metodo di bisezione si basa sul dimezzamento successivo dell'intervallo che contiene lo zero.

- 1 si calcola il punto medio $x_{med}=x_2=(x_0+x_1)/2=(a+b)/2$
- 2 si valuta $f(x_{med})$: se $f(x_{med})=0$ ci fermiamo: abbiamo trovato lo zero !
- 3 si valuta $P=f(x_0)*f(x_{med})$
 - se $P < 0$ si pone $x_1=x_{med}$
 - se $P > 0$ si pone $x_0=x_{med}$
- 4 si torna al punto 1) finché x_2-x_1 è maggiore della precisione; il valore cercato è dato da x_{med}



Bisezione: osservazioni

Una buona implementazione dovrebbe prevedere tutti i casi possibili di applicazione (anche quelli dovuti ad errato utilizzo).

Alcuni esempi:

- l'utente non fornisce $x_1 < x_2$ (invertire ?) oppure non è $f(x_1) * f(x_2) < 0$ (messaggio di errore);
- la funzione è limitata ma discontinua oppure ha una singolarità nell'intervallo (controllare il valore di $f(x_1)$, $f(x_2)$);
- bracketing errato: non c'è un solo zero (difficile accorgersene...)

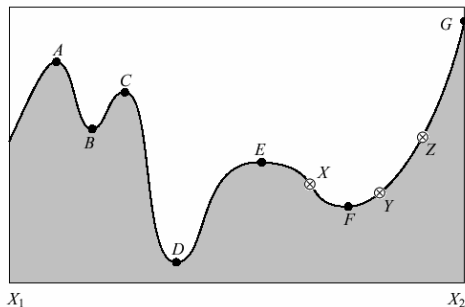
Ricerca degli estremi di una funzione

La ricerca degli estremi di una funzione si può affrontare in vari modi:

- riconducendosi alla derivata (a cui si applica la ricerca di zeri e poi ne si studia il segno in prossimità dello zero); l'approccio comporta però ulteriore approssimazione (calcolo di zero su funzione approssimata) e inefficienza
- applicando alla funzione stessa metodi iterativi simili a quello utilizzato per la ricerca di zeri.

È comunque necessario, come nella ricerca degli zeri, effettuare un efficace “bracketing” dell'estremo.

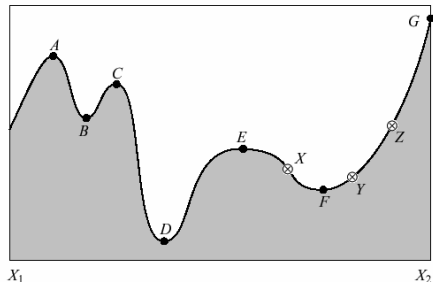
Estremi assoluti o al limite dell'intervallo più difficili da trovare.



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

```
double estremo(TF1 f, double a, double b, double c, double prec, bool
lminimo=true);
```

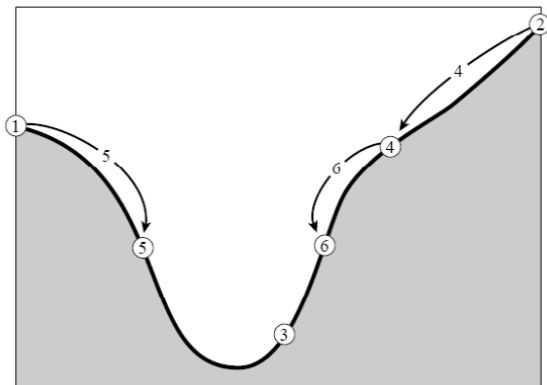
- ❶ si parte da una terna di punti tali che $a < b < c$ tali che $f(b) < f(a)$ e $f(b) < f(c)$;
- ❷ si valuta $f(x)$ in punto x contenuto in uno dei due sottintervalli (ad es. $b < x < c$);
- ❸ se $f(b) < f(x)$ allora la terna diventa (a, b, x) altrimenti (b, x, c) ;
- ❹ si ripete da punto 1) dividendo sempre l'intervallo più grande finché la differenza tra i due punti più esterni è maggiore della precisione richiesta



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

Esempio:

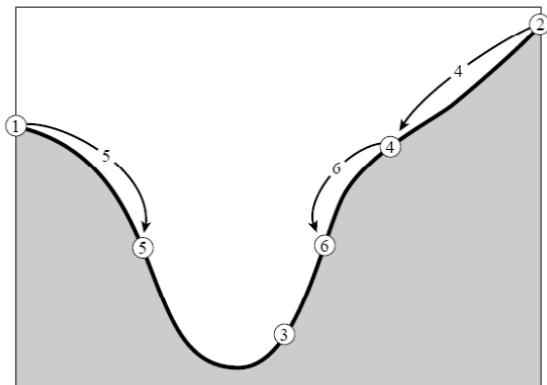
(1,3,2)



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

Esempio:

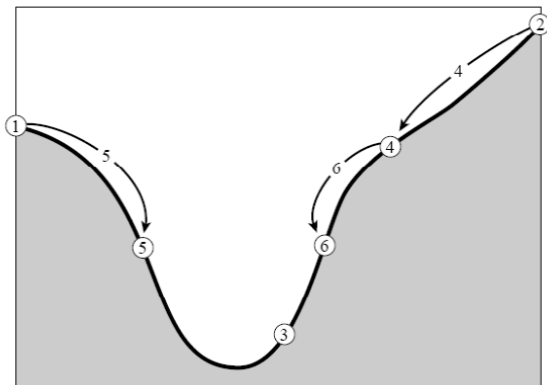
(1,3,4)



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

Esempio:

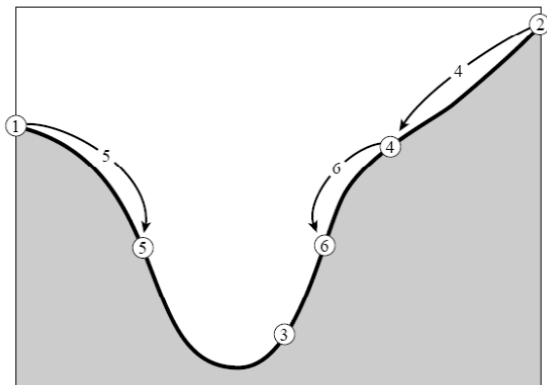
(5,3,4)



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

Esempio:

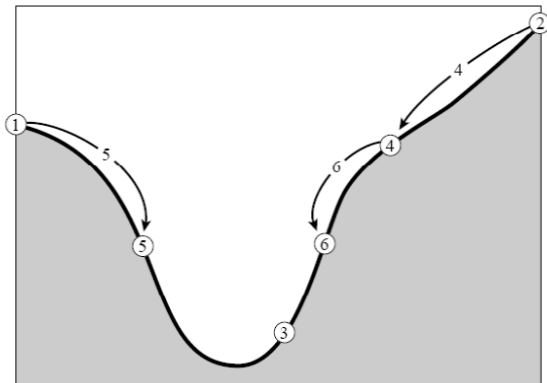
(5,3,6)



Ricerca degli estremi di una funzione: golden search

Esempio:

(5,3,6)



Per ottenere massima efficienza si dimostra che la scelta del punto intermedio deve rispettare il rapporto:

$$|a - b|/|b - c| = 0.38197$$

GOLDEN RATIO