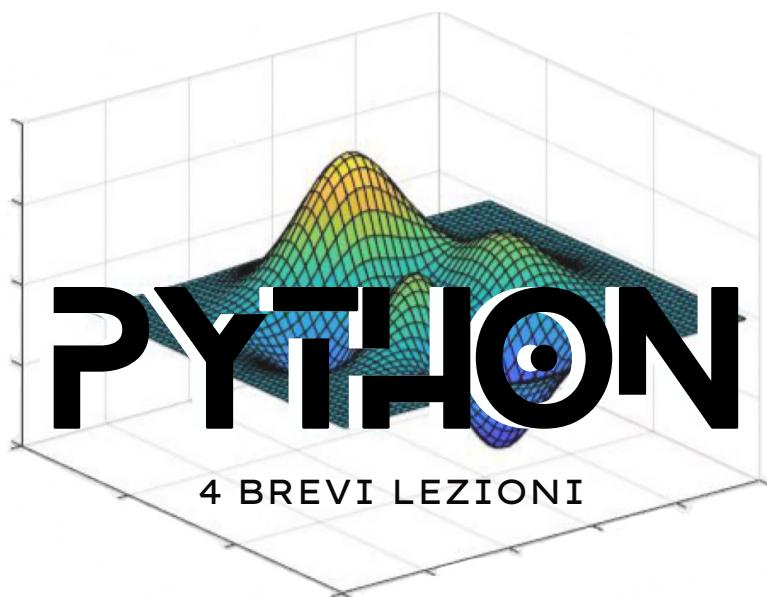


4 Brevi lezioni di Python

Francesco Zeno Costanzo

(Do you remember the) 21(st night of) September 2023



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

Indice

1 Scopo delle note e caveat	5
2 Introduzione	6
2.1 Notazioni	6
2.2 I 4 (per ora) comandamenti dell'informatica	6
3 Lezione Zero: Installazione	7
3.1 Installazione dell'ambiente: Pyzo	7
3.2 Installazione dell'interprete: Anaconda	7
3.3 Installazione dei pacchetti	7
4 The Zen of Python	8
5 Prima lezione	8
5.1 Funzione print	8
5.2 Commenti	8
5.3 Variabili	9
5.4 Librerie	12
5.5 Come leggere il Traceback	13
5.6 Un paio di trick	14
6 Seconda lezione	15
6.1 Gli array	15
6.2 Tipi di array	16
6.3 Array predefiniti	16
6.4 Operazioni con gli array	17
6.5 Maschere	18
6.6 Matrici	19
6.7 Esercizi	20
7 Terza lezione	22
7.1 Le funzioni	22
7.2 Istruzioni di controllo	22
7.2.1 Espressioni condizionali: if, else, elif	22
7.2.2 Cicli: while, for	23
7.3 Ancora funzioni	25
7.4 funzioni lambda	25
7.5 Grafici	26
7.6 Standard input	29
7.7 Prestazioni: <i>pure Python</i> vs librerie	30
7.8 Prestazioni: globale vs locale	31
7.9 Gestione errori	32
7.9.1 Try e except	32
7.9.2 Raise Exception	33
7.10 Esercizi	33
8 Quarta lezione	36
8.1 Importare file Python	36
8.2 Fit	36
8.3 Dietro curve fit: Levenberg-Marquardt	41
9 Lezione Bonus: Version control	47
10 Prima Lezione A	49
10.1 Metodo delle potenze	49
10.2 Equazione di Schrödinger	51
10.3 Algoritmo QR	52
10.4 Lanczos	54

11 Seconda lezione A	56
11.1 Trasformate di Fourier	56
11.1.1 DFT	56
11.1.2 FFT	57
11.1.3 RFFT	59
11.2 Applicazioni delle FFT	61
11.2.1 Derivate con FFT	61
11.2.2 Equazione di Burgers	63
11.2.3 Equazione di Schrödinger	65
11.2.4 Altre applicazioni	67
12 Terza Lezione A	68
12.1 Programmazione a oggetti: problema N-body	68
12.2 Breve compendio di meccanica Hamiltoniana	71
12.3 Più che una funzione	74
13 Quarta Lezione A	78
13.1 Reti neurali	78
A Zeri di una funzione	86
A.1 Bisezione	86
A.2 Metodo di Newton	87
A.3 Zeri in più dimensioni	89
B Calcolo degli integrali	93
C Risolvere numericamente le ODE: IVP	96
C.1 Calcolo delle derivate	96
C.2 Esponenziale	99
C.3 Pendolo	101
C.4 Animazione	103
D Risolvere numericamente le ODE: BVP	105
D.1 Shooting	105
D.2 Relaxation	109
E Sistemi lineari	113
E.1 Metodo Gauss-Seidel	113
E.2 Successive over-relaxation	113
E.3 Metodo del gradiente coniugato	115
F Risolvere numericamente le PDE	118
F.1 Equazione del trasporto	118
F.2 Equazione del calore	119
G Presa dati da foto	121
H Fit	122
H.1 Fit con scipy	122
H.2 Fit circolare, metodo di Coope	124
H.3 Fit di un'ellisse, metodo di Halir e Flusser	127
I Metodi Montecarlo	130
I.1 Generatori numeri pseudo-casuali	130
I.2 Calcolo di Pi greco	131
J Propagazione errori	133
J.1 Propagarli a mano	133
J.2 Uncertainties	133

K Interpolazione	135
K.1 Interpolazione lineare	135
K.2 Interpolazione Polinomiale	136
K.3 Scipy.interpolate	137
L Risolve numericamente le SDE	139
L.1 Processo di Ornstein–Uhlenbeck	139
L.2 Moto geometrico Browniano	140
M Ottimizzazione	142
M.1 Discesa del gradiente	142
M.2 Principio di inerzia	143
N Machine Learning	145
N.1 Classificatore	145
N.2 Regressori	146
N.3 Salvare il modello	147
O Creare un eseguibile	150
O.1 Esegibile windows	150
O.2 Esegibile linux	151
P Bibliografia e Conclusioni	152

1 Scopo delle note e caveat

Lo scopo di queste note è fornire una breve introduzione al linguaggio di programmazione Python per il corso: "Quattro brevi lezioni di Python", organizzato dal comitato locale AISF Pisa. Sono in realtà presenti più elementi del necessario nella volontà o di approfondire alcuni aspetti o, più che altro, di dare un assaggio, un'introduzione, di quello che nella vita di un fisico capita spesso di utilizzare (gli argomenti introdotti sono molti, di vario genere, e una trattazione esaustiva richiederebbe troppo lavoro, in caso è consigliato il libro Numerical recipies disponibile sia per il fortran sia per C). Non pretendo vengano letti ma se siete curiosi, loro son lì, non mordono.

Con questa stessa filosofia sono infatti scritte le lezioni per il corso "Avanzato", denominate nei titoli delle sezioni con una "A" (e.g. "Prima lezione A"). Si trattava infatti di argomenti inizialmente presenti come appendici che sono stati promossi ad argomenti di un secondo corso. Questa volta, se prima lo scopo era fornire un'introduzione, ora si vuole spiegare sia argomenti magari un po' più avanzati dal punto di vista della programmazione sia qualche semplice applicazione di interesse fisico.

Nelle note sono presenti i codici in modo che possano essere consistenti da sole e quindi il lettore possa rendersi subito conto di come implementare il tutto. Tuttavia copiare e incollare i codici potrebbe creare fastidio quando saranno eseguiti, a causa di come i vari editor leggono spazi, segni di operazioni o altro; conviene piuttosto copiarli a mano o prenderli dalla cartella dove sono presenti anche queste note: <https://github.com/Francesco-Zeno-Costanzo/4BLP>. Alcuni commenti sono in inglese perché si tratta di codici presenti anche in altre repository della mia pagina github.

2 Introduzione

Python è un linguaggio di programmazione generalista noto per essere semplice da utilizzare per noi poveri umani, ovvero la fase di scrittura del codice è molto più leggera e scorrevole, rispetto ad esempio ad un codice in linguaggio C. Inoltre, a differenza di altri linguaggi, esso è interpretato e non compilato; questo porta dei vantaggi, ad esempio se si verifica un errore a tempo di esecuzione la shell ci avverte indicandoci le righe di codice da noi scritte dove l'errore è avvenuto. In linguaggi compilati, come C, fortran o altri, il compilatore crea un file chiamato eseguibile dal quale però non può risalire al codice scritto da noi e quindi ciò che causa un errore a tempo di esecuzione (e.g. il famoso segmentation fault) è difficile da ritrovare. Ovviamente a causa della conservazione della massa, o si ha la botte piena o la moglie ubriaca, aut aut terzum non datur; nella fattispecie un esempio di svantaggio che possiede un linguaggio interpretato rispetto ad uno compilato è nelle prestazioni: Python è molto più lento di C o fortran, anche se un buon uso delle molte e vaste librerie che Python possiede può migliorare un po' le cose.



2.1 Notazioni

Nel seguito delle note saranno presenti codici in dei riquadri e, per completezza, dopo la riga [Output] viene presentato anche il risultato degli stessi nel caso ci fossero (i.e. ciò che viene stampato su shell).

2.2 I 4 (per ora) comandamenti dell'informatica

- Se funziona quanto basta
non toccare che si guasta.
- RTFM: Read The Fucking Manual. La documentazione on-line è il miglior posto dove trovare risposte.
- Non dite che non funziona finché non avete provato a spegnere e riaccendere.
- Il computer fa esattamente quello che voi gli dite di fare non quello che volete che faccia.

3 Lezione Zero: Installazione

3.1 Installazione dell'ambiente: Pyzo

Il primo passo è procurarsi l'ambiente software tramite il quale è possibile scrivere, gestire e compilare il codice. La scelta su quale ambiente utilizzare è chiaramente arbitraria e soggetta al gusto del singolo. Un buon ambiente che si consiglia è Pyzo. Alla pagina <https://pyzo.org/start.html> è possibile trovare i link per scaricare l'opportuno installer a seconda del sistema operativo che si usa (quelli indicati sotto lo Step 1). Si faccia anche attenzione alla differenza tra gli installer per sistemi a 32 o 64 bit¹. Nel caso in cui vi piaccia smanettare con i sistemi Linux, consigliamo come procedura alternativa (e più immediata) accedere al terminale e digitare i seguenti comandi:

```
1 $ sudo apt -get install python3 -pip python3 - pyqt5
2 $ sudo python3 -m pip install pyzo -- upgrade
3 $ pyzo
```

Tramite l'ultimo comando si accede alla schermata dell'ambiente Pyzo. A seconda della distribuzione che si utilizza potrebbe essere necessario utilizzare il comando yum al posto di apt-get, in particolare se utilizzate Fedora e derivati invece di Debian/Ubuntu.

3.2 Installazione dell'interprete: Anaconda

Ora che abbiamo l'ambiente bisogna munirisi di un interprete. Tra i tanti, si consiglia Anaconda, che porta in automatico tutti i pacchetti necessari per il lavoro scientifico. Esso è reperibile al seguente indirizzo: <https://www.anaconda.com/download/>. Allo scopo di mantenere la compatibilità con il sistema Pyzo si raccomanda di scaricare la versione corrispondente a Python 3 e non Python 2. Alternativamente è possibile procurarsi Miniconda, che è una versione ridotta e più leggera di Anaconda che arriva con molti meno pacchetti, ma occupa chiaramente meno spazio in memoria. Esso è reperibile al seguente indirizzo: <https://conda.io/miniconda.html>. È fortemente consigliato installare l'interprete nella cartella di default, in modo da rendere più semplice il lavoro di riconoscimento del programma da parte di Pyzo. Una volta installato l'interprete, aprendo Pyzo dovrà essere in grado di riconoscere sulla sinistra un editor di testo e sulla destra, uno sopra l'altro, una console per l'inserimento dei comandi e un file browser per accedere in modo più immediato alle cartelle del computer. Una volta aperto Pyzo, quest'ultimo dovrà riconoscere automaticamente l'interprete appena installato (Anaconda, Miniconda o altro) e potrebbe chiedervi di confermare questa scelta. Nel caso invece non riesca a trovare da solo l'interprete, magari perché installato in una cartella diversa da quella di default o perché ne avete installato più di una versione, bisogna selezionarlo manualmente tramite la procedura seguente. Dalla schermata principale di Pyzo, selezionate il menu "Shell" in alto, scegliendo quindi "Edit shell configurations". Nella finestra che viene aperta, selezionate dal menu a tendina del campo "exe" la versione di Python (ad esempio, anaconda3) che avete appena installato. Cliccate sul pulsante "Done" e poi riavviate Pyzo per terminare questa procedura. Se invece non vedete l'interprete appena installato tra le opzioni del menu a tendina, occorre specificare manualmente il percorso intero dove è stato installato l'interprete. Dato che sono stati registrati numerosi problemi nella ricerca del percorso da indicare per quanto riguarda Anaconda su Mac OS, di seguito è riportato un template del percorso dove avviene l'installazione di default, da indicare per intero.

```
1 /Users/nome_utente/opt/anaconda3/bin/python  
oppure  
1 /Users/nome_utente/anaconda3/bin/python
```

3.3 Installazione dei pacchetti

Python, come tanti altri linguaggi di programmazione, dispone di pacchetti di funzioni già pronte e direttamente utilizzabili da parte del programmatore. Anaconda contiene già tutti i pacchetti che ci serviranno, nel caso in cui abbiate optato per Miniconda, è probabile che abbiate bisogno di scaricare alcuni pacchetti aggiuntivi. L'operazione può essere effettuata accedendo alla console di Pyzo e digitando semplicemente:

```
1 install <nome_del_pacchetto>  
oppure  
1 pip install <nome_del_pacchetto>
```

Per essere sicuri che sia andato tutto bene provate a scrivere:

```
1 import <nome_del_pacchetto>  
se non succede nulla siete apposto
```

¹ Al seguente link potete trovare informazioni per scoprire, nel caso in cui non lo sapeste, se l'architettura del vostro computer è a 32 o 64 bit: <https://support.microsoft.com/it-it/help/15056/windows-7-32-64-bit-faq>

4 The Zen of Python

Una volta installato pyzo, oppure python, apriete un terminale, che sia quello di pyzo, la shell di ubuntu (dopo aver digitato python3), o di anaconda, e scrivete:

```
1 >>> import this
```

ecco cosa uscirà:

The Zen of Python, by Tim Peters

Beautiful is better than ugly.
Explicit is better than implicit.
Simple is better than complex.
Complex is better than complicated.
Flat is better than nested.
Sparse is better than dense.
Readability counts.
Special cases aren't special enough to break the rules.
Although practicality beats purity.
Errors should never pass silently.
Unless explicitly silenced.
In the face of ambiguity, refuse the temptation to guess.
There should be one– and preferably only one –obvious way to do it.
Although that way may not be obvious at first unless you're Dutch.
Now is better than never.
Although never is often better than *right* now.
If the implementation is hard to explain, it's a bad idea.
If the implementation is easy to explain, it may be a good idea.
Namespaces are one honking great idea – let's do more of those!

5 Prima lezione

5.1 Funzione print

Se un macchina fosse senziente e gentile, quindi non un'intelligenza artificiale cresciuta su twitter, forse come prima cosa saluterebbe tutti e il modo per comunicare è la funzione print, che ci permette di stampare a schermo (sulla shell) delle informazione contenute nel codice. Vediamo quindi il più classico degli esempi:

```
1 print('Hello world!')  
2  
3 [Output]  
4 Hello world!
```

Bene, se siete riuscite ad eseguire questo codice siete ufficialmente dei programmatori. Giusto per voler essere pedanti i numeri che vedete a sinistra non hanno un vero e proprio significato per l'esecuzione; il loro unico scopo è indicare all'utente a che riga si trova. Questa funzione può stampare sia valori che espressioni (in gergo stringhe) [capiremo tra poco cosa queste magiche cose che vengono stampate sono effettivamente]:

```
1 print('Hello world!')  
2 print('42')  
3  
4 print('Hello world!', 42)  
5 print('Adesso vado \n a capo')  
6  
7 [Output]  
8 Hello world!  
9 42  
10 Hello world! 42  
11 Adesso vado  
12 a capo
```

5.2 Commenti

Come vedete dal codice precedente alla linea 4 ci sta un simbolo poco familiare a chi per la prima volta approccia la programmazione: "\n" chi era costui? Scritto così il codice, l'unico modo per capirlo è che voi eseguiate il

codice e vedendo il risultato cerchiate di risalire al significato. Ora chiaramente questa procedura è abbastanza sbrigativa ma se dovete capire diverse parti del codice, il quale magari impiega un tempo non trascurabile a darvi un risultato, beh diciamo che non è una bella vita. Al fine dunque di rendere fruibile sia ad altri o anche al voi stesso del futuro il codice è opportuno inserire i commenti, ovvero frasi che non vengono lette dall'interprete (o dal compilatore) che spiegano cosa voi stiate facendo; altrimenti vi ritroverete nella scomoda situazione in cui solo Dio saprebbe spiegarvi il funzionamento del vostro codice.

```

1 #per i commenti che occupano una singola linea di codice si usa il cancelletto
2 #stampo hello world
3 print('Hello world!')
4
5 """
6 per un commento di maggiori linee di codice
7
8 vanno usate tre virgole per racchiuderlo
9 """
10 ''
11 ma van bene
12
13 anche tre apici
14 ''
15 [Output]
16 Hello world!

```

Ricordate, un codice viene letto molte più volte rispetto a quanto viene scritto. Quindi commentate, sempre.

5.3 Variabili

Una variabile è un nome, un simbolo, che si da ad un certo valore. In Python non è necessario definire le variabili prima di utilizzarle specificandone il tipo, come faremmo in C o fortran, esse si creano, o meglio si inizializzano, usando il comando di assegnazione '='. Facciamo un esempio con variabili numeriche:

```

1 numerointero= 13
2 numeroavirgolamobile= 13.
3
4 print('Numero intero:', numerointero, 'Numero in virgola mobile:', numeroavirgolamobile)
5 #oppure possiamo stampare in questo modo:
6 print(f'Numero intero: {numerointero}, Numero in virgola mobile: {numeroavirgolamobile}')
7
8 [Output]
9 Numero intero: 13 Numero in virgola mobile: 13.0
10 Numero intero: 13 Numero in virgola mobile: 13.0

```

Un'altra cosa molto fondamentale, oltre i commenti, per la fruibilità del codice è il modo di dare nomi alle variabili. Nel codice di sopra il nome delle variabili è alquanto esplicativo del loro significato, ed è in genere buona norma, appunto, dare nomi che siano intuitivi. Ora non vi dico che dovete chiamare una variabile: "momentoagolaresullasseZ", che ci vogliono tre anni solo a scriverla, che nel frattempo pure il protone inizia a decadere, ma di certo chiamarla "L.z" piuttosto che "a" o "pippo" è una strada che andrebbe perseguita. Ovviamente le variabili possono essere non solo numeri ma anche molto altro, e possiamo verificarne il tipo grazie alla funzione 'type()':

```

1 #inizializziamo delle variabili
2 n = 7
3 x = 7.
4 stringa = 'kebab'
5 lista = [1, 2., 'cane']
6 tupla = (42, 'balena')
7 dizionario = {'calza': 0, 'stampante': 0.5}
8
9 #stampiamole e stampiamone il tipo
10 print(n, type(n))
11 print(x, type(x))
12 print(stringa, type(stringa))
13 print(lista, type(lista))
14 print(tupla, type(tupla))
15 print(dizionario, type(dizionario))
16
17 [Output]
18 7 <class 'int'>
19 7.0 <class 'float'>
20 kebab <class 'str'>
21 [1, 2.0, 'cane'] <class 'list'>
22 (42, 'balena') <class 'tuple'>
23 {'calza': 0, 'stampante': 0.5} <class 'dict'>

```

Dizionari, liste, tuple, possono essere elementi molto utili. Giusto qualche info un po' anticipata tutti essi sono indicizzati, i primi due sono modificabili le tuple invece sono immutabili, come abbiamo visto non ci sono particolari problemi di casting, essi cioè possono contenere elementi di vario genere. I dizionari inoltre, utilizzando un sistema chiave valore possono essere utili per gestire alcuni output di codici lunghi o complessi; per esempio sono molto utili nella programmazione in parallelo, dove l'ordine si perde quindi un dizionario è un ottimo modo per tenere traccia di tutta l'esecuzione.

```

1 """
2 liste tuple e dizionari sono oggetti indicizzati che possono
3 ogni tipo di informazioni al loro interno
4 """
5 lista = [0, 1, 'lampada', [0, 23], (29, 11), {3:4, 'capra':'panca'}] # lista
6 tupla = (3, 2, "ruspa", [0, 0], (3, 9), {87:90})
7 dictz = {0:1, 1:[2, 3], 'astolfo':(2, 3), "diz":{1:2}}
8
9 # stampo tutto a schermo
10 print(lista)
11 print(tupla)
12 print(dictz)
13
14 # tramte l'indice accedo all'elemento della lista o della tupla
15 print(lista[3])
16 print(tupla[3])
17
18 # per il dizionario va invece usata la chiave
19 print(dictz['astolfo'])
20 print(dictz[1])
21
22 # modifco elemento all'indice zero nella lista e nel dizionario
23 lista[0] = (0, 1, 2, 3, 4, 5)
24 dictz[0] = "BUONA PASQUA"
25
26 print(lista)
27 print(dictz)
28
29 # se lo facessi con la tupla avrei un errore
30 tupla[0] = 1
31
32 [Output]
33 [0, 1, 'lampada', [0, 23], (29, 11), {3: 4, 'capra': 'panca'}]
34 (3, 2, 'ruspa', [0, 0], (3, 9), {87: 90})
35 {0: 1, 1: [2, 3], 'astolfo': (2, 3), 'diz': {1: 2}}
36 [0, 23]
37 [0, 0]
38 (2, 3)
39 [2, 3]
40 [(0, 1, 2, 3, 4, 5), 1, 'lampada', [0, 23], (29, 11), {3: 4, 'capra': 'panca'}]
41 {0: 'BUONA PASQUA', 1: [2, 3], 'astolfo': (2, 3), 'diz': {1: 2}}
42 Traceback (most recent call last):
43   File "/home/francesco/GitHub/4BLP/1 Prima Lezione/codiciL1/list_tuple_dict.py", line 30, in
44     <module>
45       tupla[0] = 1
46 TypeError: 'tuple' object does not support item assignment

```

Concentriamoci attualmente su come fare le classiche operazioni matematiche tra variabili, numeriche ovviamente:

```

1 x1 = 3
2 y1 = 4
3
4 somma = x1 + y1
5 prodotto = x1*y1
6 differenza = x1 - y1
7 rapporto = x1/y1
8 potenza = x1**y1
9
10 print(somma, prodotto, differenza, rapporto, potenza)
11 [Output]
12 7 12 -1 0.75 81

```

E fin qui tutto bene, tutto abbastanza normale e mi raccomando ricordate che l'elevamento a potenza si fa con doppio asterisco `**`. Vale la pena dilungarsi un attimo su una piccola questione: l'aritmetica in virgola mobile è intrinsecamente sbagliata poiché giustamente il computer ha uno spazio di memoria finita e quindi non può tenere infinite cifre decimali. A seconda del tipo della variabile ci si ferma ad tot di cifre decimali, 8 per i float32, 16 per i float64; dove il numero che segue la parola float indica il numero di bit che il computer usa per

scrivere il numero. Questa precisione può comunque essere cambiata grazie alla libreria : "mpmath"; la quale permette di settare una precisione arbitraria, divertitevi a scoprirla. Vediamo un classico esempio:

```

1 x = 0.1
2 y = 0.2
3 z = 0.3
4
5 print(x + y)
6 print(z)
7
8 [Output]
9 0.30000000000000004
10 0.3

```

Il precedente è solo uno tra i molti esempi che si potrebbero fare per far notare come l'aritmetica dei numeri in virgola mobile possa dare problemi. Come esercizio lasciato al lettore provate a vedere se è vero che $a + (b + c) = (a + b) + c$ con a, b, c numeri in virgola mobile, probabilmente il computer non sarà d'accordo. Ai computer i numeri in virgola mobile, i numeri reali, non piacciono molto, preferiscono i numeri interi e quelli razionali (e ovviamente adorano le potenze di due, grazie codice binario):

```

1 #variabili
2 x = 0.1
3 y = 0.2
4 z = 0.3
5 #sommo le prime due
6 t = x + y
7
8 """
9 applico una funzione che mi fornisce
10 una tupla contenente due numeri interi
11 il cui rapporto restituisce il numero iniziale.
12 output del tipo: (numeratore, denominatore)
13 """
14 print(t.as_integer_ratio())
15 print(z.as_integer_ratio())
16
17 [Output]
18 (1351079888211149, 4503599627370496)
19 (5404319552844595, 18014398509481984)

```

Vediamo quindi che un numero reale è scritto in realtà, e altrimenti non si potrebbe fare, come numero razionale. Per quanto riguarda i numeri in virgola mobile, possiamo scegliere quante cifre dopo la virgola stampare, vediamolo con un esempio:

```

1 #definiamo una variabile
2 c = 3.141592653589793
3
4 #stampa come intero
5 print('%d' %c)
6
7 #stampa come reale
8 print('%f' %c) #di default stampa solo prime 6 cifre
9 print(f'{c}') #di default stampa tutte le cifre
10
11 #per scegliere il numero di cifre, ad esempio sette cifre
12 print('.7f' %c)
13 print(f'{c:.7f}')
14
15 [Output]
16 3
17 3.141593
18 3.141592653589793
19 3.1415927
20 3.1415927

```

Notare che il computer esegue un arrotondamento. Inoltre abbiamo usato la lettera "f" perché vogliamo un numero decimale, se volessimo altri formati potremmo usare: "i" o "d" per gli interi, "o" per un numero in base otto, "x" per un numero esadecimale, "e" per un numero in notazione scientifica. Infine le lettere "c" e "s" indicano rispettivamente un singolo carattere e una stringa.

Una variabile può essere ridefinita e cambiare valore, addirittura cambiate tipo, il computer userà l'assegnazione più recente (attenzione mi raccomando che ci vuole poco che una cosa del genere fornisca errori):

```

1 #definiamo una variabile
2 x = 30
3
4 """

```

```

5
6 operazioni varie
7
8
9 """
10
11 #ridefiniamo la variabile
12 x = 18
13
14 print('x=', x)
15
16 """
17 E' possibile anche sovrascrivere una variabile
18 con un numero che dipende dal suo valore precedente:
19 """
20 x = x + 1 #incrementiamo di uno
21 #Oppure:
22 x += 1
23 print('x=', x)
24
25 x = x * 2 #moltiplichiamo per due
26 #Oppure:
27 x *= 2
28 print('x=', x)
29
30 [Output]
31 x= 18
32 x= 20
33 x= 80

```

Come si vede i vari comandi $x = x \text{ operazione numero}$ possono essere abbreviati con $x \text{ operazione= numero}$.

5.4 Librerie

Le librerie sono luoghi misticci create dagli sviluppatori, esse contengono molte funzioni, costanti e strutture dati predefinite; in generale se volette fare qualcosa esisterà una libreria con una funzione che implementa quel qualcosa o che comunque vi può aiutare in maniera non indifferente (ogni tanto però è interessante andare a vedere cosa ci sta dietro, ma ne parleremo, non molto, ma in vari ambiti, più avanti). Prima di poter accedere ai contenuti di una libreria, è necessario importarla. Per farlo, si usa il comando import. Solitamente è buona abitudine importare tutte le librerie che servono all'inizio del file. Ecco un paio di esempi:

```

1 import numpy
2
3 #per usare un contenuto di questa libreria basta scrivere numpy.contenuto
4 pigreco = numpy.pi
5 print(pigreco)
6
7 #Possiamo anche ribattezzare le librerie in questo modo
8 import numpy as np
9 #da ora all'interno del codice numpy si chiama np
10
11 eulero = np.e
12 print(eulero)
13
14 [Output]
15 3.141592653589793
16 2.718281828459045
17
18
19 import math
20
21 coseno=math.cos(0)
22 seno = math.sin(np.pi/2) #python usa di default gli angoli in radianti!!!
23 senosbagliato = math.sin(90)
24
25 print('Coseno di 0=', coseno, "\nSeno di pi/2=", seno, "\nSeno di 90=", senosbagliato)
26
27 #bisogna quindi stare attenti ad avere tutti gli angoli in radianti
28 angoloingradi = 45
29 #questa funzione converte gli angoli da gradi a radianti
30 angoloinradianti = math.radians(angoloingradi)
31
32 print("Angolo in gradi:", angoloingradi, "Angolo in radianti:", angoloinradianti)
33
34 [Output]
35 Coseno di 0= 1.0

```

```

18 Seno di pi/2= 1.0
19 Seno di 90= 0.8939966636005579
20 Angolo in gradi: 45 Angolo in radianti: 0.7853981633974483

```

Le due librerie qui usate contengono funzioni simili, ad esempio il seno è implementato sia in numpy che in math, cambia il fatto che math può calcolare il seno di un solo valore, mentre numpy, come vedremo, può calcolare il seno di una sequenza di elementi. Come sapere tutte le possibili funzioni contenute nelle librerie e come usarle? "Leggetevi il cazzo di manga" (n.d.r. Leggetevi la documentazione disponibile tranquillamente online). Altra cosa interessante è che essendo la documentazione scritta sul codice, esattamente come qui noi scriviamo i commenti, potete consultarla anche da shell. Su Pyzo vi basta scrive sulla shell: "nomefunzione?", mentre se usate una shell normale, stile quella di ubuntu dovete prima digitare "python" oppure "python3" sulla shell e vi si aprirà l'ambiente python dove potete importare i pacchetti come se scriveste codice e per vedere la documentazione vi basta fare "help(nomefunzione)". Inoltre spesso si trova la sintassi:

```

1 from numpy import *

```

con numpy o con qualsiasi altra libreria. Questo ci permette di non dover scrivere ogni volta "numpy." o "np." davanti le funzioni che vogliamo utilizzare. Bisogna però stare attenti all'esistenza di funzioni con stesso nome ma che fanno cose diverse, come dicevamo prima la funzione seno ad esempio. In un contesto in cui si importano sia math che numpy usando l'asterisco ci sarà un conflitto su che funzione usare; o meglio, verrà usata la funzione della libreria più recentemente importata. il che vuol dire che se scrivete:

```

1 from numpy import *
2 from math import *

```

la funzione seno chiamata sarà quella di math e quindi avrete un errore se il possibile input non dovesse essere un numero ma un array.

5.5 Come leggere il Traceback

Quelli che abbiamo sopra sono esempi di errori che danno come risultato in genere l'interruzione del codice. Quindi quando la shell di Pyzo si tinge di rosso cremisi che nemmeno fosse appena finita una battaglia campale di Vlad figlio del drago voivoda di Valacchia è buona norma leggere attentamente il messaggio di errore, il traceback (che come suggerisce il nome va letto al contrario; da sotto verso sopra), e capire cosa si è sbagliato. Il traceback infatti è la catena di eventi che hanno portato all'errore. Analizziamo il caso di sopra.

```

1 Traceback (most recent call last):
2   File "<tmp 1>", line 5, in <module>
3     b = 1/a
4 ZeroDivisionError: division by zero

```

La prima riga ci fa capire che c'è stato un errore.

La seconda ci dice che nel file chiamato "<tmp1>" (perché mi ero dimenticato di salvarlo ancora, sennò ci sarebbe il path del file) alla linea 5, nel codice eseguito(se fosse dentro una funzione ci sarebbe, oltre a questa, un'altra riga uguale con il nome della funzione al posto di <module>) è successo qualcosa.

La terza linea è la linea di codice a cui è avvenuto il misfatto.

La quarta ci da due informazioni, separate dai due punti: il tipo di errore che è avvenuto e le informazioni riguardo ad esso.

Ora capisco che prima vi dico di leggerlo al contrario e poi qui ve lo descrivo nel normale ordine di lettura, ma è solo per farvi capire il significato delle varie linee di errore. Facciamo adesso un esempio un po' più complicato, leggendolo correttamente, in cui useremo funzioni quindi magari potete tornare a rileggerlo dopo se volete.

```

1 def err(c):
2     b = 1/c
3     return b
4
5 def run(c):
6     print(err(c))
7
8 if __name__ == "__main__":
9     run(0)
10
11 [Output]
12 Traceback (most recent call last):
13   File "C:\Users\franc\Documents\GitHub\4BLP\Prima Lezione\codiciL1\err_trace.py", line 9, in <module>
14     run(0)
15   File "C:\Users\franc\Documents\GitHub\4BLP\Prima Lezione\codiciL1\err_trace.py", line 6, in run
16     print(err(c))

```

```
17     File "C:\Users\franc\Documents\GitHub\4BLP\Prima Lezione\codiciL1\err_trace.py", line 2, in 
18         err
19     b = 1/c
ZeroDivisionError: division by zero
```

Leggiamolo insieme, partendo dal basso abbiamo:

C'è stata una divisione per zero che ha causato l'errore di tipo ZeroDivision error alla linea 2 nella funzione "err" contenuta nel codice avente quel path (sta volta il codice era salvato).

L'errore è stato causato dalla chiamata della funzione "err" da parte della funzione "run" a linea 6, contenuta nello stesso file, hanno infatti stesso path.

Ma ancora prima l'errore è causato dalla chiamata della funzione "run" (che ha chiamato err, che ha prodotto l'errore) all'interno dello stesso codice, alla linea 9. Insomma fiera dell'est di Branduardi spostati proprio. Se proprio non capite che vi sta dicendo, buona norma è copiare la riga più bassa del traceback e incollarla su Google. Qualcuno avrà già avuto il vostro problema.

5.6 Un paio di trick

Abbiamo visto che Python non necessita di punti e virgola per delimitare una linea come in C. Tuttavia è possibile usarli con lo stesso scopo, quindi se volette mettere due comandi Python sulla stessa riga vi basta separarli con un ";" e verranno eseguiti come fossero due righe diverse. Inoltre possono essere usate sulla shell per nascondere l'output del comando, dato che come premette invio sulla shell la riga appena scritta viene interpretata, esattamente come su Mathematica. Sempre su shell invece se avete bisogno di fare dei calcoli veloci stile calcolatrice potete usare l'underscore per riferirvi al risultato precedente, come quando sulla calcolatrice premette il tasto Ans.

6 Seconda lezione

Ripetiamo tutti insieme: Python conta da zero.

6.1 Gli array

Un array unidimensionale è semplicemente una sequenza ordinata di numeri; è, in sostanza, un vettore e come tale si comporta. Utilizzeremo la libreria numpy. Per alcuni aspetti essi sono simili alle liste native di Python ma le differenze sono molte, in seguito ne vedremo alcune. Cominciamo con qualche esempio:

```
1 import numpy as np
2
3 #Creiamo un array di 5 elementi
4 array1 = np.array([1.0, 2.0, 4.0, 8.0, 16.0]) #scrivere 2.0 equivale a scrivere 2.
5
6 print(array1)
7
8 #per accedere a un singolo elemento dell'array basta fare come segue:
9 elem = array1[1]
10
11 #ATTENZIONE! Gli indici, per Python, partono da 0, non da 1!
12 print(elem)
13
14 [Output]
15 [ 1.  2.  4.  8. 16.]
16 2.0
```

ora, avendo creato il nostro array potremmo volendo aggiungere o togliere degli elementi:

```
1 import numpy as np
2
3 array1=np.array([1.0, 2.0, 4.0, 8.0, 16.0])
4
5 #Aggiungiamo ora un numero in una certa posizione dell'array:
6 array1 = np.insert(array1, 4, 18)
7 ''
8 abbiamo aggiunto il numero 18 in quarta posizione, la sintassi e':
9 np.insert(array a cui vogliamo aggiungere un numero, posizione dove aggiungerlo, numero)
10 ''
11 print(array1)
12
13 #Per aggiungere elementi in fondo ad un array esiste anche il comando append della libreria
14     numpy:
15 array2 = np.append(array1, -4.)
16 print(array2)
17 #Mentre per togliere un elemento basta indicare il suo indice alla funzione remove di numpy:
18 array2 = np.delete(array2, 0)
19 print(array2)
20
21 [Output]
22 [ 1.  2.  4.  8. 18. 16.]
23 [ 1.  2.  4.  8. 18. 16. -4.]
24 [ 2.  4.  8. 18. 16. -4.]
```

Analogamente ciò può essere fatto per le liste con le funzioni native, quindi non di numpy, append e pop. Più corretto sarebbe dire che esse sono dei metodi della classe che gestisce le liste, infatti come vediamo nel prossimo esempio la sintassi è leggermente diversa, ma non vale la pena complicarci troppo la vita.

```
1 # lista iniziale
2 lista = [1, 2, 3, 4]
3 print(lista)
4
5 #aggiungo un elemento in coda, quindi alla fine della lista
6 lista.append(42)
7 print(lista)
8
9 #rimuovo l'ultimo elemento
10 lista.pop()
11 print(lista)
12
13 [Output]
14 [1, 2, 3, 4]
15 [1, 2, 3, 4, 42]
16 [1, 2, 3, 4]
```

Altri metodi interessanti per le liste sono "index()", "remove()", "count()", "insert()", "reverse()", "extend()", "sort()"; divertitevi a scoprire cosa ciascuno fa.

6.2 Tipi di array

Come le variabili numeriche sopra anche gli array posseggono i tipi e qui viene la prima differenza con le liste, se ad un array di numeri provassimo ad aggiungere un elemento che sia una stringa avremmo un errore; questo perché ogni array di numpy ha un suo tipo ben definito, che viene fissato, implicitamente o esplicitamente, al momento della creazione. Possiamo sì creare un array di tipo misto ma con tale array non si potrebbero fare le classiche operazioni matematiche.

```
1 import numpy as np
2
3 array1 = np.array([1.0, 2.0, 4.0, 8.0, 16.0])
4
5 tipoarray1 = array1.dtype
6 print(tipoarray1)
7
8 a = np.array([0, 1, 2])
9 #abbiamo scritto solo numeri interi => array di interi
10
11 b = np.array([0., 1., 2.])
12 #abbiamo scritto solo numeri con la virgola => array di numeri float
13
14 """
15 #nota: anche se si dice "numero con la virgola",
16 vanno scritti sempre col punto!
17 La virgola separa gli argomenti
18 """
19
20 c = np.array([0, 3.14, 'giallo'])
21 #quest'array è misto. Ci sono sia numeri interi che float che stringhe
22
23
24 #ora invece il tipo viene definito in maniera esplicita:
25 d = np.array([0., 1., 2.], 'int')
26 e = np.array([0, 1, 2], 'float')
27
28 print(a, a.dtype)
29 print(b, b.dtype)
30 print(c, c.dtype)
31 print(d, d.dtype)
32 print(e, e.dtype)
33
34
35 [Output]
36 float64
37 [0 1 2] int32
38 [0. 1. 2.] float64
39 ['0' '3.14' 'giallo'] <U32
40 [0 1 2] int32
41 [0. 1. 2.] float64
```

6.3 Array predefiniti

Vediamo brevemente alcuni tipi di array già definiti e di uso comune:

```
1 import numpy as np
2
3 #array contenente tutti zero
4 arraydizeri_0 = np.zeros(3)#il numero specificato è la lunghezza
5 arraydizeri_1 = np.zeros(3, 'int')
6
7 #array contenente tutti uno
8 arraydiuni_0 = np.ones(5)#il numero specificato è la lunghezza
9 arraydiuni_1 = np.ones(5, 'int')
10
11 print(arraydizeri_0, arraydizeri_1)
12 print(arraydiuni_0, arraydiuni_1)
13
14 """
15 questo invece è un array il cui primo elemento è zero
16 e l'ultimo elemento è 1, lungo 10 e i cui elementi sono
17 equispaziati in maniera lineare tra i due estremi
18 """
19 equi_lin = np.linspace(0, 1, 10)
20 print(equi_lin)
21
```

```

22 """
23 questo invece e' un array il cui primo elemento e' 10^1
24 e l'ultimo elemento e' 10^2, lungo 10 e i cui elementi sono
25 equispaziati in maniera logaritmica tra i due estremi
26 """
27
28 equi_log = np.logspace(1, 2, 10)
29 print(equi_log)
30
31 [Output]
32 [0. 0. 0.] [0 0 0]
33 [1. 1. 1. 1.] [1 1 1 1 1]
34 [0. 0.11111111 0.22222222 0.33333333 0.44444444 0.55555556
35 0.66666667 0.77777778 0.88888889 1. ]
36 [ 10. 12.91549665 16.68100537 21.5443469 27.82559402
37 35.93813664 46.41588834 59.94842503 77.42636827 100. ]

```

6.4 Operazioni con gli array

Vediamo ora un po' di cose che si possono fare con gli array:

```

1 import numpy as np
2
3 array1 = np.array([1.0, 2.0, 4.0, 8.0, 16.0])
4
5 primi_tre = array1[0:3]
6 print('primi_tre = ', primi_tre)
7 """
8 Questa sintassi seleziona gli elementi di array1
9 dall'indice 0 incluso all'indice 3 escluso.
10 Il risultato e' ancora un array.
11 """
12
13 esempio = array1[1:-1]
14 print(esempio)
15 esempio = array1[-2:5]
16 print(esempio)
17 #Questo metodo accetta anche valori negativi, con effetti curiosi
18
19
20 elementi_pari = array1[0::2]
21 print('elementi_pari = ', elementi_pari)
22 """
23 In questo esempio invece, usando invece due volte il simbolo :
24 intendiamo prendere solo gli elementi dall'indice 0 saltando di 2 in 2.
25 Il risultato e' un array dei soli elementi di indice pari
26 """
27
28 rewind = array1[::-1]
29 print('rewind = ', rewind)
30 """
31 Anche qui possiamo usare valori negativi.
32 In particolare questo ci permette di saltare "all'indietro"
33 e, ad esempio, di invertire l'ordine di un'array con un solo comando
34 """
35
36 [Output]
37 primi_tre = [1. 2. 4.]
38 [2. 4. 8.]
39 [ 8. 16.]
40 elementi_pari = [ 1. 4. 16.]
41 rewind = [16. 8. 4. 2. 1.]

```

Benché strano python non rifiuta gli indici negativi semplicemente perché essi indicizzano l'array al contrario ma partendo da 1. Quindi "-1" indica l'ultimo elemento, "-2" il penultimo e così via. Grande comodità sono le operazione matematiche che possono essere fatte direttamente senza considerare i singoli valori, o meglio Python ci pensa da sé a fare le operazioni elemento per elemento. Gli array devono avere la stessa dimensione altrimenti avremmo errore, infatti potrebbe esserci un elemento spaiato.

```

1 import math
2 import numpy as np
3
4 v = np.array([4, 5, 6])
5 w = np.array([1.2, 3.4, 5.8])
6

```

```

7 #classiche operazioni
8 somma = v + w
9 sottr = v - w
10 molt = v * w
11 div = v / w
12
13 print(v, w)
14 print()
15 print(somma, sottr, molt, div)
16 print()
17 #altri esempi
18 print(v**2)
19 print(np.log10(w))
20
21 """
22 come dicevamo prima qui' otterremmo errore poiche'
23 math lavora solo con numeri o, volendo,
24 array unidimensionali lunghi uno
25 """
26 print(math.log10(w))
27
28 [Output]
29 [4 5 6] [1.2 3.4 5.8]
30
31 [ 5.2 8.4 11.8] [2.8 1.6 0.2] [ 4.8 17. 34.8] [3.33333333 1.47058824 1.03448276]
32
33 [16 25 36]
34 [0.07918125 0.53147892 0.76342799]
35 Traceback (most recent call last):
36   File "<tmp 1>", line 26, in <module>
37     print(math.log10(w))
38 TypeError: only size-1 arrays can be converted to Python scalars

```

Se provassimo le stesse con delle liste solo la somma non darebbe errore, ma il risultato non sarebbe comunque lo stesso che otteniamo con gli array. Anche moltiplicare un array o una lista per un numero intero produce risultati diversi se provate vi sarà facile capire perché si è specificato che il numero deve essere intero. Ai fisici piace dire che un vettore è un qualcosa che trasforma come un vettore, e con questi esempi potrete capire che una lista non "trasforma" come un vettore mentre un array di numpy sì. Per questo nella programmazione scientifica se ne fa largo uso.

6.5 Maschere

i sarete di certo accorti che per creare un array di numpy quel che facciamo è passare una lista alla funzione "np.array" e infatti prima avevamo visto un array che conteneva una stringa, e per cui tutti gli elementi erano diventate stringhe. Similmente è possibile fare un array di valori booleani, cioè vero e falso.

```

1 import numpy as np
2
3 # array che contiene valori logici, detti booleani
4 b = np.array([True, False])
5
6 print(b)
7
8 [Output]
9 [ True False]

```

E fin qui nulla di sorprendente si potrebbe dire. Possiamo fare però una cosa interessante:

```

1 import numpy as np
2
3 # array che contiene valori logici, detti booleani
4 b = np.array([True, False])
5
6 # normalissimo array numerico
7 x = np.array([32, 89])
8 y = x[b] # x in corrispondenza di indici di b
9 print(y)
10
11 [Output]
12 [32]

```

Vediamo che se passiamo come indice del nostro array un array di valori logici, otteniamo un nuovo array, il quale contiene solo gli elementi corrispondenti all'indice che coincide con i valori "True" all'interno dell'array logico. Abbiamo creato quella che si dice una maschera è può essere utili in molti casi, vediamo un altro esempio.

```

1 import numpy as np
2
3 # creo un array
4 x = np.array([5, 4, 2, 8, 3, 9, 7, 2, 6, 3, 9, 8])
5
6 # voglio selezionare solo gli elementi maggiori di una certa soglia
7 mask = x >= 4 # mask e' un array di booleani, secondo la condizione data
8 # mask vale True negli indici in cui il valore di x e' maggiore o uguale a 4
9
10 print(x)
11 print(mask)
12 print(x[mask])
13
14 [Output]
15 [5 4 2 8 3 9 7 2 6 3 9 8]
16 [ True  True False  True False  True  True False  True  True]
17 [5 4 8 9 7 6 9 8]

```

Poi se i nostri dati fossero una funzione del tempo potremmo magari creare la maschera sul tempo e applicarla ai nostri dati, magari perchè vogliamo considerare solo un certo range. Finché gli array son lunghi uguali potete fare quello che volete.

6.6 Matrici

Se un array unidimensionale lungo n è un vettore ad n componenti allora un array bidimensionale sarà una matrice.

```

1 import numpy as np
2
3 #esiste la funzione apposita di numpy per scrivere matrici.
4 matrice1 = np.matrix('1 2; 3 4; 5 6')
5 #Si scrivono essenzialmente i vettori riga della matrice separati da ;
6
7 #equivalente a:
8 matrice2 = np.matrix([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
9 # oppure anche: matrice2 = np.array([[1, 2], [3, 4], [5, 6]])
10 print(matrice1)
11 print(matrice2)
12
13
14 matricedizeri = np.zeros((3, 2)) #tre righe, due colonne: matrice 3x2
15 print('Matrice di zeri:\n', matricedizeri, '\n')
16 matricediuni = np.ones((3,2))
17 print('Matrice di uni:\n', matricediuni, '\n')
18
19 [Output]
20 [[1 2]
21 [3 4]
22 [5 6]]
23 [[1 2]
24 [3 4]
25 [5 6]]
26 Matrice di zeri:
27 [[0. 0.]
28 [0. 0.]
29 [0. 0.]]
30
31 Matrice di uni:
32 [[1. 1.]
33 [1. 1.]
34 [1. 1.]]

```

E ovviamente anche qui possiamo fare le varie operazioni matematiche:

```

1 import numpy as np
2
3 matrice1 = np.matrix('1 2; 3 4; 5 6')
4 matricediuni = np.ones((3,2))
5
6 sommadimatrici = matrice1 + matricediuni
7 print('Somma di matrici:\n', sommadimatrici)
8
9 matrice3 = np.matrix('3 4 5; 6 7 8') #matrice 2x3
10 prodottodimatrici = matrice1 * matrice3 #matrice 3x(2x2)x3
11 # attenzione che non funziona se si usa np.array()
12 # alternativamente si potrebbe scrivere: prodottodimatrici = matrice1 @ matrice3

```

```

13 # che funziona sia con np.matrix che np.array
14 print('\nProdotto di matrici:\n', prodottodimatrici)
15
16 [Output]
17 Somma di matrici:
18 [[2. 3.]
19 [4. 5.]
20 [6. 7.]]
21
22 Prodotto di matrici:
23 [[15 18 21]
24 [33 40 47]
25 [51 62 73]]

```

Ci siamo fermati alle matrici, oggetti a due indici, ma volendo avremmo potuto creare oggetti a più indici (i famosi tensori, tanto sempre numeri sono) ad esempio `"np.ones((3,3,3))"` creerebbe un oggetto a tre indici di uni, che possiamo vedere ad esempio come un vettore a tre componenti, ciascuna delle quali è una matrice 3×3 . Se questo vi sembra strano aspettate di fare meccanica quantistica e ne riparliamo.

Ora è importante far notare una cosa: l'operazione di assegnazione con gli array (o liste) è delicata:

```

1 import numpy as np
2
3 a = np.array([1, 2, 3, 4])
4 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
5
6 b = a
7 b[0] = 7
8
9 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
10 print(f"array finale : {b}, id: {id(b)}")
11
12 #usiamo ora copy invece che l'assegnazione
13
14 a = np.array([1, 2, 3, 4])
15 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
16
17 b = np.copy(a)
18 b[0] = 7
19
20 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
21 print(f"array finale : {b}, id: {id(b)}")
22
23 [Output]
24 array iniziale: [1 2 3 4], id: 2226551695088
25 array iniziale: [7 2 3 4], id: 2226551695088
26 array finale : [7 2 3 4], id: 2226551695088
27 array iniziale: [1 2 3 4], id: 2226573280912
28 array iniziale: [1 2 3 4], id: 2226573280912
29 array finale : [7 2 3 4], id: 2226578310224

```

Come vedete se usiamo l'operato di assegnazione anche l'array iniziale cambia poiché sia a che b sono riferiti allo stesso indirizzo di memoria, mentre usando la funzione `"copy"` ora il secondo array ha un diverso indirizzo e quindi il problema non si pone più.

6.7 Esercizi

Ora che grazie agli array abbiamo un po' più di carne al fuoco voglio proporvi un paio di esercizi da fare da voi per prendere familiarità con questi oggetti, o strutture dati volendo. In basso ci sarà anche la soluzione che gradirei non guardaste prima di aver fatto almeno un tentativo. Ovviamente per fare questi esercizi non dovete usare informazioni ulteriori a quelle apprese fin'ora.

1. Verificare che anche con le liste l'operazione di assegnazione fa coincidere gli indirizzi di memoria.
2. Creare la matrice identità I 3×3 e verificare che, dato un vettore v a vostra scelta, $v^T I v$ sia uguale a $"\text{sum}(v^{**2})"$.
3. Creare una matrice L 4×4 tutta nulla ma la cui diagonale sia: $"-1, 1, 1, 1"$ e vedere cosa succede facendo $v^T L v$.
4. Data una matrice di zeri 4×2 (4 righe, 2 colonne), riempite la colonna di sinistra e poi invertite le colonne.
5. Dato un `linspace` (e.g. tra 0 e 20) creare due nuovi array con solo i numeri pari uno e solo i dispari l'altro.
6. Dato un array a vostra piacimento, creare una maschera, con una o più condizioni sempre a vostro gusto.
7. Creare una matrice che contenga sulle colonne le tabelline da 0 a 10 (non banale da fare in poche righe).

Ecco la mia soluzione di questi esercizi. non riporto l'output per brevità.

Primo:

```
1 a = [1, 2, 3, 4]
2 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
3
4 b = a
5 b[0] = 7
6
7 print(f"array iniziale: {a}, id: {id(a)}")
8 print(f"array finale : {b}, id: {id(b)}")
```

Secondo:

```
1 import numpy as np
2
3 I = np.zeros((3, 3))
4 idx = [0, 1, 2] # lista degli indici
5
6 I[idx, idx] = 1
7
8 v = np.array([4, 8, 2]) # vettore a caso
9 # calcolo prodotto scalare
10 print(v.T @ I @ v)
11 print(sum(v**2))
```

Terzo:

```
1 import numpy as np
2
3 L = np.zeros((4, 4))
4 idx = [0, 1, 2, 3] # lista degli indici
5
6 L[idx, idx] = [-1, 1, 1, 1]
7
8 v = np.array([4, 8, 2, 1]) # vettore a caso
9 print(v.T @ L @ v)
10 v = np.array([9, 0, 2, 1]) # vettore a caso
11 print(v.T @ L @ v)
```

Quarto:

```
1 import numpy as np
2
3 A = np.zeros((4, 2))
4 A[:, 0] = 1
5 print(A)
6 # faccio lo swap cambiando l'ordine degli indici
7 print(A[:, [1, 0]])
```

Quinto:

```
1 import numpy as np
2
3 x = np.linspace(0, 20, 21, dtype=int)
4
5 pari = x[x%2 == 0] # maschera per i pari
6 disp = x[x%2 == 1] # maschera per i dispari
7 print(pari)
8 print(disp)
```

Sesto:

```
1 import numpy as np
2
3 x = np.linspace(0, 20, 21, dtype=int)
4
5 # maschera con due condizioni
6 mask = (x > 5) & (x < 15)
7 # "&" per and mentre "|" per or
8 print(x[mask])
```

Settimo:

```
1 import numpy as np
2
3 x = np.linspace(0, 10, 11, dtype=int)
4 # trasformo il vettore in una matrice N x 1
5 y = x[:, None]
6 print(x)
7 print(y)
8 print(x*y)
```

7 Terza lezione

7.1 Le funzioni

Don't repeat yourself: è questa la logica delle funzioni. Le funzioni sono frammenti di codici, atti a ripetere sempre lo stesso tipo di operazioni con diversi valori dei parametri in input a seconda delle esigenze. Come al solito vediamo degli esempi:

```
1 def area(a, b):
2     """
3         restituisce l'area del rettangolo
4         di lati a e b
5     """
6     A = a*b #calcolo dell'area
7     return A
8
9 #chiamiamo la funzione e stampiamo subito il risultato
10 print(area(3, 4))
11 print(area(2, 5))
12
13 """
14 Se la funzione non restituisce nulla
15 ma esegue solo un pezzo di codice,
16 si parla propriamente di procedura
17 e il valore restituito e' None.
18 """
19 def procedura(a):
20     a = a+1
21
22 print(procedura(2))
23
24 """
25 Volendo si possono creare anche funzioni
26 che non hanno valori in ingresso:
27 """
28 def pigreco():
29     return 3.14
30 print(pigreco())
31
32 [Output]
33 12
34 10
35 None
36 3.14
```

Portiamo all'attenzione due fatti importanti:

- È fondamentale in Python che il corpo della funzione sia indentato, per seguire un raggruppamento logico del codice. Lo stesso vale per altri costrutti che vedremo tra poco. Insomma le parti indentate del codice devono essere logicamente connesse.
- Definendo degli argomenti per una funzione si creano delle variabili "locali", il cui nome non influenza tutto quello che c'è fuori dalla funzione stessa. Ad esempio, per la funzione area abbiamo definito una variabile "A", ma posso tranquillamente definire una nuova variabile "A" al di fuori della funzione e non avrei problemi di sovrascrittura.

Abbiamo visto che le funzioni possono prendere dei parametri o anche nessun parametro, quindi la domanda che sorge spontanea è: ne possono prendere infiniti? La risposta è sì ma prima di vederlo facciamo una piccola deviazione e parliamo delle istruzioni di controllo.

7.2 Istruzioni di controllo

Per istruzioni di controllo si intendono dei comandi che modificano il flusso di compilazione di un programma in base a determinati confronti e/o controlli su certe variabili. Ci sono casi in cui il computer deve fare cose diverse a seconda degli input o fare la stessa cosa un certo numero di volte fino a che un certa condizione sia o non sia soddisfatta.

7.2.1 Espressioni condizionali: if, else, elif

Tramite l'istruzione if effettuiamo un confronto/controllo. Se il risultato è vero il programma esegue la porzione di codice immediatamente sotto-indentata. In caso contrario, l'istruzione else prende il controllo e il programma esegue la porzione di codice indentata sotto quest'ultima. Se l'istruzione else non è presente e il controllo

avvenuto con l'if risultasse falso, il programma semplicemente non fa niente. Vediamo il caso classico del valore assoluto:

```

1 def assoluto(x):
2     """
3         restituisce il valore assoluto di un numero
4     """
5     # se vero restituisci x
6     if x >= 0:
7         return x
8     # altrimenti restituisci -x
9     else:
10        return -x
11
12 print(assoluto(3))
13 print(assoluto(-3))
14
15 [Output]
16 3
17 3

```

È possibile aggiungere delle coppie if/else in cascata tramite il comando "elif", che è identico semanticamente a "else if"; per esempio:

```

1 def segno(x):
2     """
3         funzione per capire il segno di un numero
4     """
5     #se vero ....
6     if x > 0:
7         return 'Positivo'
8     #se invece ....
9     elif x == 0:
10        return 'Nullo'
11     #altrimenti ....
12     else:
13        return 'Negativo'
14
15 print(segno(5))
16 print(segno(0))
17 print(segno(-4))
18
19 [Output]
20 Positivo
21 Nullo
22 Negativo

```

7.2.2 Cicli: while, for

Partiamo con i cicli while: essi sono porzioni di codice che iterano le stesse operazioni fino a che una certa condizione risulta essere verificata:

```

1 def fattoriale(n):
2     """
3         Restituisce il fattoriale di un numero
4     """
5     R = 1
6     #finche' e' vero fai ...
7     while n > 1:
8         R *= n
9         n -= 1
10    return R
11
12 print(fattoriale(5))
13
14 [Output]
15 120

```

Un'accortezza da porre con i cicli while è verificare che effettivamente la condizione inserita si verifichi altrimenti il ciclo non si interrompe e va avanti per sempre, ed è molto molto tempo, della serie che fa prima a decadere il protone.

Passando ai cicli for invece essi ripetono una certa azione finché un contatore non raggiunge il massimo. Vediamo come implementare il fattoriale con questo ciclo:

```

1 def fattoriale(n):
2     """
3         restituisce il fattoriale di un numero
4     """
5     R = 1
6     #finche' i non arriva ad n fai ...
7     for i in range(1, n+1):
8         R = R*i
9     return R
10
11 print(fattoriale(5))
12
13 [Output]
14 120

```

Abbiamo quindi introdotto una variabile ausiliaria "i" utilizzata in questo contesto come contatore, cioè come variabile che tiene il conto del numero di cicli effettuati. Nel caso in esame, stiamo dicendo tramite l'istruzione for che la variabile "i" deve variare all'interno della lista range(1, n+1) = [1,2,..., n]. Il programma effettua l'operazione $R = R * i$ per tutti i valori possibili che i assume in questa lista, nell'ordine. Da notare il comando range che crea una lista sulla quale iterare, ma noi abbiamo visto già le liste e gli array e abbiamo visto che presentano alcune somiglianze, un'altra somiglianza da far vedere è che entrambi sono 'iterabili' e quindi possiamo iterarci sopra:

```

1 import numpy as np
2
3 def trova_pari(array):
4     """
5         restituisce un array contenente solo
6         i numeri pari dell'array di partenza
7     """
8     R = np.array([]) #array da riempire
9     #per ogni elemento in array fai ...
10    for elem in array:
11        if elem%2 == 0:
12            R = np.append(R, elem)
13    return R
14
15 a = np.array([i for i in range(0, 11)])
16
17 il precedente e' un modo piu' conciso di scrivere:
18 a = np.array([0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10])
19
20 print(a)
21 print(trova_pari(a))
22
23 [Output]
24 [ 0  1  2  3  4  5  6  7  8  9 10]
25 [ 0.  2.  4.  6.  8. 10.]

```

In questo esempio abbiamo utilizzato gli array ma si potrebbe senza problemi rifare tutto con le liste. Altri due comandi interessanti per quanto riguarda i cicli sono: enumerate e zip.

enumerate:

```

1 import numpy as np
2
3 #creiamo un array
4 array = np.linspace(0, 1, 5)
5
6 """
7 in questo modo posso iterare contemporaneamente
8 sia sugli indici sia sugli elementi dell'array
9 """
10 for index, elem in enumerate(array):
11     print(index, elem)
12
13 [Output]
14 0 0.0
15 1 0.25
16 2 0.5
17 3 0.75
18 4 1.0

```

zip:

```

1 import numpy as np
2

```

```

3 #creiamo tre un array
4 array1 = np.linspace(0, 1, 5)
5 array2 = np.linspace(1, 2, 5)
6 array3 = np.linspace(2, 3, 5)
7 """
8 in questo modo posso iterare contemporaneamente
9 sugli elementi di tutti gli array
10 """
11 for a1, a2, a3 in zip(array1, array2, array3):
12     print(a1, a2, a3)
13
14 [Output]
15 0.0 1.0 2.0
16 0.25 1.25 2.25
17 0.5 1.5 2.5
18 0.75 1.75 2.75
19 1.0 2.0 3.0

```

Anche qui come le funzioni è necessario indentare.

7.3 Ancora funzioni

Dopo questa digressione torniamo alle funzioni, abbiamo detto che una funzione può prendere infiniti argomenti, ma dal punto di vista pratico come lo implementiamo, in un modo semi decente? Una risposta sarebbe quella di passare alla funzione non delle singole variabili ma un array o una lista, cosa che si può fare tranquillamente, e lavorare poi all'interno della funzione con gli indici per utilizzare i vari elementi dell'array, o della lista, o ciclarci sopra. Un altro modo per farlo è usare: *args (args è un nome di default, potremmo chiamarlo mimmo):

```

1 def molt(*numeri):
2     """
3         restituisce il prodotto di n numeri
4     """
5     R = 1
6     for numero in numeri:
7         R *= numero
8     return R
9
10 print(molt(2, 7, 10, 11, 42))
11 print(molt(5, 5))
12 print(molt(10, 10, 2))
13
14 [Output]
15 64680
16 25
17 200

```

L'esempio appena visto non è altro che la funzione fattoriale di prima leggermente modificata e che non prende più in input una sequenza crescente di numeri. I parametri vengono passati come una tupla e in questo caso il simbolo "*" viene definito operatore di unpacking proprio perché "spacchetta" tutte le variabili che vengono passate alla funzione.

7.4 funzioni lambda

Esiste un particolare tipo di funzioni in python, le cosiddette funzioni lambda, sono fondamentalmente uguali alle funzioni dichiarate dall'utente ma devono avere una singola espressione, quindi niente calcoli complicati nel mezzo. La sintassi è: lambda argomenti : espressione. Sono in genere usate come anonime, magari da passare ad altre funzioni ad esempio se bisogna fittare con una retta, (vedere lezione successiva) posso usare curve_fit così: curve_fit(lambda x, m, q : x*m + q, x, y, ...); ma ciò non vieta comunque di dargli un nome.

```

1 f = lambda x : 3*x
2 print(f(2))
3
4 h = lambda x, y, z : x*y + z
5 print(h(2, 3, 4))
6
7 [Output]
8 6
9 10

```

Ovviamente esse possono anche essere usate all'interno di una funzione magari come ciò che la funzione ritorna, il che vuol dire che la funzione restituirà un'altra funzione.

```

1 def g(x):
2     ''' restituisce potenza x-esima di y
3     '''
4     return lambda y : y**x
5
6 G = g(3) # potenza cubica
7 print(G(4))
8
9 =====
10 =====
11
12 def m(f, y, x):
13     ''' passo una funzione ad una funzione
14     '''
15     return f(y) - x
16
17 print(m(lambda x : x**2, 5, 1))
18
19 [Output]
20 64
21 24

```

7.5 Grafici

Fare un grafico è un modo pratico e comodo di visualizzare dei dati, qualsiasi sia la loro provenienza. Capita spesso che i dati siano su dei file (per i nostri scopi in genere file .txt o .csv) e che i file siano organizzati a colonne:

```

1 #t[s] x[m]
2 1      1
3 2      4
4 3      9
5 4     16
6 5     25
7 6     36

```

Per leggeri:

```

1 import numpy as np
2
3 #Leggiamo da un file di testo classico
4 path = 'dati.txt'
5 dati1, dati2 = np.loadtxt(path, unpack=True)
6 """
7 unpack=True serve proprio a dire che vogliamo che
8 dati1 contenga la prima colonna e dati2 la seconda
9 La prima riga avendo il cancelletto verrà saltata
10 """
11
12 #se vogliamo invece che venga letto tutto come una matrice scriviamo:
13 path = 'dati.txt'
14 dati = np.loadtxt(path) # sarebbe unpack = False
15 #dati sarà nella fattispecie una matrice con due colonne e 6 righe
16
17
18 #leggere da file.csv
19 path = 'dati.csv'
20 dati1, dati2 = np.loadtxt(path, usecols=[0,1], skiprows=1, delimiter=',', unpack=True)
21 """
22 si capisce senza troppa fatica che usecols indica le colonne che vogliamo leggere
23 skiprows il numero di righe da saltare e delimiter indica il carattere che separa le colonne
24 """

```

Un interessante tipo di file sono i file con estensione "npy" comodi se i dati sono di dimensioni elevate:

```

1 import time
2 import numpy as np
3
4 x = np.linspace(0, 1, int(2e6)) # dati
5
6 =====
7 # file txt
8 =====
9
10 # salviamo su file
11 start = time.time()

```

```

12 path = r'c:\Users\franc\Desktop\dati.txt'
13 f = open(path, 'w')
14 for i in x:
15     f.write(f'{i} \n')
16 f.close()
17 end = time.time() - start
18
19 print(f"tempo di scrittura txt: {end} s")
20
21 #leggiamo da file
22 start = time.time()
23 X = np.loadtxt(path, unpack=True)
24 end = time.time() - start
25
26 print(f"tempo di lettura txt: {end} s")
27
28 =====
29 # file npy
30 =====
31
32 # salviamo su file
33 start = time.time()
34 path = r'c:\Users\franc\Desktop\dati.npy'
35 np.save(path, x)
36 end = time.time() - start
37
38 print(f"tempo di scrittura npy: {end} s")
39
40 #leggiamo da file
41 start = time.time()
42 X = np.load(path, allow_pickle='TRUE')
43 end = time.time() - start
44
45 print(f"tempo di lettura npy: {end} s")
46
47 [Output]
48 tempo di scrittura txt: 5.610752582550049 s
49 tempo di lettura txt: 9.489601373672485 s
50 tempo di scrittura npy: 0.016022205352783203 s
51 tempo di lettura npy: 0.015637636184692383 s

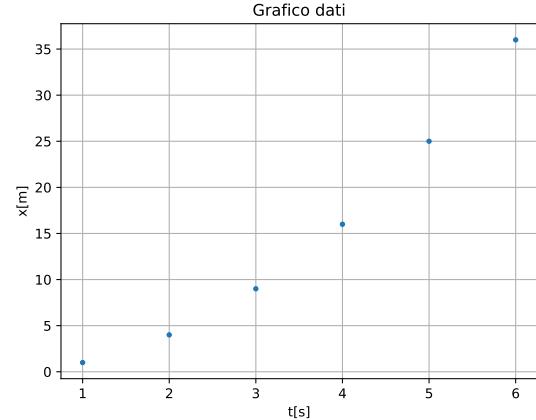
```

Abbiamo usato la libreria time per misurare il tempo, "time.time()" restituisce i numeri di secondi trascorsi dall'inizio dell'epoca unix (1 gennaio 1970). Come vediamo la differenza di tempi è abissale. Passiamo ora alla creazione di un grafico. Creare ora un grafico è semplice grazie all'utilizzo della libreria matplotlib:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 #Leggiamo da un file di testo classico
5 path = 'dati.txt'
6 dati1, dati2 = np.loadtxt(path, unpack=True)
7
8 plt.figure(1) #creiamo la figura
9
10 #titolo
11 plt.title('Grafico dati')
12 #nomi degli assi
13 plt.xlabel('t[s]')
14 plt.ylabel('x[m]')
15 #plot dei dati
16 plt.plot(dati1, dati2, marker='.', linestyle='')
17 #aggiungiamo una griglia
18 plt.grid()
19 #comando per mostrare a schermo il grafico
20 plt.show()

```



Commentiamo un attimo quanto fatto: dopo aver letto i dati abbiamo fatto il grafico mettendo sull'asse delle ascisse la colonna del tempo e su quello delle ordinate la colonna dello spazio; se all'interno del comando "plt.plot(...)" scambiassimo l'ordine di dati1 e dati2 all'ora gli assi si invertirebbero, non avremmo più $x(t)$ ma $t(x)$. Inoltre il comando "marker='.'" sta a significare che il simbolo che rappresenta il dato deve essere un punto; mentre il comando "linestyle=''" significa che non vogliamo che i punti siano uniti da una linea (linestyle='-' dà una linea, linestyle='--' dà una linea tratteggiata).

Se invece volessimo graficare una funzione o più definite da codice? Anche qui i comandi sono analoghi:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 def f(x):
5     """
6         restituisce il cubo di un numero
7     """
8     return x**3
9
10 def g(x):
11     """
12         restituisce il quadrato di un numero
13     """
14     return x**2
15
16 #array di numeri equispaziati nel range [-1,1] usiamo:
17 x = np.linspace(-1, 1, 40)
18
19 plt.figure(1) #creiamo la figura
20
21 #titolo
22 plt.title('Grafico funzioni')
23 #nomi degli assi
24 plt.xlabel('x')
25 plt.ylabel('f(x), g(x)')
26 #plot dei dati
27 plt.plot(x, f(x), marker='.', linestyle='--', color='blue', label='parabola')
28 plt.plot(x, g(x), marker='^', linestyle='-', color='red', label='cubica')
29 #aggiungiamo una leggenda
30 plt.legend(loc='best')
31 #aggiungiamo una griglia
32 plt.grid()
33 #comando per mostrare a schermo il grafico
34 plt.show()

```

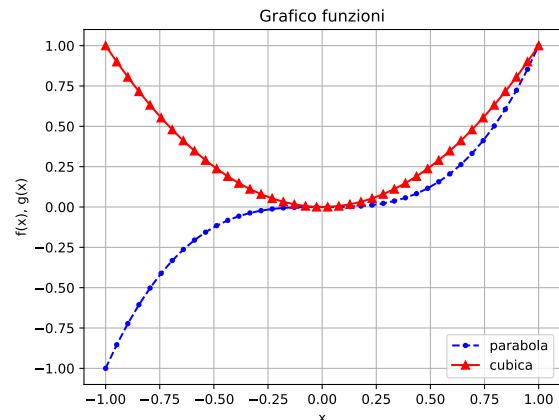
Notare che per distinguere le due funzioni oltre al "marker" e al "linestyle" abbiamo aggiunto il comando "color" per dare un colore e il comando "label" che assegna un'etichetta poi visibile nella leggenda (loc='best' indica che Python la mette dove ritiene più consono, in modo che non rischi magari di coprire porzioni di grafico). Ovviamente è consigliata una lettura della documentazione per conosce tutti gli altri comandi possibili per migliorare/abbellire il grafico da adre alle funzioni già presenti. Altre funzioni utili possono essere: "plt.axis(...)" che imposta il range da visualizzare su entrambi gli assi; il comando "plt.xscale(...)" che permette di fare i grafici con una scala, magari logaritmica o altro sull'asse x (analogo sarà sulle y mutatis mutandis).

Ultima menzione da fare sono gli istogrammi:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 plt.figure(1)
5 plt.title('grafico a barre')
6 plt.xlabel('valore')
7 plt.ylabel('conteggi')
8 # Sull'asse x utilizziamo un array di 10 punti equispaziati.
9 x = np.linspace(1,10,10)
10 # Sull'asse y abbiamo, ad esempio, il seguente set di dati:
11 y = np.array([2.54, 4.78, 1.13, 3.68, 5.79, 7.80, 5.4, 3.7, 9.0, 6.6])
12
13 # Il comando per la creazione dell'istogramma corrispondente e':
14 plt.bar(x, y, align='center')
15
16 plt.figure(2)
17 plt.title('istogramma di una distribuzione gaussiana')
18 plt.xlabel('x')
19 plt.ylabel('p(x)')

```

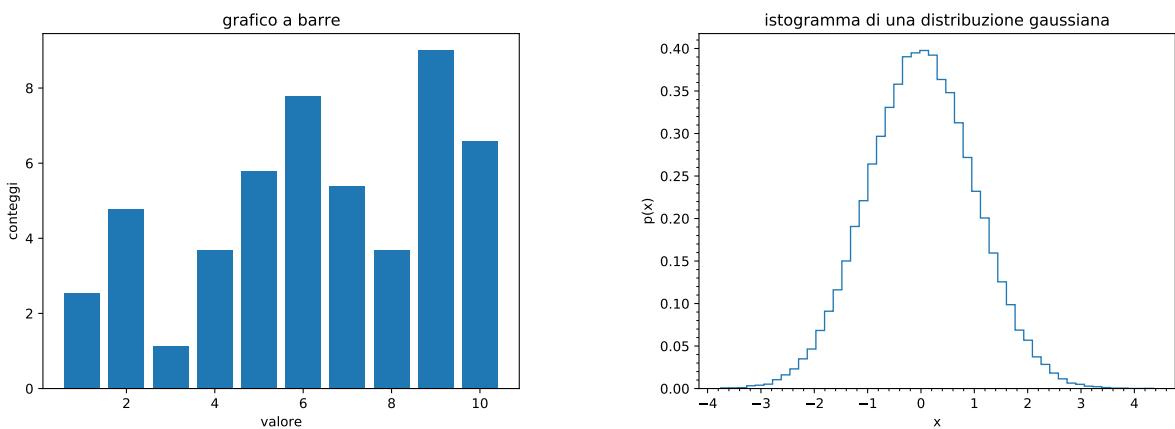


```

20
21 """
22 lista di numeri distribuiti gaussianamente con media 0 e varianza 1
23 si usa l'underscore nel for poiche' non serve usare
24 un'altra variabile. Avremmo potuto scrivere for i ...
25 ma la i non sarebbe comparsa da nessun' altra parte
26 sarebbe stato uno spreco
27 """
28 z = [np.random.normal(0, 1) for _ in range(int(1e5))]
29 plt.hist(z, bins=50, density=True, histtype='step')
30 plt.minorticks_on() # tick piccoli sugli assi
31
32 plt.show()

```

Piccolo appunto che bisogna fare, nel caso di "plt.hist()" bisogna stare attenti perché il numero di bin va scelto con cura (qui abbiamo scritto 50 sulla fiducia).



7.6 Standard input

È (a proposito, la È si fa premendo Alt+0200 sul tastierino, quantomeno su windows) inoltre possibile dare la codice che abbiamo scritto degli input da shell. Esistono due modi per farlo: l'uso della funzione "input()", oppure utilizzare "argparse" per dare al codice ciò che serve direttamente da linea di comando su shell, ad esempio se fossimo su una partizione linux senza un editor stile pyzo. Cominciamo con la prima possibilità:

```

1 """
2 Programma per calcolare il trinagolo di tartaglia
3 """
4 import numpy as np
5
6 # leggo da input un valore e lo rendo intero
7 # la stringa verra stampata su shell
8 n = int(input("Ordine del triangolo: "))
9 a = np.zeros((n, n), dtype=int) # matrice per i coefficienti
10
11 # calcolo i coefficienti del trinagolo
12 a[0,0] = 1
13 for i in range(1, n):
14     a[i, 0] = 1
15     for j in range(1, i):
16         a[i, j] = a[i-1, j-1] + a[i-1, j]
17     a[i,i] = 1
18
19 # stampo a schermo
20 for i in range(n):
21     for j in range(i+1):
22         # solo per fare la forma a piramide
23         if j == 0 : # non funziona con numeri a due cifre
24             print(*[" "]*(n-i), a[i, j], end=',')
25         else:
26             print("", a[i, j], end=',')
27     print()
28
29 [Output]
30 Ordine del triangolo: 5
31      1
32      1 1

```

```

33      1 2 1
34      1 3 3 1
35      1 4 6 4 1

```

Vediamo ora come usare argparse. Ora però il codice è più comodo eseguirlo su una shell, che sia quella di anaconda o quella della vostra distro linux è uguale. Le modifiche al codice sono veramente poche:

```

1 """
2 Programma per calcolare il trinagolo di tartaglia
3 """
4 import argparse
5 import numpy as np
6
7 description='Programma per calcolare il trinagolo di tartaglia leggendo le informazioni da
     linea di comando'
8 # descrizione accessibile con -h su shell
9 parser = argparse.ArgumentParser(description=description)
10 parser.add_argument('dim', help='Dimensione della matrice, ovvero potenza del binomio')
11 args = parser.parse_args()
12 n = int(args.dim) # accedo alla variabile tramite il nome messo a linea 10
13
14 a = np.zeros((n, n), dtype=int) # matrice per i coefficienti
15
16 # calcolo i coefficienti del trinagolo
17 a[0,0] = 1
18 for i in range(1, n):
19     a[i, 0] = 1
20     for j in range(1, i):
21         a[i, j] = a[i-1, j-1] + a[i-1, j]
22     a[i,i] = 1
23
24 # stampo a schermo
25 for i in range(n):
26     for j in range(i+1):
27         # solo per fare la forma a piramide
28         if j == 0 : # non funziona con numeri a due cifre
29             print(*[" "]*(n-i),a[i, j], end='')
30         else:
31             print(" ",a[i, j], end='')
32     print()

```

Vi metto uno screen della shell per capire cosa è successo (un po' sgranata ma pazienza):

```

C:\Windows\System32\Windc > python tartaglia_argparse.py -h
usage: tartaglia_argparse.py [-h] dim

Programma per calcolare il trinagolo di tartaglia leggendo le informazioni da linea di comando

positional arguments:
  dim      Dimensione della matrice, ovvero potenza del binomio

optional arguments:
  -h, --help show this help message and exit
(base) PS C:\Users\franc\Desktop\Nuova cartella\3 Terza Lezione\codiciL3> python tartaglia_argparse.py 5
      1
     1 1
    1 2 1
   1 3 3 1
  1 4 6 4 1
(base) PS C:\Users\franc\Desktop\Nuova cartella\3 Terza Lezione\codiciL3>

```

7.7 Prestazioni: *pure* Python vs librerie

Avevamo accennato al fatto che Python fosse lento ma che utilizzando le librerie si potesse un po' migliorare le prestazioni, vediamo un esempio:

```

1 import time
2 import numpy as np
3
4 #inizio a misurare il tempo
5 start = time.time()
6
7
8 a1 = 0      #variabile che conterrà il risultato
9 N = int(5e6) # numero di iterazioni da fare = 5 x 10**6
10
11 #faccio il conto a 'mano'
12 for i in range(N):

```

```

13     a1 += np.sqrt(i)
14
15 #finisco di misurare il tempo
16 end = time.time()-start
17
18 print(end)
19
20 #inizio a misurare il tempo
21 start = time.time()
22
23 #stesso conto ma fatto tramite le librerie di python
24 a2 = sum(np.sqrt(np.arange(N)))
25
26 #finisco di misurare il tempo
27 end = time.time()-start
28
29 #sperabilmente sara' minore del tempo impiegato prima
30 print(end)
31
32 [Output]
33 11.588378429412842
34 0.8475463390350342

```

Vediamo che quindi usando le funzioni di numpy, (np.arange) e le funzioni della libreria standard di Python (sum), è possibile fare lo stesso conto in un tempo molto minore che tramite un ciclo for. Questo perché le librerie non sono totalmente in Python ma in molta parte in C e/o fortran.

7.8 Prestazioni: globale vs locale

Dedicato a Mattia che non vuole usare le funzioni. Rimanendo però nell'ambito di *pure* Python, si può comunque migliorare le prestazioni del codice. Infatti un codice scritto all'interno di una funzione esegue più velocemente rispetto alle stesse righe scritte in globale.

```

1 import timeit
2
3 start = timeit.default_timer()
4
5 for i in range(int(1e8)):
6     pass
7
8 end = timeit.default_timer() - start
9
10 print(f"Tempo in gloable = {end}")
11
12 def f():
13     for i in range(int(1e8)):
14         pass
15
16 start = timeit.default_timer()
17 f()
18 end = timeit.default_timer() - start
19
20 print(f"Tempo in locale   = {end}")
21
22 [Output]
23 Tempo in gloable = 2.915754556655884
24 Tempo in locale   = 1.5078275203704834

```

Se prima la scusa era l'utilizzo delle librerie scritte in C ora dov'è la magagna? Adiamo a fare una cosa molto poco capibile, disassembliamo il codice. Ovvero vediamo il bytecode corrispondente al nostro codice. Infatti l'interprete di Python è una macchina virtuale che esegue il bytecode. Per farlo usiamo la libreria "dis".

```

1      5          0 LOAD_NAME                0 (range)
2          2 LOAD_NAME                1 (int)
3          4 LOAD_CONST              0 (100000000.0)
4          6 CALL_FUNCTION           1
5          8 CALL_FUNCTION           1
6          10 GET_ITER
7    >>   12 FOR_ITER               2 (to 18)
8          14 STORE_NAME              2 (i)
9
10     6          16 JUMP_ABSOLUTE        6 (to 12)
11
12     5    >>   18 LOAD_CONST              1 (None)
13          20 RETURN_VALUE

```

```

1 14          0 LOAD_GLOBAL               0 (range)
2 2 LOAD_GLOBAL               1 (int)
3 4 LOAD_CONST                1 (100000000.0)
4 6 CALL_FUNCTION              1
5 8 CALL_FUNCTION              1
6 10 GET_ITER
7 >> 12 FOR_ITER                 2 (to 18)
8 14 STORE_FAST                0 (i)

9
10 15      16 JUMP_ABSOLUTE        6 (to 12)
11
12 14    >> 18 LOAD_CONST           0 (None)
13 20 RETURN_VALUE
14 None

```

Le righe sopra riportate sono rispettivamente il bytecode delle righe 5 e 6 del codice soprastante prima e della funzione f poi. Vedete che salta subito all'occhio una differenza: per il codice globale alla riga 8 del bytecode c'è scritto STORE_NAME, mentre per la funzione abbiamo STORE_FAST. Cosa vuol dire quindi questa differenza? Al di là del fast del nome il punto è che in una funzione le variabili locali vengono salvate in un array di dimensione fissa, non in un dizionario (come avviene con quelle globali). Per cui ci si accede direttamente tramite un indice, rendendo l'operazione molto rapida. Ricordando la scrittura in C a livello base di Python, si tratta semplicemente di una ricerca del puntatore nell'elenco e di un aumento del conteggio dei riferimenti di quello che è la lista, ovvero un PyObject al livello di C, entrambe operazioni altamente efficienti. Le variabili globali, invece vengono memorizzate in un dizionario. Per cui quando si accede a una variabile globale, Python deve eseguire una ricerca nella tabella hash, che implica il calcolo di un hash e quindi il recupero del valore ad esso associato (non sto adesso a spiegarvi cos'è una tabella hash ma come penso possiate intuire non è altro che una struttura dati a livello di C che permette di utilizzare una corrispondenza chiave-valore). E tutto ciò è più lento.

7.9 Gestione errori

È molto facile scrivere codice che produca errore, magari perché distrattamente ci siamo dimenticati qualcosa o magari qualcosa è stato implementato male. Esiste un costrutto che ci permette di gestire gli errori in maniera tranquilla diciamo. Facciamo un semplice esempio:

```

1 a = 0
2 b = 1/a
3 print(b)
4
5 [Output]
6 Traceback (most recent call last):
7   File "<tmp 1>", line 5, in <module>
8     b = 1/a
9 ZeroDivisionError: division by zero

```

Abbiamo fatto una cosa molto brutta, nemmeno Dio può dividere per zero (al più possiamo appellarcia alla censura cosmica e mettere un'orizzonte a vestire la divisione per zero) e quindi il computer ci da errore. Possiamo aggirare il problema, evitando così il second impact, in due modi diciamo:

7.9.1 Try e except

Possiamo utilizzare il costrutto try except dicendo al computer: prova a fare la divisione e, sia mai funziona, se questa però da errore, e l'errore è "ZeroDivisionError" allora assegna a b un altro valore. In questo modo eventuali istruzioni presenti dopo vengono eseguite e il codice non si arresta.

```

1 a = 0
2 try :
3     b = 1/a
4 except ZeroDivisionError:
5     b = 1
6
7 print(b)
8
9 [Output]
10 1

```

Anche qui è fondamentale indentare il blocco delle istruzioni.

7.9.2 Raise Exception

Mettiamo il caso in cui ci siano operazioni da fare in cui il valore della variabile "b" è importante, quindi sarebbe meglio interrompere il flusso del codice perché con un dato valore il risultato finale sarebbe poco sensato. Si può fare il controllo del valore e sollevare un'eccezione per fermare il codice.

```

1 """
2 leggo un valore da shell
3 uso del comando try per evitare che venga letto
4 qualcosa che non sia un numero: e.g. una stringa
5 """
6
7 try:
8     b = int(input('scegliere un valore:'))
9 except ValueError:
10    print('hai digitato qualcosa diverso da un numero, per favore ridigitare')
11    b = int(input('scegliere un valore:'))
12
13 #se si sbaglia a digitare di nuovo il codice si arresta per ValueError
14
15 #controllo se e' possibile proseguire
16 if b > 7 :
17     #se vero si blocca il codice sollevando l'eccezione
18     messaggio_di_errore = 'il valore scelto risulta insensato in quanto nulla supera 7, misura
19     massima di ogni cosa'
20     raise Exception(messaggio_di_errore)
21
22 [Output]
23 8
24 Traceback (most recent call last):
25   File "<tmp 1>", line 18, in <module>
26     raise Exception(messaggio_di_errore)
27 Exception: il valore scelto risulta insensato in quanto nulla supera 7, misura massima di ogni
28 cosa

```

7.10 Esercizi

Anche qui voglio lasciarvi qualche esercizio per farvi prendere confidenza con quanto imparato finora:

1. Scrivere una funzione che dati lunghezza del lato e il numero degli stessi per un poligono regolare ne calcoli l'area "Area(l, n)" e calcolare Area(3, n) + Area(4, n) e confrontarla con Area(5, n) per diversi valori di $n \geq 3$.
2. Fare con un ciclo più plot su uno stesso grafico, dove la funzione deve dipendere dalla variabile su cui si cicla (e.g. x^i con x un array di un certo range e i la variabile del cilo).
3. Stessa cosa di sopra ma ora ogni curva deve avere un colore e uno linestyle diverso e una legenda.
4. Creare una funzione che legga da input un numero intero con la condizione che esso sia maggiore di zero e che dia la possibilità di inserirlo nuovamente finché la condizione non è verificata.
5. Rifare il primo esercizio usando una funzione lambda.
6. Sovrapporre i plot di un istogramma e della funzione di distribuzione associata, a vostra scelta, e aggiungere al grafico tutte le bellurie del caso.
7. Scrivere una funzione che dato un array ne restituisca la media e la deviazione standard.

Formule utili:

Area poligoni regolari:

$$A = \frac{1}{2}(nl) \frac{l \cot(\pi/n)}{2}$$

media e deviazione standard:

$$\mu = \sum_i^n x_i \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{n(n-1)} \sum_i^n (x_i - \mu)^2}$$

Ecco la mia soluzione di questi esercizi. non riporto l'output per brevità.

Primo:

```

1 def Area(l, n):
2     """
3         funzione per calcolare l'area di un poligono
4         regolare di lato l e numero lati n
5     """
6     a = 1/2 * 1/np.tan(np.pi/n) # apotema
7     p = n*l                     # perimetro
8     A = p*a/2                   # area
9     return A
10

```

```

11 l = [3, 4, 5]          # dimensioni dei lati, (terna pitagorica)
12 n = np.arange(4, 12)   # numero di lati dei poligoni
13
14 A3, A4, A5 = [], [], []
15 # liste in cui ci saranno le aree dei poligoni di lato rispettivamente 3, 4, 5
16
17 for n_i in n:          # loop sul numero di lati
18     for l_i in l: # loop sulla dimensione
19
20         A0 = Area(l_i, n_i) # calcolo dell'area
21
22         if l_i == 3: # conservo la seconda dei lati
23             A3.append(A0)
24         elif l_i == 4:
25             A4.append(A0)
26         elif l_i == 5:
27             A5.append(A0)
28
29
30 for i in range(len(n)):
31     print(f'A3 + A4 = {A3[i]+A4[i]:.3f}')
32     print(f'      A5 = {A5[i]:.3f}')

```

Secondo:

```

1 power = [0.5, 1, 2]          # potenze
2 x = np.linspace(0, 1, 1000) # range sulle x
3
4 plt.figure(1)
5 for p in power:
6     plt.plot(x, x**p) # un plot alla volta sulla stessa figura
7
8 # bellurie
9 plt.grid()
10 plt.title("Esercizio 2")
11 plt.xlabel("x")
12 plt.ylabel("f(x)")
13 plt.show()

```

Terzo:

```

1 power = [0.5, 1, 2]          # potenze
2 color = ['k', 'r', 'b']       # colore di ogni curva
3 lnsty = [':', '--', '-.']
4 label = [r'$\sqrt{x}$', r'$x$', r'$x^2$'] # nome della curva
5 x = np.linspace(0, 1, 1000)
6
7 plt.figure(1)
8 for p, c, ls, lb in zip(power, color, lnsty, label):
9     # un plot alla volta sulla stessa figura
10    plt.plot(x, x**p, c=c, linestyle=ls, label=lb)
11
12 #bellurie
13 plt.grid()
14 plt.title("Esercizio 3")
15 plt.xlabel("x")
16 plt.ylabel("f(x)")
17 plt.legend(loc='best')
18 plt.show()

```

Quarto:

```

1 def read():
2     """
3         funzione che legge da input un numero con la condizione che esso
4         sia maggiore di zero e che dia la possibilità di inserirlo
5         nuovamente finché la condizione non è verificata.
6         Volendo si può generalizzare il codice passando la condizione come input
7         """
8
9     while True: # Il codice deve runnare finché non inserisco un numero buono
10
11         try: # provo a leggere il numero e a renderlo intero
12             x = int(input("Iserisci un numero: "))
13
14         except ValueError: # se non riesco sollevo l'eccezione
15             print("Fra ti ho chiesto di mettere un numero") # messaggio di errore
16             continue # questo comando fa ripartire il ciclo da capo

```

```

17     if x > 0: # se la lettura e' andata a buon fine verifico la condizione
18         return x # se e' verificata ritorno il numero
19     else :
20         # altrimenti stampo un messaggio di errore
21         print("In numero inserito e' minore di zero, sceglierne un altro.")
22         continue # e faccio ripartire il ciclo da capo
23
24
25
26 x = read()
27 print(f"Il numero letto e': {x}")

```

Quinto:

```

1 Area = lambda l, n : (1/2 * 1/np.tan(np.pi/n))*(n*l)/2
2
3 l = [3, 4, 5]           # dimesioni dei lati, (terna pitagorica)
4 n = np.arange(4, 12) # numero di lati dei poligoni
5
6 A3, A4, A5 = [], [], []
7 # liste in cui ci saranno le aree dei poligoni di lato rispettivamente 3, 4, 5
8
9 for n_i in n:          # loop sul numero di lati
10    for l_i in l: # lup sulla dimesione
11
12        A0 = Area(l_i, n_i) # calcolo dell'area
13
14        if l_i == 3: # conservo a seconda dei lati
15            A3.append(A0)
16        elif l_i == 4:
17            A4.append(A0)
18        elif l_i == 5:
19            A5.append(A0)
20
21
22 for i in range(len(n)):
23     print(f'A3 + A4 = {A3[i]+A4[i]:.3f}')
24     print(f'    A5    = {A5[i]:.3f}')

```

Sesto:

```

1 # Gaussiana
2 m = 0
3 s = 1
4 z = [np.random.normal(m, s) for _ in range(int(1e5))]
5
6 # Plot dati
7 plt.figure(1)
8 plt.hist(z, bins=50, density=True, histtype='step', label='dati')
9 plt.grid()
10 plt.xlabel("x")
11 plt.ylabel("P(x)")
12 plt.title("Distribuzione gaussiana")
13
14 # Plot curva
15 x = np.linspace(-5*s + m, 5*s + m, 1000)
16 plt.plot(x, np.exp(-(x-m)**2 / (2*s**2))/np.sqrt(2*np.pi*s**2), 'b', label=f"N({m}, {s})")
17 plt.legend(loc='best')
18 plt.show()

```

Settimo:

```

1 def obs(x):
2     """
3         funzione che dato un set di dati x in input
4         restituisce media e deviazione standard
5     """
6     N = len(x)
7
8     media = sum(x)/N
9     varianza = sum((x - media)**2)/(N*(N-1))
10    dev_std = np.sqrt(varianza)
11
12    return media, dev_std
13
14 dati = np.array([0, 3, 5, 1, 5, 667, 2, 4, 9, 3, 33])
15
16 m, dm = obs(dati)
17 print(f"media = {m:.3f} +- {dm:.3f}")

```

8 Quarta lezione

8.1 Importare file Python

Abbiamo visto come utilizzare le librerie, tutto a partire dal comando import. Oltre alle librerie possiamo importare anche altri file Python scritti da noi, magari perché in quel file è implementata una funzione che ci serve. Facciamo un esempio:

```
1 def f(x, n):
2     """
3         restituisce la potenza n-esima di un numero x
4         Parametri
5         -----
6         x, n : float
7
8         Return
9         -----
10        v : float
11        x**n
12    """
13
14    v = x**n
15
16    return v
17
18 if __name__ == '__main__':
19     #test
20     print(f(5, 2))
21
22 [Output]
23 25
```

Abbiamo questo codice che chiamiamo "elevamento.py" che ha implementato la funzione di elevamento a potenza e supponiamo di voler utilizzare questa funzione in un altro codice, possiamo farlo grazie ad import:

```
1 import elevamento
2
3 print(elevamento.f(3, 3))
4
5 [Output]
6 27
```

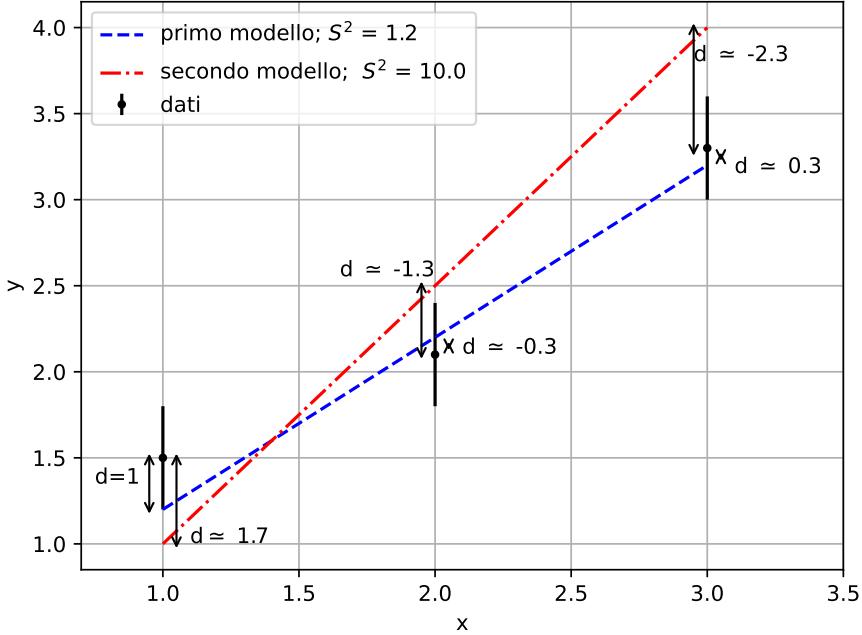
Notiamo nel codice iniziale la presenza dell'if, esso serve per far sì che tutto ciò che sia scritto sotto venga eseguito solo se il codice viene lanciato come 'main' appunto e non importato come modulo su un altro codice. In genere l'utilizzo di questa istruzione è buona norma quando si vuol scrivere un codice da importare altrove.

8.2 Fit

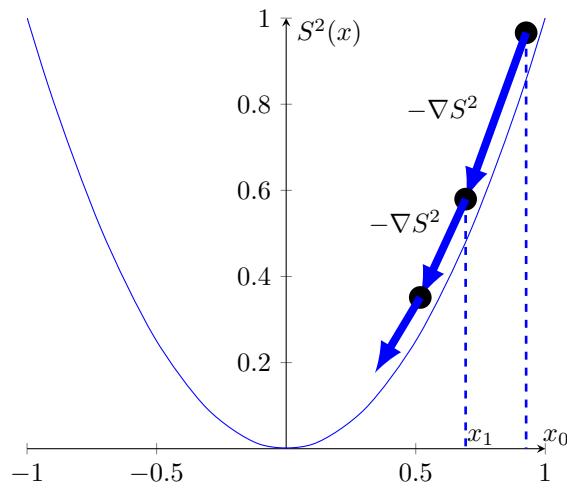
Nell'ambito della statistica un fit, cioè una regressione lineare o non che sia (dove la linearità è riferita ai parametri della funzione), è un metodo per trovare la funzione che meglio descrive l'andamento di alcuni dati. Nel caso di regressione lineare la procedura da eseguire non è troppo complicata, mentre per la regressione non lineare le cose si fanno parecchio complicate e si utilizzano algoritmi di ottimizzazione. Se noi abbiamo quindi un modello teorico che ci dice che un corpo cade con una legge oraria della forma $y(t) = h_0 - \frac{1}{2}gt^2$, grazie al fit possiamo trovare i valori dei parametri della legge oraria, h_0 e g , che meglio adattano la curva ai dati (nella speranza che escano valori fisicamente sensati, dato che in genere i dati sono di origine sperimentale o simulativa). In ogni caso comunque l'idea di ciò che va fatto è trovare il minimo della seguente funzione:

$$S^2(\{\theta\}_j) = \sum_i \frac{(y_i - f(x_i; \{\theta\}_j))^2}{\sigma_{y_i}^2} \quad (1)$$

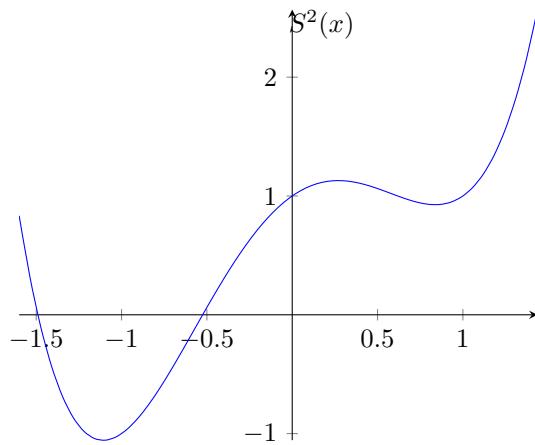
che nel caso in cui il termine dentro la somma sia distribuito in modo gaussiano allora la quantità S^2 è distribuita come un chiquadro, e da qui si potrebbe fare tutta una discussione sulla significatività statistica di quello che andiamo a fare, che ovviamente noi non facciamo. Analizziamo un attimo questa formula: S^2 è in linea di principio una funzione a molte variabili e che restituisce un numero reale. Il termine dentro la somma rappresenta la distanza tra valore del dato e valore della funzione in unità della barra d'errore del dato. Facciamo un esempio visivo per rendere più chiaro il concetto. Consideriamo giusto a titolo di esempio tre punti e due possibili rette che noi possiamo pensare che più o meno approssimino i dati.



Nel grafico d è proprio la distanza del modello dal dato in unità di barre di errore, e quindi la somma di tutte queste quantità elevate al quadrato è il valore di S^2 che è riportato nella legenda. Notiamo quindi che effettivamente la retta che presenta un valore di S^2 minore è quella che ad occhio meglio approssima i dati. Ora uno potrebbe pensare che quindi basta calcolare S^2 su una griglia e vedere dove assume il valore più piccolo. Questo è un metodo abbastanza brute force e il linea di principio funziona, ma quello che in genere si fa è un po' diverso. In linea di principio per capire come funziona un algoritmo di minimo basta pensare ad una pallina che cade in una ciotola. Precisiamo che si vuole fare tutta questa trattazione per far capire che la parte più delicata di questa procedura è scegliere quello che noi chiameremo nel codice "init" e che esso violentemente aggiusta o complica la nostra situazione. Consideriamo per semplicità, didattica e grafica, una funzione di una singola variabile.



Quel che noi facciamo è scegliere un x_0 , (il nostro init) ed aggiornare questa posizione considerando la pendenza della funzione, che altro non sarebbe che la derivata della funzione che vogliamo considerare. Concedetemi, per maggiore generalità, di sostituire il termine derivata con il termine gradiente, indicato dal simbolo ∇ . Quindi quello che il codice fa è dunque analogo ad una pallina che si muove sotto l'azione di un potenziale, che sarebbe S^2 e la sua derivata, il suo gradiente, non è altro che la forza che la pallina sente. Facendo così troviamo una serie di x_i iterativamente, fino ad arrivare al minimo dove il gradiente, la forza esterna, è zero. Questo metodo è chiamato gradiente discendente. Finché abbiamo un solo minimo quindi va tutto bene. Lo troviamo senza problemi a prescindere da dove partiamo. Supponiamo ora una situazione più brutta:



In questo caso vediamo subito che abbiamo due punti in cui la derivata è nulla, quindi due minimi (questo sarebbe il caso di una regressione non lineare, a differenza di quella lineare di sopra, un solo minimo), ma quello a cui siamo interessati noi è il minimo assoluto. Se utilizzassimo il metodo precedente è facile vedere che se partiamo per esempio con $x > 1$ ci incastriamo nel minimo locale. Le uniche zone buone sono soltanto quelle con $x < 0$. Vedete quindi che una piccola complicazione riduce di molto le nostre possibilità e dobbiamo quindi selezionare il nostro punto di partenza con delicatezza. Questo perché una volta arrivato al minimo locale la nostra "pallina" non ci arriva con una velocità come accadrebbe nella realtà e quindi non riesce a scavallare la collinetta. Fondamentalmente per migliorare la cosa dobbiamo spiegare al computer il concetto di inerzia e anche di attrito (se l'energia si conservasse la pallina oscillerebbe all'infinito e il codice non terminerebbe). Un esempio di ciò, chiamato gradiente discendente con momento, e anche di quanto visto sopra è disponibile in una delle appendici. Inoltre in questa stessa lezione andremo a vedere cosa fa effettivamente "curve.fit" che è un pochino diverso. Un caso ancora peggiore lo vediamo adesso con un problema fisico, dove ora non abbiamo due minimi ma molti di più. Prima di vedere il codice vediamo brevemente due grafici della quantità S^2 , che con un po' di abuso di notazione chiamiamo chiquadro, nel caso di regressione lineare e non:

Chiquadro regressione lineare

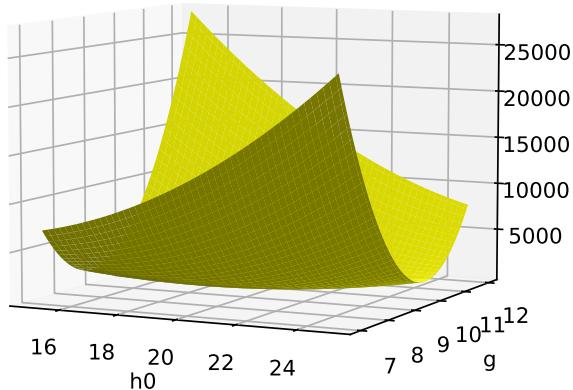


Figura 1: modello lineare $y(t) = h_0 - \frac{1}{2}gt^2$. Unico minimo, qualunque punto iniziale va bene.

Chiquadro regressione non-lineare

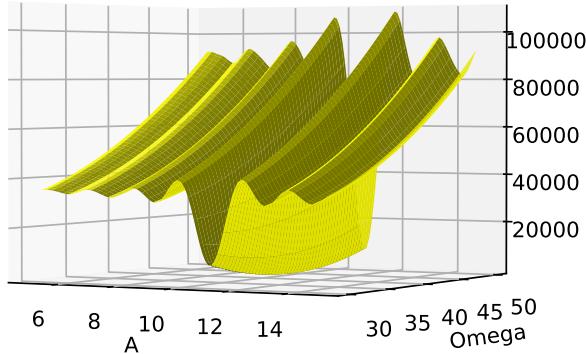


Figura 2: modello non lineare $y(t) = A\cos(\omega t)$. Tanti minimi locali bisogna stare attenti a dove partire altrimenti l'algoritmo si blocca su soluzioni non fisiche. Solo una piccola regione va bene come valori iniziali.

I codici per generare i grafici che abbiamo visto non sono riportati per brevità ma sono presenti nella cartella. Vediamo ora un semplice esempio di codice:

```

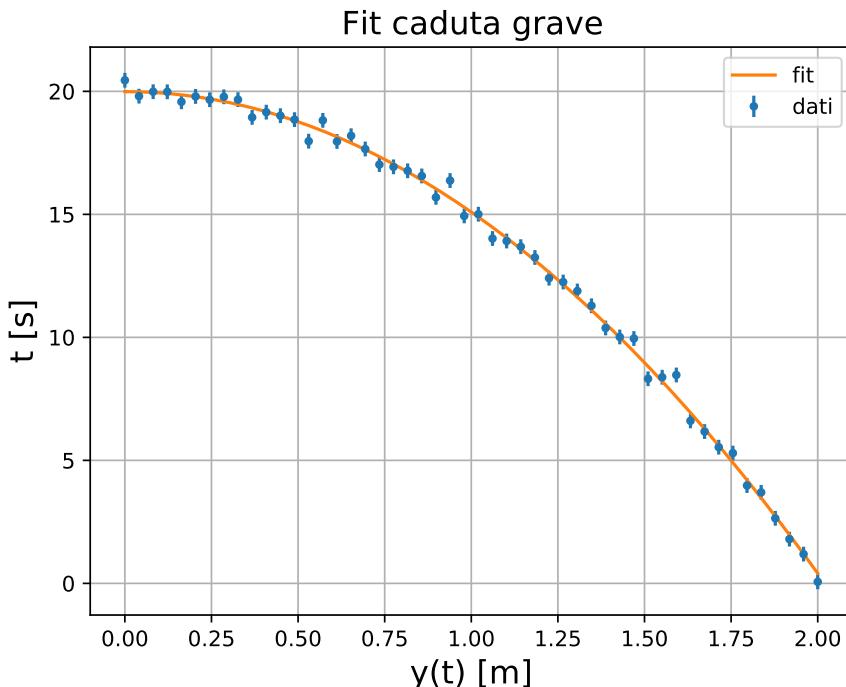
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy.optimize import curve_fit
4
5 def Legge_oraria(t, h0, g):
6     """
7         Restituisce la legge oraria di caduta
8         di un corpo che parte da altezza h0 e
9         con una velocità iniziale nulla
10    """
11    return h0 - 0.5*g*t**2
12
13 """
14 dati misurati:
15 xdata : fisicamente i tempi a cui osservo
16     la caduta del corpo non affetti da
17     errore
18 ydata : fisicamente la posizione del corpo
19     misurata a dati tempi xdata affetta
20     da errore
21 """
22
23 #misuro 50 tempi tra 0 e 2 secondi
24 xdata = np.linspace(0, 2, 50)
25
26 #legge di caduta del corpo
27 y = Legge_oraria(xdata, 20, 9.81)
28 rng = np.random.default_rng()
29 y_noise = 0.3 * rng.normal(size=xdata.size)
30 #dati misurati affetti da errore
31 ydata = y + y_noise
32 dydata = np.array(ydata.size*[0.3])
33
34 #funzione che mi permette di vedere anche le barre d'errore
35 plt.errorbar(xdata, ydata, dydata, fmt='.', label='dati')
36
37 #array dei valori che mi aspetto, circa, di ottenere
38 init = np.array([15, 10])
39 #eseguo il fit

```

```

40 popt, pcov = curve_fit(Legge_oraria, xdata, ydata, init, sigma=dydata, absolute_sigma=False)
41
42 h0, g = popt
43 dh0, dg = np.sqrt(pcov.diagonal())
44 print(f'Altezza iniziale h0 = {h0:.3f} +- {dh0:.3f}')
45 print(f'Accelerazione di gravità g = {g:.3f} +- {dg:.3f}')
46
47 #grafico del fit
48 t = np.linspace(np.min(xdata), np.max(xdata), 1000)
49 plt.plot(t, Legge_oraria(t, *popt), label='fit')
50
51 plt.grid()
52 plt.title('Fit caduta grave', fontsize=15)
53 plt.xlabel('y(t) [m]', fontsize=15)
54 plt.ylabel('t [s]', fontsize=15)
55 plt.legend(loc='best')
56 plt.show()
57
58 [Output]
59 Altezza iniziale h0 = 19.988 +- 0.065
60 Accelerazione di gravità g = 9.790 +- 0.071

```



L'utilizzo dell'array `init` ci aiuta a trovare il minimo assoluto in modo che il codice vada a cercare intorno a quei valori, evitando che il codice si incastri altrove; anche se in questo caso non era necessario in quanto regressione lineare, è comunque buona norma utilizzarlo. Provate a fittare il modello non lineare visto sopra e vi accorgerete come solo una piccola regione dei parametri conduca alla soluzione corretta e che basti spostarvi di poco per ottenere risultati poco sensati.

8.3 Dietro curve fit: Levenberg-Marquardt

Vogliamo ora provare ad andare dietro la libreria e vedere cosa fa effettivamente curve fit. Chiaramente i metodi di fit implementati sono molti e diversi, a seconda delle esigenze; per semplicità perciò andiamo a vedere quello che viene usato di default: Levenberg-Marquardt. Questo è un metodo iterativo, il che spiega la sensibilità ai valori iniziali, caratteristica di ogni metodo iterativo. Consideriamo la nostra funzione di fit f la quale dipende da una variabile indipendente e da un insieme di parametri θ , il quale fondamentalmente è un vettore di \mathbb{R}^m . Possiamo espandere f in serie di taylor intorno ad un valore dei nostri parametri:

$$f(x_i, \theta_j + \delta_j) \simeq f(x_i, \theta_j) + J_{ij}\delta_j \quad (2)$$

dove δ_j è lo spostamento che viene fatto ad ogni passo dell'iterazione e J_{ij} è il gradiente di f , o jacobina se volete:

$$J_{ij} = \frac{\partial f(x_i, \theta_j)}{\partial \theta_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1, \theta_1)}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f(x_1, \theta_m)}{\partial \theta_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_n, \theta_1)}{\partial \theta_1} & \dots & \frac{\partial f(x_n, \theta_m)}{\partial \theta_m} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Che è una matrice $m \times n$ con $m < n$ altrimenti il metodo non funziona e dobbiamo adottare altre strategie. Per trovare il valore di δ espandiamo la (1):

$$\begin{aligned} S^2(\theta + \delta) &\simeq \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - f(x_i, \beta) - J_{ij}\delta_j)^2}{\sigma_{y_i}^2} \\ &= (y - f(x, \theta) - J\delta)^T W (y - f(x, \theta) - J\delta) \\ &= (y - f(x, \theta))^T W (y - f(x, \theta)) - (y - f(x, \theta))^T W J \delta - (J\delta)^T W (y - f(x, \theta)) + (J\delta)^T W (J\delta) \\ &= (y - f(x, \theta))^T W (y - f(x, \theta)) - 2(y - f(x, \theta))^T W J \delta + \delta^T J^T W (J\delta) \end{aligned} \quad (4)$$

Dove W è tale che $W_{ii} = 1/\sigma_{y_i}^2$ e derivando rispetto a delta otteniamo il metodo di Gauss-Newton:

$$\frac{\partial S^2(\theta + \delta)}{\partial \delta} = -2(y - f(x, \theta))^T W J + 2\delta^T J^T W J = 0 \quad (5)$$

per cui facendo il trasposto a tutto otteniamo:

$$(J^T W J)\delta = J^T W (y - f(x, \theta)) \quad (6)$$

La quale si risolve per δ . Per migliorare la convergenza del metodo si introduce un parametro di damping λ e l'equazione diventa:

$$(J^T W J - \lambda \text{diag}(J^T W J))\delta = J^T W (y - f(x, \theta)) \quad (7)$$

Il valore di λ viene cambiato a seconda se ci avviciniamo o meno alla soluzione giusta. Se ci stiamo avvicinando ne riduciamo il valore, andando verso il metodo di Gauss-Newton; mentre se ci allontaniamo ne aumentiamo il valore in modo che l'algoritmo si comporti più come un gradiente discendente (di cui in appendice ci sarà un esempio). La domanda è: come capiamo se ci stiamo avvicinando alla soluzione? Calcoliamo:

$$\begin{aligned} \rho(\delta) &= \frac{S^2(x, \theta) - S^2(x, \theta + \delta)}{|(y - f(x, \theta) - J\delta)^T W (y - f(x, \theta) - J\delta)|} \\ &= \frac{S^2(x, \theta) - S^2(x, \theta + \delta)}{|\delta^T (\lambda \text{diag}(J^T W J)\delta + J^T W (y - f(x, \theta)))|} \end{aligned} \quad (8)$$

se $\rho(\delta) > \varepsilon_1$ la mossa è accetta e riduciamo λ senno rimaniamo nella vecchia posizione. Altra domanda a cui rispondere è: quando siamo arrivati a convergenza? definiamo:

$$R1 = \max(|J^T W (y - f(x, \theta))|) \quad (9)$$

$$R2 = \max(|\delta/\theta|) \quad (10)$$

$$R3 = |S^2(x, \theta)/(n-m) - 1| \quad (11)$$

Se una di queste quantità è minore di una certa tolleranza allora l'algoritmo termina. Rimane ora un ultima domanda a cui rispondere e possiamo passare al codice. Dato che ci servono gli errori sui parametri di fit: come calcoliamo la matrice di covarianza? Basta calcolare:

$$\text{Cov} = (J^T W J)^{-1} \quad (12)$$

quindi gli errori saranno semplicemente la radice degli elementi sulla diagonale, e le altre entrate le correlazioni fra parametri.

Passiamo ora al codice:

```

1 """
2 the code performs a linear and non linear regression
3 Levenberg-Marquardt algorithm. You have to choose
4 some parameters delicately to make the result make sense
5 """
6
7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9
10
11 def lm_fit(func, x, y, x0, sigma=None, tol=1e-6, dense_output=False, absolute_sigma=False):
12     """
13         Implementation of Levenberg-Marquardt algorithm
14         for non-linear least squares. This algorithm interpolates
15         between the Gauss-Newton algorithm and the method of
16         gradient descent. It is iterative optimization algorithms
17         so finds only a local minimum. So you have to be careful
18         about the values you pass in x0
19
20     Parameters
21     -----
22     f : callable
23         fit function
24     x : 1darray
25         the independent variable where the data is measured.
26     y : 1darray
27         the dependent data,  $y \leq f(x, \{\theta\})$ 
28     x0 : 1darray
29         initial guess
30     sigma : None or 1darray
31         the uncertainty on y, if None  $\sigma = \text{np.ones}(\text{len}(y))$ 
32     tol : float
33         required tollerance, the algorithm stop if one of this quantities
34          $R_1 = \text{np.max}(\text{abs}(J.T @ W @ (y - func(x, *x0))))$ 
35          $R_2 = \text{np.max}(\text{abs}(d/x0))$ 
36          $R_3 = \text{sum}(((y - func(x, *x0))/dy)**2)/(N - M) - 1$ 
37         is smaller than tol
38
39     dense_output : bool, optional default False
40         if true all iteration are returned
41     absolute_sigma : bool, optional default False
42         If True, sigma is used in an absolute sense and
43         the estimated parameter covariance pcov reflects
44         these absolute values.
45     pcov(absolute_sigma=False) = pcov(absolute_sigma=True) * chisq(popt)/(M-N)
46
47     Returns
48     -----
49     x0 : 1d array or ndarray
50         array solution
51     pcov : 2darray
52         The estimated covariance of popt
53     iter : int
54         number of iteration
55     """
56
57     iter = 0                      #initialize iteration counter
58     h = 1e-7                      #increment for derivatives
59     l = 1e-3                      #damping factor
60     f = 10                         #factor for update damping factor
61     M = len(x0)                   #number of variable
62     N = len(x)                    #number of data
63     s = np.zeros(M)                #auxiliary array for derivatives
64     J = np.zeros((N, M))          #gradient
65     #some trashold
66     eps_1 = 1e-1
67     eps_2 = tol
68     eps_3 = tol
69     eps_4 = tol
70
71     if sigma is None :            #error on data
72         W = np.diag(1/np.ones(N))
73         dy = np.ones(N)
74     else :
75         W = np.diag(1/sigma**2)
76         dy = sigma

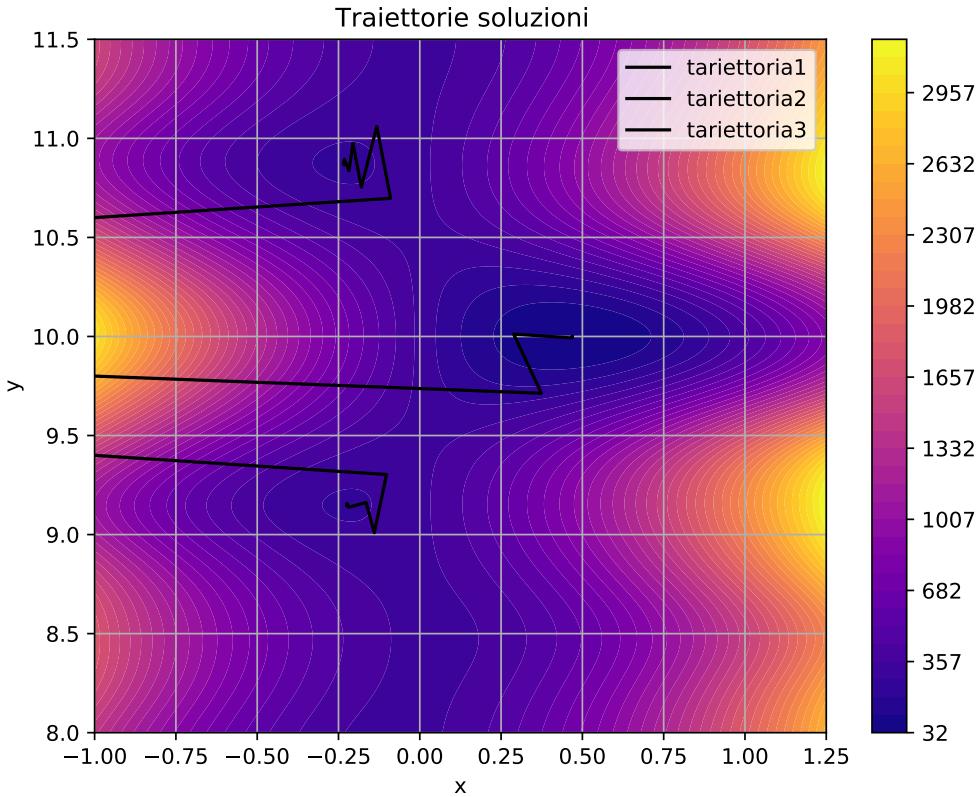
```

```

77
78
79     if dense_output:          #to store solution
80         X = []
81         X.append(x0)
82
83     while True:
84         #jacobian computation
85         for i in range(M):           #loop over variables
86             s[i] = 1                  #we select one variable at a time
87             dz1 = x0 + s*h           #step forward
88             dz2 = x0 - s*h           #step backward
89             J[:,i] = (func(x, *dz1) - func(x, *dz2))/(2*h) #derivative along z's direction
90             s[:] = 0                  #reset to select the other
91
92         variables
93
94         JtJ = J.T @ W @ J           #matrix multiplication, JtJ is an MxM matrix
95         dia = np.eye(M)*np.diag(JtJ)
96         res = (y - func(x, *x0))   #residuals
97         b = J.T @ W @ res          #ordinate or dependent variable values of
98
99         system
100        d = np.linalg.solve(JtJ + l*dia, b)      #system solution
101        x_n = x0 + d                         #solution at new time
102
103        # compute the metric
104        chisq_v = sum((res/dy)**2)
105        chisq_n = sum(((y - func(x, *x_n))/dy)**2)
106
107        rho = chisq_v - chisq_n
108        den = abs(d.T @ (l*np.diag(JtJ)@d + J.T @ W @ res))
109        rho = rho/den
110
111        # acceptance
112        if rho > eps_1 :                 #if i'm closer to the solution
113            x0 = x_n                      #update solution
114            l /= f                        #reduce damping factor
115        else:
116            l *= f                      #else magnify
117
118        # Convergence criteria
119        R1 = np.max(abs(J.T @ W @ (y - func(x, *x0))))
120        R2 = np.max(abs(d/x0))
121        R3 = abs(sum(((y - func(x, *x0))/dy)**2)/(N - M) - 1)
122
123        if R1 < eps_2 or R2 < eps_3 or R3 < eps_4:          #break condition
124            break
125
126        iter += 1
127
128        if dense_output:
129            X.append(x0)
130
131        #compute covariance matrix
132        pcov = np.linalg.inv(JtJ)
133
134        if not absolute_sigma:
135            s_sq = sum(((y - func(x, *x0))/dy)**2)/(N - M)
136            pcov = pcov * s_sq
137
138        if not dense_output:
139            return x0, pcov, iter
140        else :
141            X = np.array(X)
142            return X, pcov, iter

```

Il parametro `dense_output` è stato inserito per fare un plot interessante per far vedere la dipendenza dalle condizioni iniziali. Non riportiamo l'intero codice per non appesantire, la restante parte trattava solo di fare il plot delle curve di livello. In ogni caso è disponibile nell'apposita cartella il codice intero. Questo è il primo vero codice che fa qualcosa di molto complicato esso usa tutto quanto spiegato fin'ora e adesso è evidente l'importanza di mettere commenti, dare nomi sensati e rendere leggibile il codice. Bisogna ricordarsi che i codici in genere vengono scritti una volta ma letti tante volte quindi la chiarezza non va dosata con parsimonia.



Questo grafico rappresenta le curve di livello del modello non lineare $y(t) = A \cos(\omega t)$ ed è facile vedere come partendo da condizioni diverse il fit si incasti in minimo locali. L'asse y corrisponde a ω mentre l'asse x corrisponde ad A . Vediamo ora di testare i risultati del codice fissando qualcosa di un po' più bruttino.

```

1 """
2 Test
3 """
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from scipy.optimize import curve_fit
7 from Lev_Maq import lm_fit
8
9
10 def f(t, A, o1, o2, f1, f2, v, tau):
11     """fit function
12     """
13     return A*np.cos(t*o1 + f1)*np.cos(t*o2 + f2)*np.exp(-t/tau) + v
14
15 ##data
16 x = np.linspace(0, 20, 1000)
17 y = f(x, 200, 10.5, 0.5, np.pi/2, np.pi/4, 42, 25)
18 rng = np.random.default_rng(seed=69420)
19 y_noise = 1 * rng.normal(size=x.size)
20 y = y + y_noise
21 dy = np.array(y.size*[1])
22
23 ##confronto
24
25 init = np.array([101, 10.5, 0.475, 1.5, 0.6, 35, 20])
26
27 pars1, covm1, iter = lm_fit(f, x, y, init, sigma=dy, tol=1e-8)
28 dpar1 = np.sqrt(covm1.diagonal())
29 pars2, covm2 = curve_fit(f, x, y, init, sigma=dy)
30 dpar2 = np.sqrt(covm2.diagonal())
31 print(" -----codice-----|-----scipy-----")
32 for i, p1, dp1, p2, dp2 in zip(range(len(init)), pars1, dpar1, pars2, dpar2):
33     print(f"pars{i} = {p1:.5f} +- {dp1:.5f} ; {p2:.5f} +- {dp2:.5f}")
34
35 print(f"numero di iterazioni = {iter}")
36
37 chisq1 = sum(((y - f(x, *pars1))/dy)**2.)

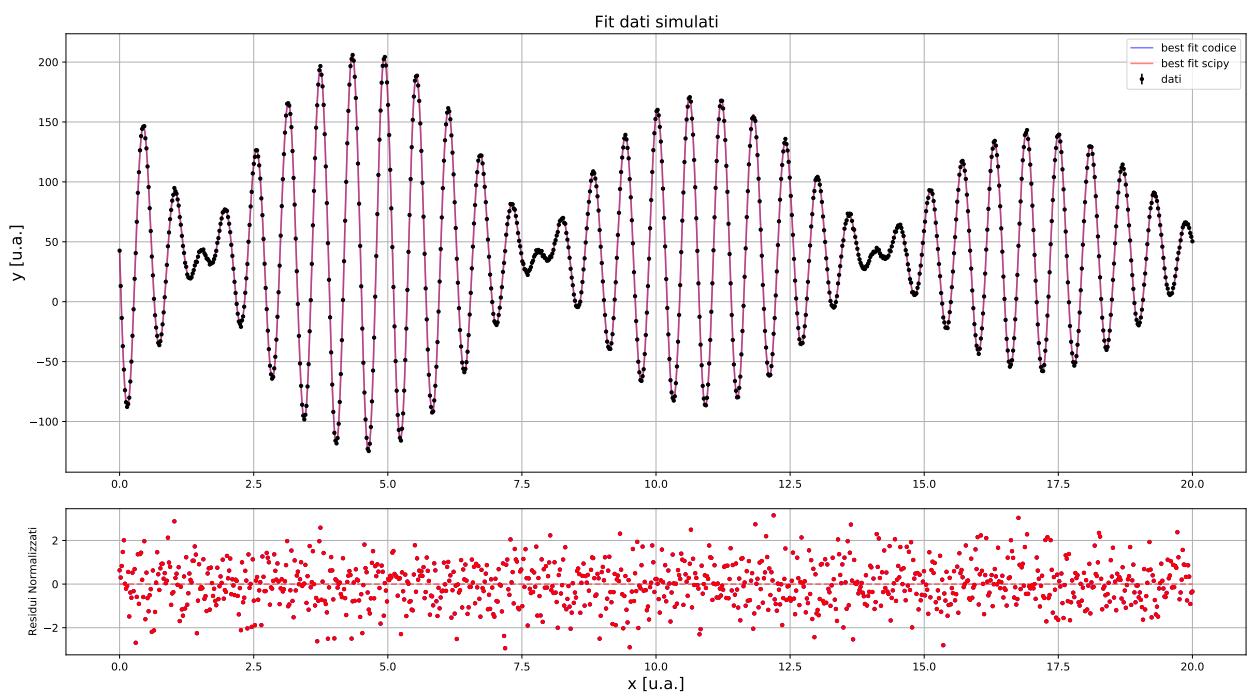
```

```

38 chisq2 = sum(((y - f(x, *pars2))/dy)**2.)
39 ndof = len(y) - len(pars1)
40 print(f'chi quadro codice = {chisq1:.3f} ({ndof:d} dof)')
41 print(f'chi quadro numpy   = {chisq2:.3f} ({ndof:d} dof)')
42
43
44 c1 = np.zeros((len(pars1),len(pars1)))
45 c2 = np.zeros((len(pars1),len(pars1)))
46 #Calcoliamo le correlazioni e le inseriamo nella matrice:
47 for i in range(0, len(pars1)):
48     for j in range(0, len(pars1)):
49         c1[i][j] = (covm1[i][j])/ (np.sqrt(covm1.diagonal()[i])*np.sqrt(covm1.diagonal()[j]))
50         c2[i][j] = (covm2[i][j])/ (np.sqrt(covm2.diagonal()[i])*np.sqrt(covm2.diagonal()[j]))
51 #print(c1) #matrice di correlazione
52 #print(c2)
53
54 ##Plot
55 #Grafichiamo il risultato
56 fig1 = plt.figure(1)
57 #Parte superiore contenente il fit:
58 frame1=fig1.add_axes((.1,.35,.8,.6))
59 #frame1=fig1.add_axes((trasla lateralmente, trasla verticalmente, larghezza, altezza))
60 frame1.set_title('Fit dati simulati', fontsize=15)
61 plt.ylabel('y [u.a.]', fontsize=15)
62 plt.grid()
63
64
65 plt.errorbar(x, y, dy, fmt='.', color='black', label='dati') #grafico i punti
66 t = np.linspace(np.min(x), np.max(x), 10000)
67 plt.plot(t, f(t, *pars1), color='blue', alpha=0.5, label='best fit codice') #grafico del best
       fit
68 plt.plot(t, f(t, *pars2), color='red', alpha=0.5, label='best fit scipy') #grafico del best
       fit scipy
69 plt.legend(loc='best')#inserisce la legenda nel posto migliore
70
71 #Parte inferiore contenente i residui
72 frame2=fig1.add_axes((.1,.1,.8,.2))
73
74 #Calcolo i residui normalizzati
75 ff1 = (y - f(x, *pars1))/dy
76 ff2 = (y - f(x, *pars2))/dy
77 frame2.set_ylabel('Residui Normalizzati')
78 plt.xlabel('x [u.a.]', fontsize=15)
79
80 plt.plot(t, 0*t, color='red', linestyle='--', alpha=0.5) #grafico la retta costantemente zero
81 plt.plot(x, ff1, '.', color='blue') #grafico i residui normalizzati
82 plt.plot(x, ff2, '.', color='red') #grafico i residui normalizzati scipy
83 plt.grid()
84 plt.show()
85
86 [Output]
87      -----codice-----|-----scipy-----
88 pars0 = 199.85504 +- 0.17712 ; 199.85504 +- 0.17712
89 pars1 = 10.50005 +- 0.00009 ; 10.50005 +- 0.00009
90 pars2 = 0.49990 +- 0.00008 ; 0.49990 +- 0.00008
91 pars3 = 1.57040 +- 0.00087 ; 1.57040 +- 0.00087
92 pars4 = 0.78579 +- 0.00067 ; 0.78579 +- 0.00067
93 pars5 = 41.92350 +- 0.03125 ; 41.92350 +- 0.03125
94 pars6 = 24.99194 +- 0.05652 ; 24.99194 +- 0.05652
95 numero di iterazioni = 6
96 chi quadro codice = 969.017 (993 dof)
97 chi quadro numpy   = 969.017 (993 dof)

```

Non abbiamo stampato la matrice di covarianza per avere un po' più di ordine. Vediamo che tra i due non ci sono differenze, siamo felici. Vediamo anche il grafico:



9 Lezione Bonus: Version control

Ok che le lezioni dovrebbero essere 4, ma come avete potuto vedere dall'indice ci sono una serie svariata di appendici e quindi tanto vale aggiungere questa lezione bonus che potrebbe essere molto utile. Tra l'altro potete capire da quanto appena scritto che questa sezione è stata aggiunta molto dopo. Non sappiamo nemmeno se sarà effettivamente una lezione che verrà tenuta. Però nella convinzione che possa essere utile io comunque provo a spiegarvelo. Come sapete queste note e i vari codici sono disponibili su un sito internet chiamato GitHub. GitHub è un sito che serve proprio per queste tipo di cose e per interagirci si può usare git o più semplicemente l'applicazione github desktop. Spieghiamo ora brevemente cos'è il controllo versione. Fondamentalmente immaginate di dover lavorare con più persone ad un progetto, che sia un codice software o una relazione di laboratorio. Quindi è necessario che tutti abbiano le stesse informazioni sui più recenti sviluppi fatti. Per quanto riguarda lo scrivere le relazione e basta magari uno può dire che esistono modi per scrivere e condividere il sorgente, ad esempio overleaf; ma non c'è solo la relazione, c'è anche il codice di analisi dati che sarebbe giusto tutti abbiano. Quindi quello che facciamo è creare un luogo remoto, ad esempio una repository su GitHub, in cui sarà caricato il codice e tutte le altre informazioni. Ogni membro potrà quindi farne una copia, tramite Git o github desktop, sul suo pc, quindi una copia locale della repository, che potrà modificare all'occorrenza. Tale copia si fa con il comando "**git clone ...**" vedremo poi il perché dei tre puntini. Una volta fatta le varie modifiche voi potete, allo stesso modo con cui avete scaricato la versione originale, potete cariarla dalla vostra repository locale sulla repository in remoto sul server. Vediamo un semplice schemino per rendere chiare le idee.

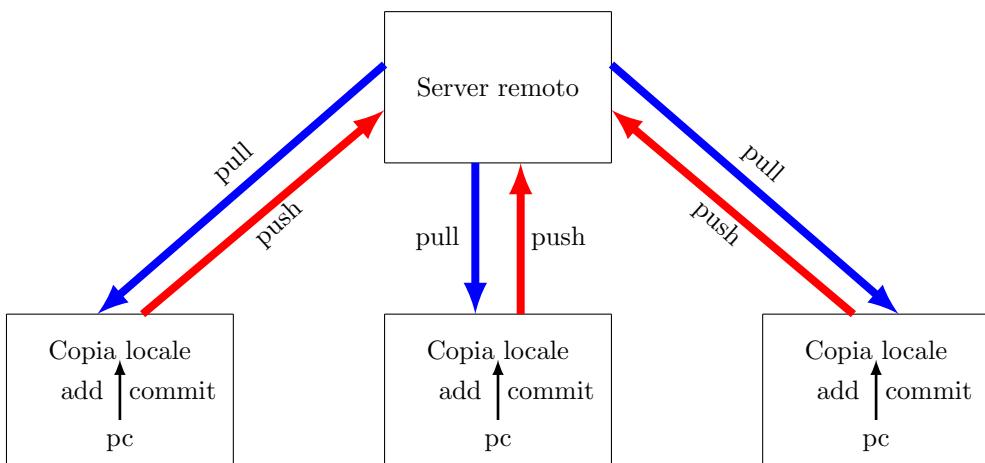


Figura 3: Schema controllo versione distribuito.

I nomi che vedete accanto alle frecce sono i nomi delle operazioni, banalmente i comandi da dare a git. Spieghiamo un attimo: avete un certo file e lo modificate; dovete quindi aggiornare il vostro repository locale facendo "**git add nomefile.estensione**" e "**git commit nomefile.estensione**" (su github desktop vi basterà premere il tasto commit). Fatto ciò per spedire la copia in remoto vi basterà fare "**git push**". Se invece la copia locale è indietro rispetto alla copia remota, per aggiornare vi basterà fare "**git pull**". Ovviamente tutti questi comandi vanno scritti su shell, su github desktop vi basta preme i bottoni in cui ci sta scritto push, pull o che altro sia; abbastanza semplice. Buona norma è aggiungere un commento quando si fa il commit; commento che sarà visibile sulla repository locale. da shell basta fare "**git commit nomefile.estensione -m "commento da inserire"**". Ciò è importante per far capire cosa avete fatto; infatti questo sistema di collaborazione tiene traccia di tutte le versioni di ciò su cui state lavorando, come una vera e propria cronologia, in modo che sia semplice risalire a vecchie versioni in caso di errori. Ora in linea di principio anche dentro il server remoto possono succedere cose, tra **fork**, **pull request**, **issue** e **merge**. Spieghiamo brevemente di che si tratta: Sia A la repository sull'account GitHub di persona A (ho molta fantasia). Voi potete premere dove ci sta scritto **fork** e creare così una copia della repository sul vostro account e fare tutto come detto sopra, creando un ramo secondario. Una volta fatto tutto potete fare una **pull request** cioè chiedere che la vostra modifica entri nel ramo principale dalla quale avete eseguito il **fork**; se chi gestisce la repository (persona A) è d'accordo allora lui farà il **merge**. Tutto ciò può anche essere fatto su una vostra repository ovviamente. Infine un **issue** è una cosa che voi su GitHub aprite dicendo al mondo: sta cosa non funge. Tutto ciò nella speranza che qualcuno veda il vostro problema e attraverso tutti i meccanismi di sopra, o semplicemente con un commento vi aiuti a risolverlo o vi dia consigli sul da farsi. Veniamo all'ultima questione lasciata in sospeso: "**git clone ...**" cosa ci va al posto dei tre puntini? Potete fare due cose: potete banalmente mettere l'HTTPS, prendendo l'url, ma lo trovate anche nella repository su GitHub premendo dove c'è un bottone verde con scritto "Code". Lì trovate anche l'SSH, altra cosa che potete utilizzare, secondo me più comodo perché una

volta che configurate l'SSH dopo aver creato il vostro account GitHub potrete fare tutto quello che volete senza che git vi chieda varie ed eventuali password. Per configurare la chiave SSH potete seguire i due link nell'ordine: prima lui <https://docs.github.com/en/authentication/connecting-to-github-with-ssh/generating-a-new-ssh-key-and-adding-it-to-the-ssh-agent> e poi lui <https://docs.github.com/en/authentication/connecting-to-github-with-ssh/adding-a-new-ssh-key-to-your-github-account>. Con github desktop non avrete questi problemi nel clone e nel resto.

10 Prima Lezione A

Uno dei problemi che spesso capita di dover affrontare in fisica è di dover diagonalizzare una matrice cioè trovare λ e \mathbf{v} tale che:

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad . \quad (13)$$

A volte siamo interessati a tutti gli autovalori, a volte solo ai più grandi o ai più piccoli, dipende un po' dai casi, quindi vogliamo un po' far vedere qualche metodo per calcolare la decomposizione spettrale di una data matrice.

10.1 Metodo delle potenze

Il più semplice metodo da poter implementare è il metodo delle potenze, il quale è un algoritmo iterativo la cui regola di iterazione è:

$$\mathbf{v}_{k+1} = \frac{A\mathbf{v}_k}{\|A\mathbf{v}_k\|} = \frac{A^k\mathbf{v}_0}{\|A^k\mathbf{v}_0\|} \quad . \quad (14)$$

Dove \mathbf{v}_0 è un certo vettore iniziale che sceglieremo a caso. L'idea è abbastanza semplice, se A è diagonalizzabile allora possiamo decomporre un vettore generico nella base degli autovettori di A :

$$\mathbf{v}_0 = \alpha_1 v_1 + \cdots + \alpha_n v_n \quad , \quad (15)$$

Quindi applicando la potenza ennesima di A a v_0 si ottiene:

$$A^k\mathbf{v}_0 = \alpha_1 A^k v_1 + \cdots + \alpha_n A^k v_n \quad (16)$$

$$= \alpha_1 \lambda_1^k v_1 + \cdots + \alpha_n \lambda_n^k v_n \quad (17)$$

$$= \lambda_1^k \left(\alpha_1 v_1 + \cdots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k v_n \right) \quad . \quad (18)$$

Quindi se gli autovalori sono tutti diversi e sono ordinati in ordine decrescente $\lambda_1 > \cdots > \lambda_n$ allora tutti i termini dentro la parentesi tendono a zero per k che va all'infinito in quanto minori di uno. Questo metodo converge all'autovalore maggiore della matrice. Se volessimo trovarli tutti possiamo sempre usare questo metodo ma integrarlo con un metodo di ortogonalizzazione ad esempio Gram–Schmidt che chiamiamo ad ogni passo. Come criteri di convergenza possiamo mettere o la distanza tra iterazione successive dell'autovettore oppure la radice del valore assoluto della differenza tra iterazione successive dell'autovalore. Usiamo la radice perché la convergenza è quadratica negli autovalori:

$$R_{1,2} = \|\mathbf{v}_{k+1} \pm \mathbf{v}_k\| \quad (19)$$

$$R_3 = \sqrt{|\lambda_{k+1} - \lambda_k|} \quad ,$$

dove il \pm deriva dal fatto che sia $+\mathbf{v}$ che $-\mathbf{v}$ sono autovettori. Quindi quando una di queste quantità è minore di una certa tolleranza che sceglieremo noi l'algoritmo termina.

Capita sovente però che magari non si sia interessati a tutti gli autovalori, magari solo ai più grandi o ai più piccoli. Per i più grandi possiamo applicare l'algoritmo così come lo abbiamo descritto. Ma se fossimo interessati ai più piccoli? Per questo secondo basta sostituire A con la sua inversa in quanto gli autovalori di A^{-1} sono il reciproco degli autovalori di A quindi il più grande autovalore di A^{-1} sarà il più piccolo di A , proprio come volevamo; questo si chiama metodo delle potenze inverso. In genere questo in questo metodo non si inverte direttamente A ; si usa invece una routine per risolvere un sistema. Qui è stato deciso invece di invertire direttamente la matrice di partenza senza farci troppi problemi. Vediamo ora il codice:

```

1 import numpy as np
2
3 def eig(M, k=None, tol=1e-10, magnitude='small'):
4     """
5         Compute the eigenvalue decomposition
6         of the symmetric matrix A using power iteration
7         or inverse iteration.
8         Inverse iteration is the same of power iteration
9         but we use M^-1 instead of M so the eigenvalues
10        are the reciprocal.
11
12    Parameters
13    -----
14    M : 2darray
15        N x N matrix, symmetric
16    k : None or int, if None k=N

```

```

17     number of eigenvariates and eigenvectors to find,
18     if k<N then k eigenvectors corresponding to the k
19     largest eigenvalues will be found
20 tol : float, optional default 1e-10
21     required tollerance
22 magnitude : string, optional, default small
23     if magnitude == 'small' the smallest eigenvalues
24     and thei relative eigenvectors will be computed
25     if magnitude == 'big' the biggest eigenvalues
26     and thei relative eigenvectors will be computed
27
28 Return
29 -----
30 eigval : 1darray
31     array of eigenvalues
32 eigvec : 2darray
33     kxk matrix, the column eigvec[:, i] is the
34     ormalized eigenvector corresponding to the
35     eigenvalue eigval[i]
36 counts : 1darray
37     how many iteration are made for each eigenvector
38 ,,
39
40 if magnitude == 'small':
41     A = np.copy(np.linalg.inv(M))
42 if magnitude == 'big':
43     A = np.copy(M)
44
45 N = A.shape[0]
46 if k is None:
47     k = N
48
49 eigvec = [] # will contain the eignvectors
50 eigval = [] # will contain the eignvalues
51 counts = [] # will contain the number of iteration of each eigenvalue
52
53 for _ in range(k):
54
55     v_p = np.random.randn(N) #initial vector
56     v_p = v_p / np.sqrt(sum(v_p**2))
57     l_v = np.random.random()
58     Iter= 0
59
60     while True:
61         l_o = l_v
62         v_o = v_p
63         v_p = np.dot(A, v_p)
64         v_p /= np.sqrt(sum(v_p**2)) # normalization
65
66         # Orthogonalization respect
67         # all eigenvectors find previously
68         for i in range(len(eigvec)):
69             v_p = v_p - np.dot(eigvec[i], v_p) * eigvec[i]
70
71         #eigenvalue of v_p, A @ v_p = l_v * v_p
72         #multiplying by the transposed => (A @ v_p) @ v_p.T = l_v
73         #using v_p @ v_p.T = 1
74         l_v = np.dot(np.dot(A, v_p), v_p)
75
76         R1 = np.sqrt(sum((v_p - v_o)**2))
77         R2 = np.sqrt(sum((v_o + v_p)**2))
78         R3 = np.sqrt(abs(l_v - l_o)) # In eigenvalues the convergence is quadratic
79
80         Iter += 1
81         if R1 < tol or R2 < tol or R3 < tol:
82             break
83
84         eigvec.append(v_p)
85         eigval.append(l_v)
86         counts.append(Iter)
87
88 if magnitude == 'small':
89     eigval = 1/np.array(eigval)
90     eigvec = np.array(eigvec).T
91 if magnitude == 'big':
92     eigvec = np.array(eigvec).T

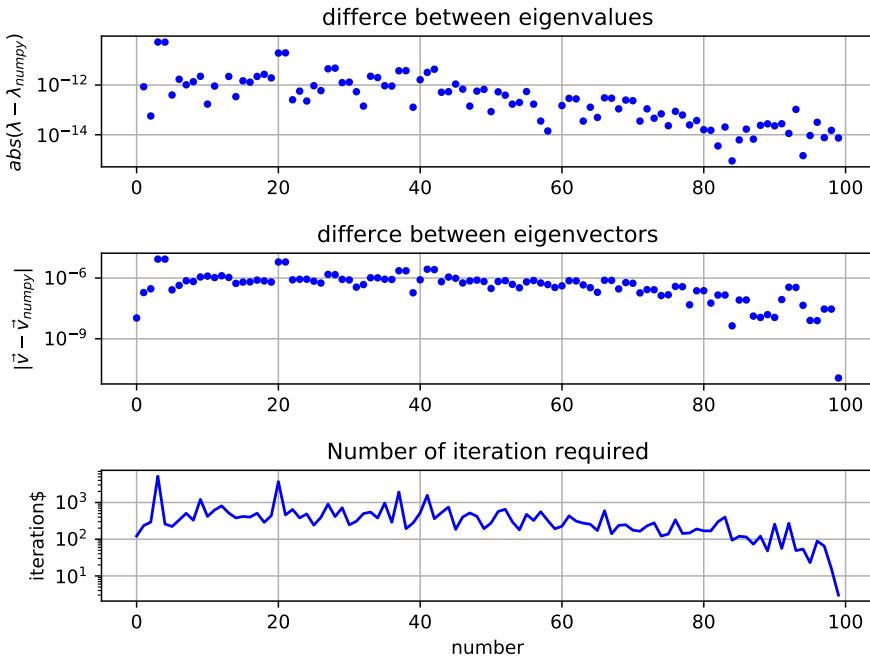
```

```

93     eigval = np.array(eigval)
94
95     return eigvec, eigval, counts

```

Vediamo ora i risultati due test del nostro algoritmo. Cominciamo generando una matrice random grazie a numpy e per averla simmetrica consideriamone il prodotto per se stessa trasposta: "P = np.random.normal(size=[n, n]) H = np.dot(P.T, P)"; quindi diagonalizziamo H, prendiamo $n = 100$, settando "magnitude='big'". Mostriamo solo il risultato, il codice lo troverete scritto nella cartella, confrontando il risultato con la diagonalizzazione fatta da numpy:



Dal punto di vista del tempo chiaramente numpy nemmeno fa fatica: 14.240 secondi noi contro 0.001 di numpy, e ci guarda pure con aria di superiorità perché gli facciamo schifo. Comunque il risultato è soddisfacente.

10.2 Equazione di Schrödinger

Vediamo ora un test un po' più fisico dove siamo interessati agli autovalori più piccoli. Consideriamo una matrice 'a bischero' fatta del tipo:

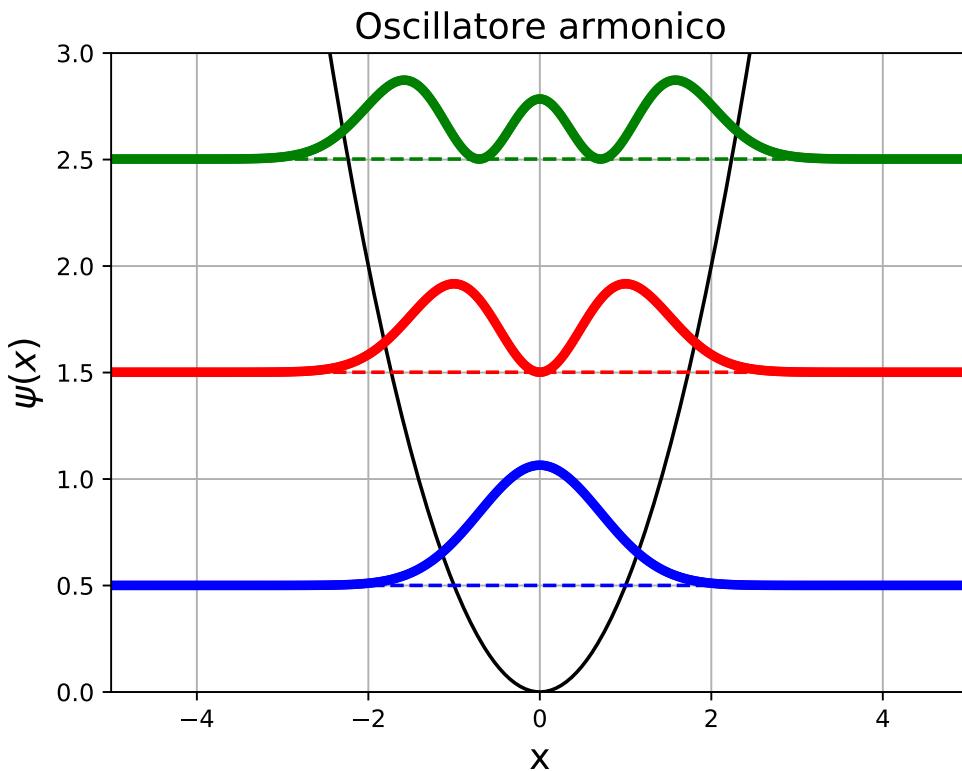
$$H = -\frac{1}{2h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(x_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V(x_2) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 0 & V(x_{N-1}) & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & V(x_N) \end{pmatrix} \quad (20)$$

dove h è la spaziatura tra x_i e x_{i+1} il quale è un array in un certo range in un certo numero di punti. Probabilmente avrete notato che la matrice scritta sopra non è altro che la discretizzazione dell'equazione di Schrödinger (non stiamo qui a ricavarla, lo vedrete nei corsi di meccanica quantistica, prendetela per buona per il momento) non dipendente dal tempo :

$$H\psi = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi = E\psi \quad (21)$$

Qui chiaramente siamo interessati solo ai livelli energetici minori in quanto l'approssimazione del laplaciano che abbiamo fatto peggiora man mano che gli stati sono sempre più estesi, discretizzare così infatti significa mettersi dentro una scatola di lato fissato ma chiaramente noi vorremo la scatola infinita, quindi per i livelli più bassi l'approssimazione è buona ($h = L/N$ nel nostro caso abbiamo preso $L=20$ e $N=1000$). Per semplicità consideriamo il caso dell'oscillatore armonico $V(x) = x^2/2$ e troviamo i dieci autovalori più bassi (analiticamente e in unità naturali $E = n + 1/2$). Grafichiamo anche poi per bellezza tre autovettori, o autofunzioni, con il caveat che ogni autovettore va diviso per \sqrt{h} . Come sopra il codice è già scritto e lo trovate tutto insieme, noi qui mostriamo solo i risultati:

teorico	calcolato	errore
0.5	0.50049	4.88e-04
1.5	1.50144	1.44e-03
2.5	2.50234	2.34e-03
3.5	3.50319	3.19e-03
4.5	4.50399	3.99e-03
5.5	5.50474	4.74e-03
6.5	6.50544	5.44e-03
7.5	7.50609	6.09e-03
8.5	8.50669	6.69e-03
9.5	9.50724	7.24e-03



Per un totale di tempo di esecuzione di 0.77814 secondi. Precisiamo infine che benché essa sia un'equazione differenziale ordinaria non può essere risolta come tale in quanto non è noto a priori il valore dell'energia. Volendo si può adottare una strategia simile usando il metodo di shooting, ovvero si risolve l'equazione come fosse una normale ode usando una guess per l'energia e poi si usa l'energia come parametro di shooting; Si cerca quindi tramite un algoritmo di root finding un valore di E (parametro di shooting) che dia un buon risultato (dove buono si intende che c'è una variazione di una qualche quantità minore di una tolleranza da noi settata). Un esempio di metodo di shooting, anche se non applicato all'equazione di Schrödinger è presente nelle appendici.

10.3 Algoritmo QR

Vediamo adesso un altro algoritmo che può essere interessante trattare. Come si può intuire dal nome questo algoritmo si basa sulla scomposizione QR di una matrice, dove Q è una matrice ortogonale $Q^T = Q^{-1}$ e R è una matrice triangolare superiore. Data quindi la nostra matrice A da diagonalizzare quello che si fa è, chiamando $A_0 = A = Q_0 R_0$:

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k \quad . \quad (22)$$

Vedete quindi che procedendo per trasformazioni ortogonali tutte le A_k sono simili. Avremo quindi che gli autovalori saranno gli elementi sulla diagonale della matrice A_{k+1} . Mentre per gli autovettori quello che si fa è calcolare il prodotto delle varie Q_k con loro stesse:

$$V = Q_0 Q_1 \dots Q_k \quad , \quad (23)$$

V sarà la matrice che conterrà gli autovettori di A . Tutto ciò viene eseguito un certo tot di volte che scegliamo noi da input. Per completare la spiegazione andiamo a vedere come si esegue la decomposizione QR . Fondamentalmente si tratta di applicare Gram-Schmidt alle colonne di A .

$$A = [\mathbf{a}_1 | \mathbf{a}_2 | \dots | \mathbf{a}_N] \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= \mathbf{a}_1, & \mathbf{e}_1 &= \frac{\mathbf{v}_1}{\|\mathbf{v}_1\|} \\ \mathbf{v}_2 &= \mathbf{a}_2 - (\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{e}_1)\mathbf{e}_1, & \mathbf{e}_2 &= \frac{\mathbf{v}_2}{\|\mathbf{v}_2\|} \\ &\vdots & &\vdots \\ \mathbf{v}_k &= \mathbf{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} (\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{e}_j)\mathbf{e}_j, & \mathbf{e}_k &= \frac{\mathbf{u}_k}{\|\mathbf{u}_k\|}. \end{aligned}$$

Dunque possiamo arrivare a dire che:

$$A = [\mathbf{e}_1 | \mathbf{e}_2 | \dots | \mathbf{e}_N] \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{e}_1 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{e}_1 & \dots & \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{e}_1 \\ 0 & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{e}_2 & \dots & \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{e}_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{a}_N \cdot \mathbf{e}_N \end{pmatrix} = QR \quad . \quad (25)$$

Questo metodo, a differenza del precedente, con il quale potevamo scegliere quanti autovalori e autovettori farci calcolare, restituisce tutti gli autovalori e gli autovettori della nostra matrice. Siamo in Python, probabilmente per matrici grandi ci vorrà tanto. Passiamo quindi adesso al codice:

```

1 #=====
2 # Function to compute QR decomposition
3 #=====
4
5 def QR_decomp(A):
6     """
7         Comupute QR decomposition of a matrix A
8
9     Parameters
10    -----
11     A : 2darray
12         N x N matrix
13
14     Returns
15    -----
16     Q, R : 2darray
17         A = Q @ R
18     """
19
20     # we give different names because in principle the QR
21     # decomposition also applies to non-square matrices
22     n, m = A.shape
23
24     Q = np.zeros((n, n)) # Initialize matrix Q
25     R = np.zeros((n, m)) # Initialize matrix R
26     v = np.zeros((n, n)) # Initialize matrix v: for Gram-Schmidt
27
28     u[:, 0] = A[:, 0]
29     Q[:, 0] = v[:, 0] / np.sqrt(sum(v[:, 0]**2))
30
31     for i in range(1, n):
32
33         v[:, i] = A[:, i]
34         for j in range(i):
35             v[:, i] -= (A[:, i] @ Q[:, j]) * Q[:, j]
36
37         Q[:, i] = v[:, i] / np.sqrt(sum(v[:, i]**2))
38
39
40     for i in range(n):
41         for j in range(i, m):
42             R[i, j] = A[:, j] @ Q[:, i]

```

```

44     # uncomment for scipy comparison
45     #D = np.diag(np.sign(np.diag(Q)))
46     #Q[:, :] = Q @ D
47     #R[:, :] = D @ R
48
49     return Q, R
50
51 #=====
52 # Function to solve eigensystem via QR iteration
53 #=====
54
55 def QR_eig(A, maxiter=100):
56     """
57     Find the eigenvalues of A using QR iteration.
58
59     Parameters
60     -----
61     A : 2darray
62         N x N matrix
63     maxiter : int, optional, default 100
64         number of iterations to do
65
66     Returns
67     -----
68     eigval : 1darray
69         array of eigenvalues
70     eigvec : 2darray
71         N x N matrix, the column eigvec[:, i] is the
72         ormalized eigenvector corresponding to the
73         eigenvalue eigval[i]
74     """
75     A_new, A_old = [np.copy(A)]*2
76
77     eigvec = np.eye(A.shape[0])
78
79     for i in range(maxiter):
80
81         A_old[:, :] = A_new
82         Q, R = QR_decomp(A_old)
83
84         A_new[:, :] = R @ Q
85         eigvec = eigvec @ Q
86
87     eigval = np.diag(A_new)
88
89     return eigval, eigvec

```

Facendo la prova con la stessa matrice a bischero di prima infatti otteniamo un tempo di 717.6 secondi, usando le iterazioni di default. I risultati sono gli stessi che quelli mostrati in precedenza. Attenzione ora però all'ordine degli autovalori, dovrebbero essere ordinati dal più grande al più piccolo.

10.4 Lanczos

Un'ultima cosa carina da spiegare è l'iterazione di Lanczos, caso particolare della più generale iterazione di Arnoldi; ma per i casi di interesse fisico le ipotesi sono sempre ragionevoli: la matrice da diagonalizzare deve essere hermitiana. L'idea è di trovare due matrici per cui valga:

$$A = Q^\dagger H Q. \quad (26)$$

H sarà un amatrice tridiagonale simmetrica reale e sarà quella che andremo a diagonalizzare. Essa sarà una matrice più piccola rispetto ad A , la dimensione è un parametro che sceglieremo noi, quindi verrà più leggero il conto, ma non siamo in grado di recuperare tutti gli autovalori, e autovettori di A . L'unico modo per farlo è imporre che H abbia la stessa dimensione di A . Q invece sarà una certa matrice con colonne ortonormali; se poi T ha la stessa dimensione di A allora Q sarà unitaria. Tornando a noi diagonalizzando H avremo un certo numero di autovalori, che sono anche autovalori di A , non necessariamente tutti sequenziali. Per gli autovettori invece, se vale $H\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$ allora $Q\mathbf{y}$ è autovalore di A . Vediamo subito il codice:

```

1 def lanczos(A, n):
2     """
3     Lanczos iteration for a matrix A
4
5     Parameter
6     -----

```

```

7   A : 2darray
8       Hermitian N x N matrix
9   n : int
10      dimension of Krylov subspace
11      e.g. dimension of H
12
13  Return
14  -----
15  Q, H : 2darray
16      A = Q.T H Q
17
18  m      = A.shape[0]
19  Q      = np.zeros((m, n+1))
20  alpha = np.zeros(n)
21  beta  = np.zeros(n)
22  b     = np.random.randn(m)
23
24  Q[:,0] = b / np.sqrt(sum(b**2))
25
26  for i in range(n):
27      v      = np.dot(A, Q[:,i])
28      alpha[i] = np.dot(Q[:,i], v)
29
30  if i == 0:
31      v = v - alpha[i] * Q[:, i]
32  else :
33      v = v - beta[i-1] * Q[:, i-1] - alpha[i] * Q[:, i]
34
35  beta[i] = np.sqrt(sum(v**2))
36  Q[:,i+1] = v / beta[i]
37
38  H = Q.T @ A @ Q
39
40  return Q, H

```

Calcolata H la passiamo quindi a una delle funzioni sopra scritte e vediamo che succede. Per riuscire a prendere dei buoni risultati per i primi livelli eccitati usiamo come $n = 300$, quindi l'algoritmo QR ora sarà un po' più spicchio. Vediamo cosa esce sempre per il caso dell'oscillatore armonico.

teorico	QR	errore	potenze	errore
0.5	0.50068	6.80e-04	0.50068	6.80e-04
1.5	1.50146	1.46e-03	1.50145	1.45e-03
2.5	2.50321	3.21e-03	2.50257	2.57e-03
3.5	3.59515	9.51e-02	3.59459	9.46e-02
4.5	4.61829	1.18e-01	4.61261	1.13e-01
5.5	6.60135	1.10e+00	6.59104	1.09e+00
6.5	7.76801	1.27e+00	7.74208	1.24e+00
7.5	10.35934	2.86e+00	10.36662	2.87e+00
8.5	12.02403	3.52e+00	12.04071	3.54e+00
9.5	13.48530	3.99e+00	13.49227	3.99e+00

Vedete quindi come per i primi 5 livelli vada tutto bene, poi gli altri autovalori sono diversi o un po' sbagliati: ad esempio 10.35 è un po' lontano mentre 13.49 è già un migliore risultato. Come dicevamo prima vedete poi che ci sono degli autovalori che sono spariti in quanto H è solo 300×300 . Dal punto di vista dei tempi QR impiega circa 48 secondi, mentre il metodo delle potenze circa 0.1 secondi.

11 Seconda lezione A

11.1 Trasformate di Fourier

11.1.1 DFT

La trasformata di Fourier è una trasformata integrale che ci permette di cambiare dominio della nostra funzione: ad esempio da tempo a frequenze o da spazio a numero d'onda. Data una funzione:

$$f(t) \quad \text{tale che} \quad \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|dt < \infty \quad (27)$$

Definiamo trasformata e anti trasformata di f come:

$$\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt = \mathcal{F}\{f\}(\omega) \quad (28)$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega)e^{i\omega t} d\omega = \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}\}(t) \quad (29)$$

$$(30)$$

e gode di varie proprietà:

$$\mathcal{F}(D^k f) = (-i\omega)^k \mathcal{F}(f) \quad \mathcal{F}(f(t-a)) = e^{i\omega a} \mathcal{F}(f(t)) \quad \mathcal{F}(e^{i\omega a} f(t)) = \tilde{f}(\omega - a) \quad \mathcal{F}((it)^k f) = D^k \mathcal{F}(f) \quad (31)$$

Qui abbiamo in realtà aggiunto altre ipotesi su f (e.g. $f \in C^k$) ma va beh. Vediamo un piccolo grafico che meglio ci consenta di capire, in maniera intuitiva, cosa vuol dire questo cambio di base:

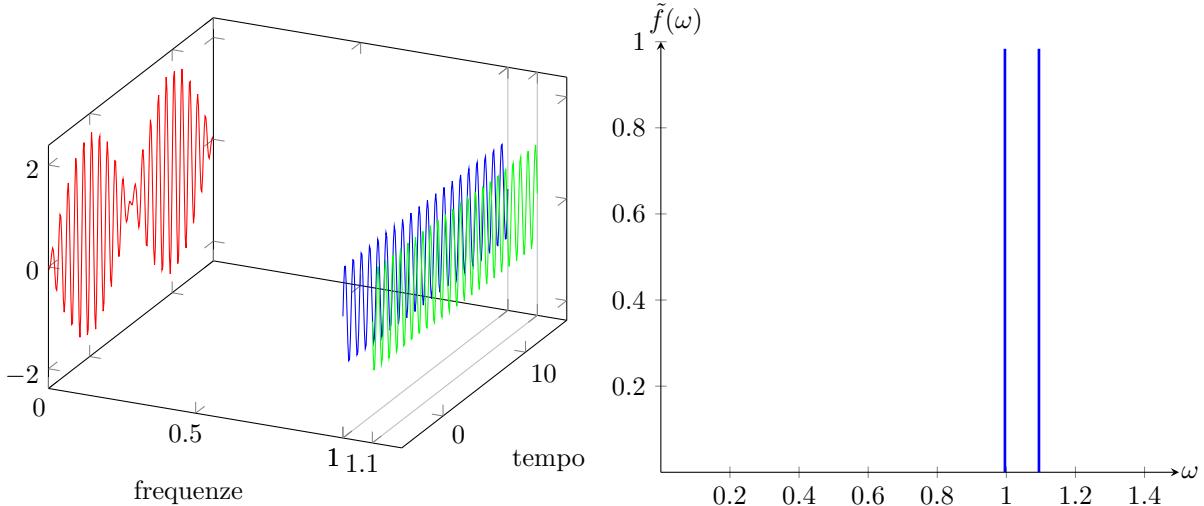


Figura 4: Allora, capisco che i due grafici sopra, in special modo il grafico di sinistra, siano magari non di immediata comprensione ma cerchiamo di descriverli e capirli. Partiamo da quello di sinistra: si tratta di un'immagine pittorica per vedere quella che è la serie di Fourier, ovvero una funzione scritta come somma di seni e/o coseni (armoniche). La funzione che vedete plottata sul piano a frequenza zero è: $\sin(2\pi t1) + \sin(2\pi t1.1)$ (ovviamente quella funzione non ha una omega nulla, è solo plottata lì a titolo espositivo). Tale funzione è formata da due seni che sono i due plottati a parte (blu e verde); ognuno giace sul piano alla propria frequenza, rispettivamente $\omega = 1, 1.1$ (purtroppo per avere i battimenti le ω devono essere vicine). Questo plot ci aiuta a capire cosa fa la trasformata di Fourier, perché vediamo in funzione di omega solo due segnali, quindi ci aspettiamo solo due valori di frequenza non nulli. Ciò che la trasformata ci restituisce è il grafico a destra: ovvero un grafico che ci fa capire le quali sono le armoniche che compongono la nostra funzione. Nella fattispecie sono due delta di Dirac (in linea teorica); nella pratica saranno delle gaussiane più o meno strette a seconda dei dati.

Andiamo ora nel discreto; abbiamo:

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-\frac{2\pi i}{N} kn}, \quad k = 0, \dots, N-1 \quad (32)$$

e non è difficile vedere che fondamentalmente la trasformata di Fourier discreta (DFT) è un prodotto matrice per vettore:

$$X_k = W_{kn}x_n \quad W_{kn} = e^{-\frac{2\pi i}{N}kn} \quad (33)$$

e l'anti trasformata non sarà altro che:

$$X_k = \frac{1}{N}W_{kn}^{-1}x_n \quad W_{kn}^{-1} = e^{\frac{2\pi i}{N}kn} \quad (34)$$

Dunque è facile notare che la complessità dell'algoritmo è $\mathcal{O}(N^2)$; vediamone una semplice implementazione:

```

1 """
2 Implementetion of DFT
3 """
4
5 import time
6 import numpy as np
7 import matplotlib.pyplot as plt
8
9 def DFT(x, anti=-1):
10     """
11     Compute the discrete Fourier Transform of the 1D array x
12
13     Parameters
14     -----
15     x : 1darray
16         data to transform
17     anti : int, optional
18         -1 trasform
19         1 anti trasform
20
21     Return
22     -----
23     dft : 1d array
24         dft or anti dft of x
25     """
26
27     N = len(x)      # length of array
28     n = np.arange(N) # array from 0 to N
29     k = n[:, None]   # transposed of n written as a Nx1 matrix
30     # is equivalent to k = np.reshape(n, (N, 1))
31     # so k * n will be a N x N matrix
32
33     M = np.exp(anti * 2j * np.pi * k * n / N)
34     dft = M @ x
35
36     if anti == 1:
37         return dft/N
38     else:
39         return dft

```

11.1.2 FFT

I signori Cooley e Tukey si inventarono un modo per accelerare un po' il calcolo della DFT e crearono la FFT (trasformata di Fourier veloce) la quale ha ordine $\mathcal{O}(N \ln_2(N))$. Qui vedremo il caso più semplice, quello in cui l'array da trasformare deve essere lungo necessariamente una potenza di 2 (FFT radix 2). Esistono anche altri algoritmi, chiamati a radice mista, in cui possiamo rilassare questo vincolo, ad esempio le funzioni di numpy non hanno questo vincolo. vediamo brevemente l'algoritmo:

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-\frac{2\pi i}{N}kn} \quad (35)$$

$$= \sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n} e^{-\frac{2\pi i}{N}k(2n)} + \sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n+1} e^{-\frac{2\pi i}{N}k(2n+1)} \quad (36)$$

$$= \sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}kn} + e^{-\frac{2\pi i}{N}k} \sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n+1} e^{-\frac{2\pi i}{N/2}kn} \quad (37)$$

$$= DFT(x_{2n}) + e^{-\frac{2\pi i}{N}k} DFT(x_{2n+1}) \quad (38)$$

e quindi ripetiamo ricorsivamente questa divisione, fino ad arrivare ad un N_{min} che blocca la ricorsione e ed esegue una DFT come vista sopra; quindi N/N_{min} DFT:

```

1 """
2 Implementation of FFT
3 """
4 import time
5 import numpy as np
6 import matplotlib.pyplot as plt
7
8
9 def FFT(x, anti=1):
10     """
11         A recursive implementation of the Cooley-Tukey FFT
12
13     Parameters
14     -----
15     x : ndarray
16         data to transform
17     anti : int, optional
18         -1 trasform
19         1 anti trasform
20
21     Return
22     -----
23     fft : 1d array
24         fft or anti fft of x
25     """
26
27     N = x.shape[0]
28
29     if N % 2 > 0:
30         raise ValueError("size of x must be a power of 2")
31     elif N <= 32:
32         return DFT(x, anti)
33     else:
34         X_even = FFT(x[0::2])
35         X_odd = FFT(x[1::2])
36         factor = np.exp(-anti*2j * np.pi * np.arange(N) / N)
37         return np.concatenate([X_even + factor[:N / 2] * X_odd,
38                               X_even + factor[N / 2:] * X_odd])

```

Cerchiamo di capire perché questa divisione accelera il calcolo: abbiamo detto che la DFT è $\mathcal{O}(N^2)$. Quindi al primo passo come visto sopra abbiamo 2 DFT e un prodotto di due vettori $\mathcal{O}(N)$ per cui:

- prima divisione: $\frac{N}{2} \rightarrow 2 \underbrace{\left(\frac{N}{2} \right)^2}_{\text{DFT}} + N = \frac{N^2}{2} + N$
- seconda divisione: $\frac{N}{4} \rightarrow 2 \left(2 \underbrace{\left(\frac{N}{4} \right)^2}_{\text{DFT}} + \frac{N}{2} \right) + N = \frac{N^2}{4} + 2N$

Capendo l'antifona otteniamo che l'ultima divisione è: $\frac{N}{2^p} \rightarrow \frac{N^2}{2^p} + pN = \frac{N^2}{N} + \ln_2(N)N \rightarrow \mathcal{O}(N \ln_2(N))$
Dove abbiamo usato che $N = 2^m$ allora al massimo deve essere $p = m = \ln_2(N)$.

Possiamo però costruire un algoritmo iterativo che ottimizzi il codice sopra scritto e la vettorizzazione di Python ci aiuta:

```

1 """
2 Implementation of FFT
3 """
4 import time
5 import numpy as np
6 import matplotlib.pyplot as plt
7
8 def FFT(x, anti=-1):
9     """
10         Compute the Fast Fourier Transform of the 1D array x.
11         Using non recursive Cooley-Tukey FFT.
12         In recursive FFT implementation, at the lowest
13         recursion level we must perform N/N_min DFT.
14         The efficiency of the algorithm would benefit by
15         computing these matrix-vector products all at once
16         as a single matrix-matrix product.
17         At each level of recursion, we also perform
18         duplicate operations which can be vectorized.
19
20     Parameters
21     -----
22     x : ndarray

```

```

23     data to transform
24     anti : int, optional
25         -1 trasform
26         1 anti trasform
27
28     Return
29     -----
30     fft : 1d array
31         fft or anti fft of x
32
33     ,
34     N = len(x)
35
36     if np.log2(N) % 1 > 0:
37         msg_err = "The size of x must be a apower of 2"
38         raise ValueError(msg_err)
39
40     # stop criterion
41     N_min = min(N, 2**2)
42
43     # DFT on all length-N_min sub-problems
44     n = np.arange(N_min)
45     k = n[:, None]
46     M = np.exp(anti * 2j * np.pi * n * k / N_min)
47     X = np.dot(M, x.reshape((N_min, -1)))
48
49     while X.shape[0] < N:
50         # first part of the matrix, the one on the left
51         X_even = X[:, :X.shape[1] // 2] # all rows, first X.shape[1]//2 columns
52         # second part of the matrix, the one on the right
53         X_odd = X[:, X.shape[1] // 2:] # all rows, second X.shape[1]//2 columns
54
55         f = np.exp(anti * 1j * np.pi * np.arange(X.shape[0]) / X.shape[0])[:, None]
56         X = np.vstack([X_even + f*X_odd, X_even - f*X_odd]) # re-merge the matrix
57
58     fft = X.ravel() # flattens the array
59     # from matrix Nx1 to array with length N
60
61     if anti == 1:
62         return fft/N
63     else :
64         return fft

```

11.1.3 RFFT

Ultima interessante implementazione è il caso in cui l'input sia reale, per cui è possibile definire una variabile complessa fare una FFT lunga la metà e ricostruire lo spettro con le proprietà di simmetria della FFT. Se siamo interessati alle frequenze positive, che è il caso usuale fondamentalmente prendere i primi $N/2 + 1$ elementi della nostra FFT.

```

1 def RFFT(x, anti=-1):
2     ''
3     Compute the fft for real value using FFT
4     only values corresponding to positive
5     frequencies are returned.
6
7     The transform is implemented by passing to
8     a complex variable z = x[2n] + j x[2n+1]
9     then an fft of length N/2 is calculated
10    For the inverse we adopt an other method
11    (the previous method didn't work,
12    if you know how to fix it ... I would be grateful)
13
14    Parameters
15    -----
16    x : 1darray
17        data to transform
18    anti : int, optional
19        -1 trasform
20        1 anti trasform
21
22    Return
23    -----
24    rfft : 1d array
25        rfft or anti rfft of x

```

```

26
27     ''
28     if anti == -1 :
29         z = x[0::2] + 1j * x[1::2] # Splitting odd and even
30         Zf = FFT(z)
31         Zc = np.array([Zf[-k] for k in range(len(z))]).conj()
32         Zx = 0.5 * (Zf + Zc)
33         Zy = -0.5j * (Zf - Zc)
34
35         N = len(x)
36         W = np.exp(- 2j * np.pi * np.arange(N//2) / N)
37         Z = np.concatenate([Zx + W*Zy, Zx - W*Zy])
38
39     return Z[:N//2+1]
40
41 if anti == 1 :
42     # we use the fft symmetries to reconstruct the whole spectrum
43     N = 2*(len(x)-1) # length of final array
44     x1 = x[:-1] # cut last value
45     S = len(x1) # length of new array
46     xn = np.zeros(N, dtype=complex)
47     xn[0:S] = x1
48     xx = x[1:] # cut first element, zero frequency mode
49     xx = xx[::-1] # rewind array
50     xn[S:N] = xx.conj()
51     z = FFT(xn, anti=1)
52
53 return np.real(z)

```

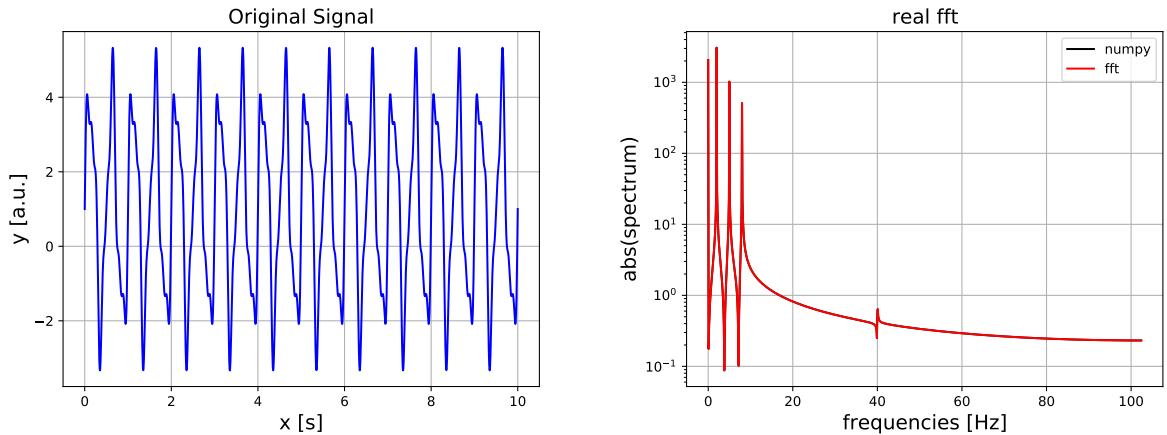
Ultima cosa da vedere è come creare l'array delle frequenze, quello che sarebbe np.fft.freq:

```

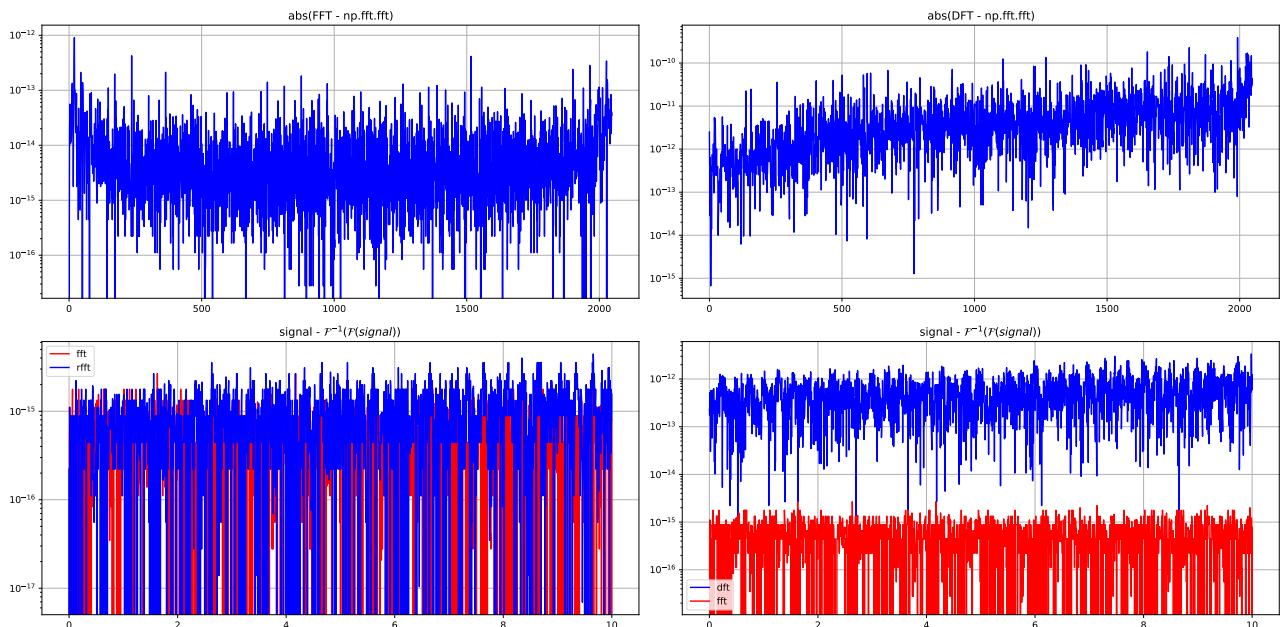
1 def fft_freq(n, d, real):
2     ''
3     Return the Discrete Fourier Transform sample frequencies.
4     if real = False then:
5         f = [0, 1, ..., n/2-1, -n/2, ..., -1] / (d*n)    if n is even
6         f = [0, 1, ..., (n-1)/2, -(n-1)/2, ..., -1] / (d*n)    if n is odd
7     else :
8         f = [0, 1, ..., n/2-1, n/2] / (d*n)    if n is even
9         f = [0, 1, ..., (n-1)/2-1, (n-1)/2] / (d*n)    if n is odd
10
11 Parameters
12 -----
13 n : int
14     length of array that you transform
15
16 d : float
17     Sample spacing (inverse of the sampling rate).
18     If the data array is in seconds
19     the frequencies will be in hertz
20 real : bool
21     false for fft
22     true for rfft
23
24 Returns
25 -----
26 f: 1d array
27     Array of length n containing the sample frequencies.
28     ''
29     if not real:
30         if n%2 == 0:
31             f1 = np.array([i for i in range(0, n//2)])
32             f2 = np.array([i for i in range(-n//2, 0)])
33             return np.concatenate((f1, f2))/(d*n)
34         else :
35             f1 = np.array([i for i in range((n-1)//2 + 1)])
36             f2 = np.array([i for i in range(-(n-1)//2, 0)])
37             return np.concatenate((f1, f2))/(d*n)
38     if real:
39         if n%2 == 0:
40             f1 = np.array([i for i in range(0, n//2 + 1)])
41             return f1 / (d*n)
42         else :
43             f1 = np.array([i for i in range((n-1)//2 + 1)])
44             return f1 / (d*n)

```

Fatto ciò possiamo chiamare le nostre funzioni e vedere i risultati. La restante parte del codice non verrà mostrata perché si tratta solo di plot, il codice intero è comunque disponibile. Tutti i codici sopra sono pezzi



di un unico grande codice.



11.2 Applicazioni delle FFT

11.2.1 Derivate con FFT

Vediamo ora una comoda applicazione delle fft, ovvero il calcolo delle derivate. In linea di principio quanto stiamo qui per fare si può fare con ogni tipo di polinomio con il quale possiamo sviluppare una certa funzione, ad esempio Legendre o Chebyshev; questo è chiamato metodo dei punti di collocazione. In serie di Fourier la cosa è piuttosto semplice, grazie alla sue proprietà matematiche, una derivata nello spazio (o nel tempo) corrisponde ad una moltiplicazione per ik ($i\omega$) nello spazio degli impulsi (frequenze). Vediamo come:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 xi = 10          # estremo sinistro
5 xf = -xi         # estremo destro
6 N = 1000         # numero punti
7 dx = (xf-xi)/N # spaziatura punti
8
9 k = 2*np.pi*np.fft.fftfreq(N, dx) # vettore d'onda
10
11 #===== CASO TRANQUILLO =====
12 x = np.linspace(xi, xf, N)          # array posizioni
13 f = np.sin(x)*np.exp(-x**2/10)      # funzione di cui calcolare la derivata
14 g = np.cos(x)*np.exp(-x**2/10) - 2/10*x*f # derivata analitica
15
16 f_hat = np.fft.fft(f)             # trasformo con fourier

```

```

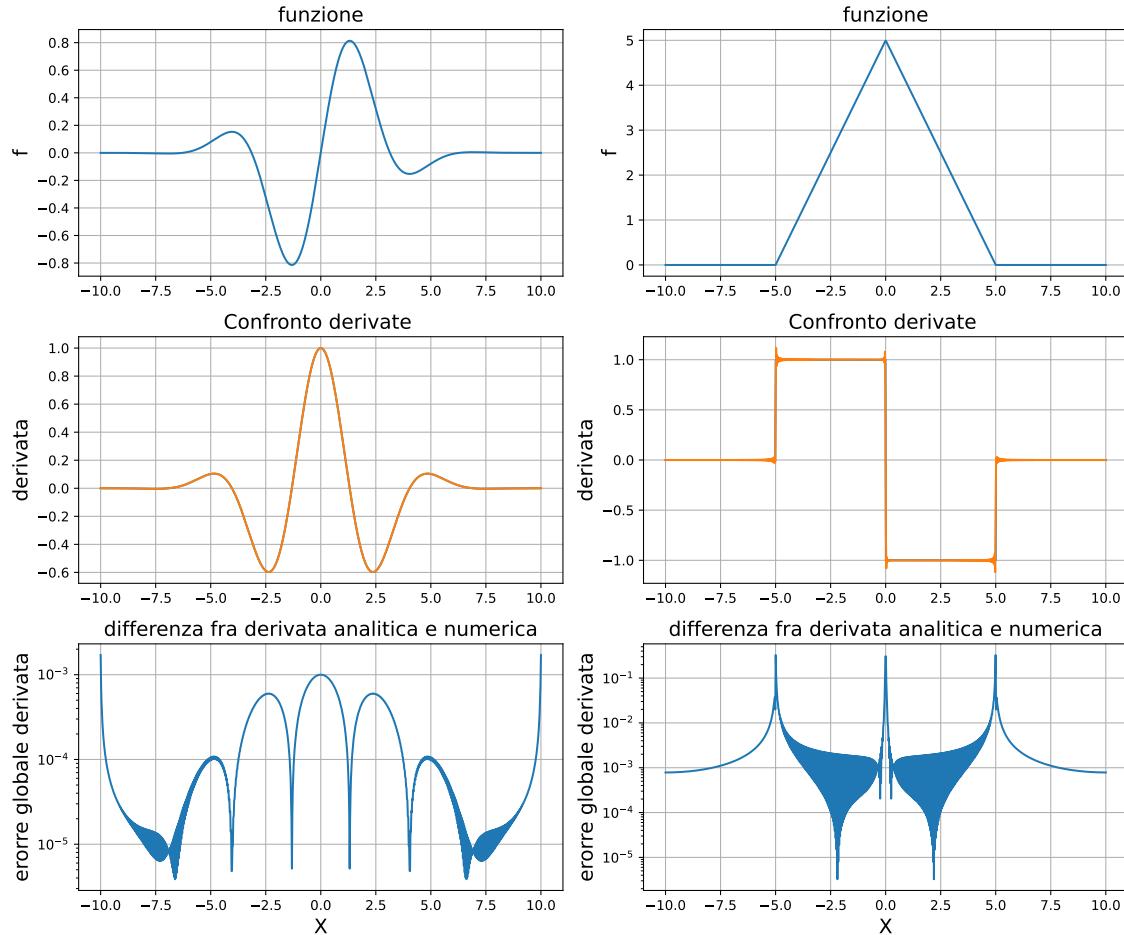
17 df_hat = 1j*k*f_hat      # moltiplico per l'impulso
18 df     = np.fft.ifft(df_hat) # derivata nello spazio
19
20 plt.figure(1)
21
22 plt.subplot(321)
23 plt.title('funzione', fontsize=15)
24 plt.ylabel('f', fontsize=15)
25 plt.plot(x, f)
26 plt.grid()
27
28 plt.subplot(323)
29 plt.title('Confronto derivate ', fontsize=15)
30 plt.ylabel('derivata', fontsize=15)
31 plt.plot(x, g)
32 plt.plot(x, df)
33 plt.grid()
34
35 plt.subplot(325)
36 plt.title('differenza fra derivata analitica e numerica', fontsize=15)
37 plt.ylabel('errore globale derivata', fontsize=15)
38 plt.xlabel("X", fontsize=15)
39 plt.plot(x, abs(g-df))
40 plt.yscale('log')
41 plt.grid()
42 #===== CASO MENO TRANQUILLO =====
43
44 def f():
45     '''funzione
46     '''
47     y = []
48     for xi in x:
49         if xi < -5 :
50             y.append(0)
51         if xi > -5 and xi < 0:
52             y.append(xi + 5)
53         if xi > 0 and xi < 5:
54             y.append(-xi + 5)
55         if xi > 5:
56             y.append(0)
57     return np.array(y)
58
59 def g():
60     ''' derivata analitica
61     '''
62     y = []
63     for xi in x:
64         if xi < -5 :
65             y.append(0)
66         if xi > -5 and xi < 0:
67             y.append(1)
68         if xi > 0 and xi < 5:
69             y.append(-1)
70         if xi > 5:
71             y.append(0)
72     return np.array(y)
73
74 f = f()
75 g = g()
76
77 f_hat = np.fft.fft(f)      # trasformo con fourier
78 df_hat = 1j*k*f_hat      # moltiplico per l'impulso
79 df     = np.fft.ifft(df_hat) # derivata nello spazio
80
81 plt.subplot(322)
82 plt.title('funzione', fontsize=15)
83 plt.ylabel('f', fontsize=15)
84 plt.plot(x, f)
85 plt.grid()
86
87 plt.subplot(324)
88 plt.title('Confronto derivate ', fontsize=15)
89 plt.ylabel('derivata', fontsize=15)
90 plt.plot(x, g)
91 plt.plot(x, df)
92 plt.grid()

```

```

93 plt.subplot(326)
94 plt.title('differenza fra derivata analitica e numerica', fontsize=15)
95 plt.ylabel('errore globale derivata', fontsize=15)
96 plt.xlabel("X", fontsize=15)
97 plt.plot(x, abs(g-df))
98 plt.yscale('log')
99 plt.grid()
100 plt.show()
101
102

```



Si vede facilmente come nel caso della funzione a tratti la questione sia più delicata, già ad occhio vediamo dei piccoli spike ai bordi dove la funzione cambia e la derivata ha un gradino, inoltre l'errore è maggiore.

11.2.2 Equazione di Burgers

Fare le derivate con le fft inoltre ci dà un'interessante prospettiva sulle PDE, infatti passando in trasformata, una PDE diventa una più tranquilla ODE, vediamo un semplice esempio. consideriamo l'equazione:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + u(t, x) \frac{\partial u(t, x)}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial x^2}, \quad (39)$$

nota come equazione di Burgers, un'equazione abbastanza usale in fluidodinamica che ad esempio modelizza la formazione di un fronte d'onda ad esempio gli shock. Non so se nei corsi di fluidodinamica si veda, vi basti sapere che, come quasi tutto, si parte da:

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho v) = 0 \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v^2 + P) = \nu \partial_x^2 v \end{cases} \quad (40)$$

Assumendo come equazione di stato una politropica ed espandendo la densità e la velocità in serie di perturbazioni [e.g. $v = v_0 + v_1 + \dots$, $\rho = \rho_0 + \rho_1 + \dots$, (in genere $v_0=0$)] si ottiene che ρ_1 soddisfa l'equazione di Burgers. È facile vedere che passando in trasformata nello spazio la nostra equazione diventa un'ode nel tempo:

$$\frac{\partial u(t, k)}{\partial t} + u(t, k)(iku(t, k)) = \nu(-k^2 u(t, k)) . \quad (41)$$

Qui usiamo "scipy.integrate.odeint" per risolvere l'equazione, in una delle appendici, anzi due a vol essere precisi, sono trattati degli algoritmi risolutivi. Vediamo le poche righe di codice necessarie:

```

1 """
2 code to solve burger equation using fourier trasform in space
3 """
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from scipy.integrate import odeint
7 import matplotlib.animation as animation
8
9 #=====
10 # Parameters
11 #=====
12
13 L = 1
14 T = 0.31
15
16 dx = 0.001
17 dt = 0.001
18 nu = 0.005
19
20 Nx = int(L/dx)
21 Nt = int(T/dt)
22
23 t = np.linspace(0, T, Nt)
24 x = np.linspace(0, L, Nx)
25
26 # wave number
27 k = 2*np.pi*np.fft.fftfreq(Nx, dx)
28 # Initial conditions
29 u0 = np.sin(2*np.pi*x)
30
31 #=====
32 # Solutions
33 #=====
34
35 def eq(u, t, k, nu):
36     """
37         equation to be solved in spatial transform
38     """
39     u_hat = np.fft.fft(u)
40     du_hat = 1j*k*u_hat      # first derivative
41     ddu_hat = -k**2*u_hat   # second derivative
42
43     #antitrasform
44     du = np.fft.ifft(du_hat)
45     ddu = np.fft.ifft(ddu_hat)
46
47     #pde in time and space -> ode in time
48     u_t = -u*du + nu*ddu
49
50     return u_t.real
51
52
53 sol = odeint(eq, u0, t, args=(k, nu,)).T
54
55
56 #=====
57 # Animations
58 #=====
59
60 fig = plt.figure(2)
61 plt.xlim(np.min(x), np.max(x))
62 plt.ylim(np.min(sol), np.max(sol))
63
64 line, = plt.plot([], [], 'b')
65 def animate(i):
66     line.set_data(x, sol[:,i])
67     return line,
68
69 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=Nt, interval=5, blit=True, repeat=True)
70
71 plt.grid()
72 plt.title('burger equation')
73 plt.xlabel('Distanza')
74 plt.ylabel('ampiezza')
```

```

75
76 #anim.save('buger.mp4', fps=30, extra_args=['-vcodec', 'libx264'])
77
78 plt.show()

```

Eseguendo il codice vedrete l'animazione del fronte d'onda crearsi e grazie al termine diffusivo se ne evita la rottura.

11.2.3 Equazione di Schrödinger

La scorsa lezione abbiamo visto come risolvere l'equazione di Schrödinger nel caso stazionario, ora vogliamo aggiungere il tempo e quindi vedere come una funzione d'onda evolve. L'equazione adesso diventa:

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi. \quad (42)$$

Assumiamo intanto che l'hamiltoniana non dipenda dal tempo (cfr. si conserva l'energia). Notiamo subito una cosa: chiaramente questa equazione è una PDE e modulo un'unità immaginaria è praticamente un'equazione diffusiva, tipo quella del calore. Si potrebbe quindi pensare di procedere allo stesso modo (proprio per l'equazione del calore è riportato un esempio in una delle appendici); c'è però un caveat: dato il suo significato di densità di probabilità è necessario che la psi sia normalizzata o per meglio dire e che la norma sia conservata durante l'evoluzione quindi il nostro algoritmo deve essere unitario. Sappiamo però per l'assunzione fatta precedentemente che la soluzione è:

$$\psi(t, x) = e^{-iHt}\psi(0, x). \quad (43)$$

Tutto molto tranquillo e tutto molto unitario, no? No chiaramente, H è una matrice, e il suo esponenziale (in paroloni mi pare si dicesse implementazione unitaria) è definito con la serie di potenze, che non vogliamo star qui a calcolare. Idea: sviluppiamo per piccoli tempi $e^{-iH\delta t} \simeq 1 - iH\delta t$ e applichiamo tutto ciò alla condizione iniziale $\psi(0, x)$. Sorge un nuovo problema: abbiamo perso l'unitarietà, il modulo quadro non si conserva. Quello che si può fare per risolvere è noto come split operator:

$$e^{iH\delta t/2}\psi(t + \delta t, x) = e^{-iH\delta t/2}\psi(t, x), \quad (44)$$

ovvero la funzione d'onda al tempo $t + \delta t$ evoluta indietro di $\delta t/2$ è uguale alla funzione d'onda al tempo t evoluta in avanti di $\delta t/2$. Quindi approssimando sempre l'esponenziale al prim'ordine si ha:

$$\psi(t + \delta t, x) = \frac{1 - iH\delta t/2}{1 + iH\delta t/2}\psi(t, x). \quad (45)$$

Mi perdonerete l'abuso di notazione, ovviamente dividere per $1 + iH\delta t/2$ vuol dire invertire la matrice, ovvero risolvere un sistema; scriviamo così solo per renderci conto del fatto che quel coefficiente è della forma: numero complesso diviso il suo coniugato, e per cui ha modulo uno, garantendo l'unitarietà dell'evoluzione. Si ok molto bello ma la trasformata di Fourier? Questo metodo può essere migliorato proprio grazie ad essa. Presa $H = T + V$, vale:

$$e^{-iH\delta t} = e^{-iV\delta t/2}e^{-iP\delta t}e^{-iV\delta t/2} + \mathcal{O}(\delta t^3). \quad (46)$$

Una cosa simile verrà usata nella prossima lezione quando parleremo brevemente degli integratori simplettici. Perché facciamo questa divisone? Questi tre termini sono più facili da calcolare? Noi vogliamo calcolare l'operatore di evoluzione temporale ma senza dover esponenziare una matrice (In termini di matrici T e V hanno la forma vista nella lezione precedente). Facendo così vediamo subito i termini dipendenti da V si calcolano veloci in quanto se la matrice è diagonale l'espansione in serie mi da gli esponenziali delle entrare. Quindi vorremo poter diagonalizzare anche T , quindi l'impulso. Ma per andare dalla base della posizione a quella dei momenti si esegue proprio una trasformata di Fourier. Quindi in quella base T sarà una matrice diagonale contenente i valori (al quadrato) che l'impulso può assumere (sempre nella nostra scatola di lato L in quanto abbiamo discretizzato, come sopra, lo spazio). La regola iterativa è dunque:

$$\psi(t + \delta t, x) = e^{-iV\delta t/2}\text{FFT}^{-1}(e^{-iP\delta t}\text{FFT}(e^{-iV\delta t/2}\psi(t, x))). \quad (47)$$

Vediamo ora quindi il codice:

```

1 """
2 Code for the solution of Schrodinger's time dependent equation
3 via split operator method but unlike tunnel_barrier.py using a FFT.
4 Now the idea is to use:
5 exp(1j (T+V) dt) = exp(1j V dt/2) exp(1j T dt) exp(1j V dt/2) + O(dt^3)
6 and to compute exp(1j T dt) we go in momentum space where T is diagonal
7 so it's easy to compute, so we must use FFT to go from x space to p space
8 """

```

```

9 import numpy as np
10 import matplotlib.pyplot as plt
11 import matplotlib.animation as animation
12
13 #=====
14 # Initial wave function ad potential
15 #=====
16
17 def U(x):
18     ''' harmonic potential
19     '''
20     return 0.5*x**2
21
22 def psi_inc(x, x0, a, k):
23     ''' Initial wave function
24     '''
25
26     A = 1. / np.sqrt( 2 * np.pi * a**2 ) # normalization
27     K1 = np.exp( - ( x - x0 )**2 / ( 2. * a**2 ) )
28     K2 = np.exp( 1j * k * x )
29     # let's multiply by five so the animation is prettier
30     return A * K1 * K2 * 5
31
32 #=====
33 # Computational parameters
34 #=====
35
36 n = 1000                      # Number of points
37 xr = 10                         # Right boundary
38 xl = -xr                        # Left boundary
39 L = xr - xl                     # Size of box
40 x = np.linspace(xl, xr, n)       # Grid on x axis
41 dx = np.diff(x)[0]               # Step size
42 dt = 1e-3                        # Time step
43 T = 10                           # Total time of simulation
44 ts = int(T/dt)                  # Number of step in time
45
46 # Initialization of gaussian wave packet
47 psi = psi_inc(x, -1.2, 0.5, 0.3)
48 PSI = []
49 PSI.append(abs(psi)**2)
50
51 #=====
52 # Build the propagator in x and k space
53 #=====
54
55 # Every possible value of momentum
56 k = 2*np.pi*np.fft.fftfreq(n, dx)
57 # Propagator
58 U_r = np.exp(-1j * U(x) * dt/2) # Half step in space
59 U_k = np.exp(-1j * k**2/2 * dt) # Full step in momentum
60
61 # Time evolution
62 for _ in range(ts):
63     psi = U_r * psi
64
65     psi_k = np.fft.fft(psi)
66     psi_k = U_k * psi_k
67
68     psi = np.fft.ifft(psi_k)
69     psi = U_r * psi
70
71 PSI.append(abs(psi)**2)
72
73 #=====
74 # Animation
75 #=====
76
77 fig = plt.figure()
78 plt.title("Gaussian packet propagation")
79 plt.plot(x, U(x), label='$V(x)$', color='black')
80 plt.grid()
81
82 plt.ylim(-0.0, np.max(PSI))
83 plt.xlim(-5, 5)
84
```

```

85 line, = plt.plot([], [], 'b', label=r"\$|\psi(x, t)|^2\$")
86
87 def animate(i):
88     line.set_data(x, PSI[i])
89     return line,
90
91 plt.legend(loc='best')
92
93 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=np.arange(0, ts, 10),
94                               interval=1, blit=True, repeat=True)
95
96 #anim.save('ho.mp4', fps=30, extra_args=['-vcodec', 'libx264'])
97
98 plt.show()

```

In questo caso abbiamo nuovamente usato un potenziale armonico e possiamo vedere l'oscillazione della funzione d'onda nel nostro potenziale. Adesso ho due domande per voi: se rendete il pacchetto gaussiano iniziale più stretto la simulazione non viene bene; perché? Provate inoltre a fare l'evoluzione nel tempo immaginario $it = \beta$ (capisco sia un tempo ma concedetemi di chiamarlo β); ora perdiamo l'unitarietà quindi ad ogni passo bisogna normalizzare la psi. Cosa succede al nostro sistema? come pensate che evolva?

11.2.4 Altre applicazioni

Anche se non le esponiamo è interessante dire come la fft sia molto utile anche nell'analisi dati. Ad esempio se voglia filtrare un segnale si tratterebbe di fare una convoluzione tra segnale di input e il vostro filtro, ma le convoluzioni nello spazio della trasformata sono semplici prodotti. O magari anche capire se vi è o meno una componente debole ad una data frequenza nel vostro segnale: prendete ad esempio il segnale con cui abbiamo fatto sopra i test; se gli aggiungete del rumore, la componente a 40 Hz nello spettro magari non si vede. Ma se il segnale è a media zero vedrete che vi è un picco in negativo molto importante a frequenza nulla nella trasformata; perciò vi basta moltiplicare tutto il segnale per, un seno ad esempio, alla stessa frequenza della componente che cercate; ciò creerà un battimento e una delle due omega sarà nulla. Per cui nella FFT il profondo picco negativo sarà notevolmente ridotto, e ciò vi fa quindi capire la presenza di quell'armonica. Non so quanto sono stato chiaro, magari più il là fornirò degli esempi di codice. Intanto magari potete provare a scriverli da voi.

12 Terza Lezione A

12.1 Programmazione a oggetti: problema N-body

Python è un linguaggio che permette la programmazione ad oggetti. Molto di Python stesso è scritto con programmazione orientata ad oggetti. Lo scopo è quello di illustrare un semplice esempio di utilizzo creando una piccola simulazione ad N corpi. Per programmare ad oggetti si utilizza quelle che sono chiamate classi; fondamentalmente creare una classe vuol dire definire un oggetto. All'interno della classe è possibile definire delle funzioni che verranno chiamati metodi. Alcuni metodi sono particolari e sono contrassegnati da doppi underscore, e.g: ”`__init__`”, ”`__iter__`”, ”`__next__`”, ”`__call__`”; qui ci limiteremo al primo, in quanto necessario, e l'ultimo poiché può essere utile. I due nel mezzo permettono di costruire un ”iterabile”, parola che non dovrebbe esservi nuova; così come l'ultimo permette di costruire un oggetto ”chiamabile” (”callable” anche questo non dovrebbe sembrarvi nuovo). Cominciamo quindi, nell'ottica della nostra simulazione a N corpi, a definire la nostra classe che ci permetterà di costruire i protagonisti della nostra simulazione (ci limiteremo per semplicità a vincolare la dinamica su un piano):

```
1 import numpy as np
2 import random as rn
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 from matplotlib import animation
5
6 class Body:
7     """
8         Classe che rappresenta una pallina
9         intesa come oggetto puntiforme
10    """
11
12     def __init__(self, x, y, vx, vy, m=1):
13         """
14             costruttore della classe, verra' chiamato
15             quando creeremo l'istanza della classe, (i.e. b=Body()
16             b e' chiamata istanza).
17             In input prende la posizione, la velocita' e massa
18             che sono le quantita' che identificano il corpo
19             che saranno gli attributi della classe;
20             il costruttore e' un particolare metodo della
21             classe per questo si utilizzano gli underscore.
22             il primo parametro che passiamo (self) rappresenta
23             l'istanza della classe (self e' un nome di default)
24             questo perche' la classe e' un modello generico che
25             deve valere per ogni corpo.
26         """
27         #posizione
28         self.x = x
29         self.y = y
30         #velocita'
31         self.vx = vx
32         self.vy = vy
33         #massa
34         self.m = m
35
36         #aggiornamento posizione e velocita' con eulero
37     def n_vel(self, fx, fy, dt):
38         """
39             ad ogni metodo della classe viene passato
40             come primo argomento self , quindi l ' istanza
41             date le componenti della forza e il passo temporale
42             aggiorno le componenti della velocita'
43         """
44         self.vx += fx*dt
45         self.vy += fy*dt
46
47     def n_pos(self, dt):
48         """
49             dato il passo temporale aggiorno le posizioni
50         """
51         self.x += self.vx*dt
52         self.y += self.vy*dt
```

Non è propriamente necessario usare i metodi per cambiare gli attributi di una classe, si possono utilizzare cose quali le property e i setter, ma non ce ne cureremo. Dunque ora abbiamo qualcosa che ci permette di creare i nostri oggetti, ognuno con caratteristiche (valori degli attributi) diversi. Abbiamo poi due metodi che ci permettono di aggiornare le quantità fisiche e dare una dinamica a tutti i nostri corpi. Vediamo ora, sempre

grazie ad un'altra classe come implementare la nostra simulazione. Useremo per evitare divergenze in caso di incontri ravvicinati (del terzo tipo) quella che è la tecnica del softening, cioè il potenziale kepleriano sarà:

$$V(r) = -\frac{1}{\sqrt{r^2 + \epsilon}} \quad (48)$$

con ϵ chiamato appunto parametro di softening. Così anche se i pianeti sono molto vicini la forza tra essi non diverge. Se vogliamo simulare una normale orbita possiamo sempre settare a zero questo parametro.

```

1 class Sistema:
2     """
3         Classe per evoluzione del sistema.
4         Viene utilizzata la tecnica del softening per impedire
5         divergenze nella foza, sp e' il parametro di softening
6
7     Parameters
8     -----
9     corpi : list
10        lista di oggetti della classe Body
11    G : float
12        Costante di gravitazione universale (=1)
13    sp : float, optional, default 0
14        parametro di softening
15    ...
16
17    def __init__(self, corpi, G, sp=0):
18        self.corpi = corpi
19        self.G = G
20        self.sp = sp
21
22    def evolvo(self, dt):
23        """
24            chiamata ad ogni passo temporale, fa evolvere il sistema
25            solo di uno step dt, la forza e' calcolata secondo la
26            legge di gravitazione universale;
27        ...
28
29        for corpo_1 in self.corpi:
30
31            fx = 0.0
32            fy = 0.0
33
34            for corpo_2 in self.corpi:
35                if corpo_1 != corpo_2:
36
37                    dx = corpo_2.x - corpo_1.x
38                    dy = corpo_2.y - corpo_1.y
39
40                    d = np.sqrt(dx**2 + dy**2 + self.sp)
41
42                    fx += self.G * corpo_2.m * dx / d**3
43                    fy += self.G * corpo_2.m * dy / d**3
44
45                    corpo_1.n_vel(fx, fy, dt)
46
47                for corpo in self.corpi:
48                    corpo.n_pos(dt)

```

Fondamentalmente la nostra classe ci permette quindi di integrare le varie equazioni del moto. Importante notare il metodo con cui esse sono integrate: aggiorniamo prima tutte le velocità e poi tutte le posizioni. Questo è chiamato metodo di eulero simplettico. Ora mostriamo la parte conclusiva del codice per avviare la nostra simulazione:

```

1 #=====
2 # Creating bodies and the system and computational parameters
3 #=====
4
5 rn.seed(69420)
6 dt = 1/20000
7 T = int(2/dt)
8 E = np.zeros(T)
9 L = np.zeros(T)
10 G = 1
11
12 # Number of body, must be even
13 N = 10

```

```

14 C = []
15 for n in range(N//2):
16     '',
17     two bodies are created at a time
18     with equal and opposite velocity
19     to keep the total momentum of the system zero
20     '',
21     v_x = rn.uniform(-0.5, 0.5)
22     v_y = rn.uniform(-0.5, 0.5)
23     C.append(Body(rn.uniform(-0.5, 0.5), rn.uniform(-0.5, 0.5), v_x, v_y))
24     C.append(Body(rn.uniform(-0.5, 0.5), rn.uniform(-0.5, 0.5), -v_x, -v_y))
25
26
27 X = np.zeros((2, T, N)) # 2 because the motion is on a plane
28
29 # Creation of the system
30 soft = 0.01
31 sist = System(C, G, soft)
32
33 =====
34 # Evolution
35 =====
36
37 start = time.time()
38
39 for t in range(T):
40     sist.update(dt)
41     for n, body in enumerate(sist.bodies):
42         X[:, t, n] = body.x, body.y
43
44 print("--- %s seconds ---" % (time.time() - start))
45
46 =====
47 # Plot and animation
48 =====
49
50 fig = plt.figure(0)
51 plt.grid()
52 plt.xlim(np.min(X[::2, :])-0.5, np.max(X[::2, :])+0.5)
53 plt.ylim(np.min(X[1::2,:])-0.5, np.max(X[1::2,:])+0.5)
54 colors = ['b']*N#plt.cm.jet(np.linspace(0, 1, N))
55
56 dot = np.array([]) # for the planet
57
58 for c in colors:
59     dot = np.append(dot, plt.plot([], [], 'o', c=c))
60
61 def animate(i):
62
63     for k in range(N):
64
65         dot[k].set_data(X[0, i, k], X[1, i, k])
66
67     return dot
68
69 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=np.arange(0, T, 50), interval=1, blit=True,
70 , repeat=True)
71
72 plt.title('N body problem', fontsize=20)
73 plt.xlabel('X(t)', fontsize=20)
74 plt.ylabel('Y(t)', fontsize=20)
75
76 # Uncomment to save the animation, extra_args for .mp4
77 #anim.save('N_body.gif', fps=50)# extra_args=['-vcodec', 'libx264'])
78
79 plt.show()

```

Oltre ad n palline a caso, creiamo anche un sistema, un pianeta che orbita intorno a due stelle:

```

1 # creation of body
2 C1 = Body(0.5, 0, 0, 20, int(1e3))
3 C2 = Body(-0.5, 0, 0, -20, int(1e3))
4 C3 = Body(-1.5, 0, 0, 40, int(1e1))
5 C = [C1, C2, C3]
6 N = len(C)

```

Ora in linea di principio la simulazione finisce qui. Tuttavia risulta interessante calcolare l'energia e il momento angolare del nostro sistema e vedere se esse, come ci si aspetteremmo, sono effettivamente conservate durante l'evoluzione del sistema. Mostreremo i risultati ma senza mostrare il codice che comunque trovate disponibile. Tra l'altro questa analisi la vogliamo fare mostrando soltanto il caso di tre corpi che si orbitano attorno in quanto nei due casi che mostreremo (due integratori diversi) le differenze sono apprezzabili. Usando N corpi creati a caso la conservazione dell'energia non si manifesta mai, a differenza, e vedremo perché, della conservazione del momento angolare. Per quanto riguarda la conservazione dell'energia probabilmente ciò è dovuto al fatto che, quelle scelte, non sono delle buone condizioni iniziali: in genere l'inizializzazione è affrontata in maniera più delicata (a noi interessava solo vedere l'animazione carina). Da qui e dal tipo di integratore usato, che abbiamo citato prima nasce tutta un'interessante discussione sulla meccanica classica, che brevemente vogliamo trattare.

12.2 Breve compendio di meccanica Hamiltoniana

Allora come prima cosa diamo un paio di definizioni, cercando comunque di non essere troppo matematici (non dimostriamo nulla qui, lasciamo tutto all'eventuale curiosità dell'eventuale lettore):

Consideriamo inizialmente una 2-forma ω differenziale su una varietà liscia M . La 2-forma ω è chiamata simplettica se è chiusa e non degenere. Chiusa significa che la sua derivata esterna è nulla $d\omega = 0$; non vogliamo perdere tempo a spiegare cosa sia la derivata esterna, ma la potete vedere come una derivata che sia antisimmetrica (cfr. tensore elettromagnetico: dato A potenziale vettore $dA = \partial_i A_j - \partial_j A_i = F_{ij}$). Non degenere significa invece che, per ogni punto $p \in M$, considerando lo spazio tangente al punto $T_p M$ (che è uno spazio vettoriale), si ha che per ogni vettore x non nullo su questo spazio esiste un vettore y tale che: $\omega(x, y) = 0$ solo per $y = 0$. Dunque la coppia (M, ω) è una varietà simplettica.

Consideriamo ora una funzione liscia $H : M \rightarrow \mathbb{R}$ su una varietà simplettica (M, ω) . Abbiamo allora che il campo vettoriale X_H definito da $\omega(X_H, Y) = dH(Y)$ è chiamato campo vettoriale hamiltoniano generato da H . La terna (M, ω, H) definisce un sistema hamiltoniano.

Inoltre è importante menzionare il seguente teorema: Sia (M, ω, H) un sistema hamiltoniano e sia $\Phi : \mathbb{R} \times M \rightarrow M$ il flusso generato dal campo vettoriale X_H . Allora $\forall t \in \mathbb{R} \Phi_t$ è simplettico. Questo significa che il flusso non solo preserva la struttura simplettica, in particolare esso preserva la forma volume, il che vuol dire che preserva il volume dello spazio delle fasi. Inoltre il flusso esatto della nostra hamiltoniana è reversibile $\Phi_t^{-1} = \Phi_{-t}$

Detto ciò vediamo di concretizzare un po'; supponiamo di avere una hamiltoniana della forma:

$$H(p, q) = T(p) + V(q) . \quad (49)$$

Se definiamo $x = (p, q)$ l'insieme di tutte le nostre variabili allora sappiamo che l'equazione del moto sono date dalla parentesi di poisson:

$$\dot{x} = X_H = \{x, H(x)\} , \quad (50)$$

la cui soluzione è:

$$x(\tau) = e^{\tau X_H} x(0) . \quad (51)$$

Abbiamo detto che vogliamo dunque integrare le nostre equazioni del moto. Assumiamo che dato un certo n esistano certi coefficienti c_1, \dots, c_k e d_1, \dots, d_k tale che:

$$e^{\tau X_H} = e^{\tau(X_T + X_V)} = \prod_{i=1}^k e^{\tau c_i X_T} e^{\tau d_i X_V} + \mathcal{O}(\tau^{n+1}) , \quad (52)$$

dove i c_i e d_i devono rispettare certi vincoli a seconda del valore di n , e a seconda del quale inoltre si ottengono diversi algoritmi: per $n = 1$ abbiamo eluero simplettico (quello implementato sopra) mentre per $n = 2$ abbiamo il leapfrog. Non ci metremo ora a calcolare questi coefficienti. Inoltre si dimostra, ma noi non lo facciamo, che trovare i c_i e d_i che soddisfano la (52) è equivalente a trovare dei coefficienti c_i e d_i tali che:

$$\Phi_\tau = \prod_{i=1}^k e^{\tau c_i X_T} e^{\tau d_i X_V} = e^{\tau(X_T + X_V) + \mathcal{O}(\tau^{n+1})} . \quad (53)$$

É inoltre interessante notare che se consideriamo l'integratore di eulero: $\Phi_h = e^{hX_T} e^{hX_V}$ esso è soluzione esatta di un altro sistema hamiltoniano scritto come perturbazioni di H , che non è detto abbia le stesse simmetrie dell'hamiltoniana di partenza:

$$\bar{H} = H + hH_2 + h^2H_3 + \dots \quad (54)$$

dove gli H_i si calcolano tramite parentesi di poisson espandendo in serie con la formula di Baker-Campbell-Hausdorff (BCH):

$$\begin{aligned}\overline{X_H} &= \frac{1}{h} \ln(e^{hX_T} e^{hX_V}) \\ &= \underbrace{X_T + X_V}_{H_1} + h \underbrace{\frac{1}{2}[X_T, X_V]}_{H_2} + h^2 \underbrace{\frac{1}{12}([[X_T, X_V], X_V] + [[X_V, X_T], X_T])}_{H_3} .\end{aligned}\quad (55)$$

Più in generale per un integratore della forma: $\Phi_h = \prod_{i=1}^k e^{hc_i X_T} e^{hd_i X_V}$ esso è soluzione di:

$$\overline{H} = H + h^n H_{n+1} + \mathcal{O}(h^{n+1}) , \quad (56)$$

dove ora i vari H_i saranno diversi ma il modo di calcolarli è sempre lo stesso. Tornando a noi è stato implementato per fare un confronto anche un medoto simplettico del 4 ordine noto con il nome di Yoshida; scrivendo in coordinate lagrangiane la regola iterativa è:

$$v_{i+1} = v_i + d_i a(x_i) dt \quad (57)$$

$$x_{i+1} = x_i + c_i v_{i+1} dt \quad (58)$$

dove i coefficienti valgono:

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})} \quad c_2 = c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad (59)$$

$$d_1 = d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_2 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_4 = 0. \quad (60)$$

Ultima cosa da far notare, ma molto interessante è che ogni integratore simplettico conserva il momento angolare, o più in generale è conservato qualsiasi generatore di trasformazioni puntuali lineari che sia una simmetria di H (e.g. rotazioni, dilatazioni, traslazioni). Per trasformazioni del tipo:

$$q_i \rightarrow q_i + \epsilon A_i(q) = q_i + \epsilon(\Omega_{ij} q_j + n_i), \quad (61)$$

$$p_i \rightarrow p_i - \epsilon \Omega_{ij} p_j , \quad (62)$$

dove Ω è una matrice $N \times N$ e n è un vettore di coefficienti costanti. L'invarianza di H si scrive come:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i = \epsilon \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} n_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \Omega_{ij} q_j - \frac{\partial H}{\partial p_i} \Omega_{ij} p_j \right) = 0 . \quad (63)$$

Potete divertirvi a sostituire l'espressione data per le nuove coordinate date dall'integratore e far vedere che il generatore $G(p, q) = A_i p_i = \Omega_{ij} p_i q_j + n_i p_i$ è conservato.

Un modo magari più familiare per vedere tutto quel che abbiamo detto è quello dell'utilizzo delle trasformazioni canoniche.

Ricordiamo intanto che: $Q(q, p, t)$ e $P(q, p, t)$ sono trasformazioni canoniche se per una qualsiasi hamiltoniana $H(q, p, t)$ si può trovare un'hamiltoniana $K(Q, P, t)$ tale per cui le equazioni del moto per p e q data da H , si trasformano in quelle date da K in termini di Q e P .

In termini di x , definito sopra, abbiamo che:

$$\dot{x} = \Gamma \frac{\partial H}{\partial x} \quad \text{con} \quad \Gamma = \begin{pmatrix} 0 & -\text{Id}_{N \times N} \\ \text{Id}_{N \times N} & 0 \end{pmatrix} \quad (64)$$

Facciamo ora una trasformazione $X(x)$ (si generalizza a anche a trasformazioni dipendenti dal tempo). Abbiamo quindi che:

$$\dot{X}_i = \frac{\partial X_i}{\partial x_j} \dot{x}_j = \frac{\partial X_i}{\partial x_j} \Gamma_{jl} \frac{\partial H}{\partial x_l} = \frac{\partial X_i}{\partial x_j} \Gamma_{jl} \frac{\partial H}{\partial X_k} \frac{\partial X_k}{\partial x_l} = J_{ij} \Gamma_{jl} J_{lk}^T \frac{\partial H}{\partial X_k} = (J \Gamma J^T)_{ik} \frac{\partial H}{\partial X_k} \quad (65)$$

Per cui si arriva a:

$$J \Gamma J^T = \Gamma, \quad (66)$$

equazione che, in termini di matrici, definisce il gruppo simplettico. Diciamo questo perché tra simpletticità e canonicità c'è un legame stretto: $X(x, t)$ è canonica se la sua matrice jacobiana è simplettica a tutti i tempi a meno di una costante cioè: $J \Gamma J^T = \alpha \Gamma$. Inoltre se abbiamo che:

$$\{A, B\}_x = \{A, B\}_X, \quad (67)$$

la nostra trasformazione è simplettica. Ma sappiamo anche che verificare le parentesi di Poisson ci dà la canonicità della trasformazione:

$$X_i = \{X_i, H\}_x = \{X_i, H\}_X = \Gamma_{ij} \frac{\partial H}{\partial X_j} \quad (68)$$

Facciamo quindi un esempio semplice per far vedere come il metodo di Eulero non sia simplettico ma quello da noi implementato sopra lo sia. Per semplicità consentitemi di considerare (piuttosto che N corpi) la seguente:

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{q}. \quad (69)$$

Il metodo di Eulero prevede:

$$p(t + \delta t) = p(t) - \delta t \frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial q} \quad (70)$$

$$q(t + \delta t) = q(t) + \delta t \frac{\partial H(q(t), p(t))}{\partial p} \quad (71)$$

Nel nostro caso abbiamo:

$$p(t + \delta t) = p(t) - \delta t \frac{1}{q^2(t)} \quad (72)$$

$$q(t + \delta t) = q(t) + \delta t p(t) \quad (73)$$

Per verificare la canonicità va dunque calcolata la:

$$\begin{aligned} \{q(t + \delta t), p(t + \delta t)\} &= \{q(t), p(t)\} - \delta t \{q(t), q^{-2}(t)\} + \delta t \{p(t), p(t)\} - \delta t^2 \{p(t), q^{-2}(t)\} \\ &= 1 - \delta t^2 2q^{-3}(t). \end{aligned} \quad (74)$$

Vediamo dunque che la trasformazione non è canonica a tutti gli ordini in δt . Il metodo di Eulero simplettico invece ci dice:

$$p(t + \delta t) = p(t) - \delta t \frac{\partial H(q(t), p(t + \delta t))}{\partial q} \quad (75)$$

$$q(t + \delta t) = q(t) + \delta t \frac{\partial H(q(t), p(t + \delta t))}{\partial p} \quad (76)$$

Che nel nostro caso diventa:

$$p(t + \delta t) = p(t) - \delta t \frac{1}{q^2(t)} \quad (77)$$

$$q(t + \delta t) = q(t) + \delta t p(t + \delta t) = q(t) + \delta t p(t) - \delta t^2 \frac{1}{q^2(t)} \quad (78)$$

Per cui abbiamo:

$$\begin{aligned} \{q(t + \delta t), p(t + \delta t)\} &= \{q(t), p(t)\} - \\ &\quad - \delta t (\{q(t), q^{-2}(t)\} - \{p(t), p(t)\}) - \\ &\quad - \delta t^2 (\{p(t), q^{-2}(t)\} + \{q^{-2}(t), p(t)\} - \{q^{-2}(t), q^{-2}(t)\}) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (79)$$

Si vede bene dunque che la trasformazione è canonica per ogni δt ; dato che il termine che prima rompeva la canonicità ora si cancella con un altro termine, mentre gli altri sono tranquillamente nulli. Potete se volete verificare che Eulero simplettico è dato dalla seguente funzione generatrice:

$$F_2(q(t), p(t + \delta t)) = q(t)p(t + \delta t) + \delta t H(q(t), p(t + \delta t)). \quad (80)$$

Il problema di questo metodo è però che non è reversibile. Si può però combinare con la variante in cui si usa $q(t + \delta t)$ per aggiornare $p(t)$, dando così vita ad un metodo del secondo ordine che è il leapfrog citato prima. Il quale è reversibile. Vediamo ora i risultati, dal punto di vista delle conservazioni, di due integratori (Eulero simplettico e Yoshida del quarto ordine):

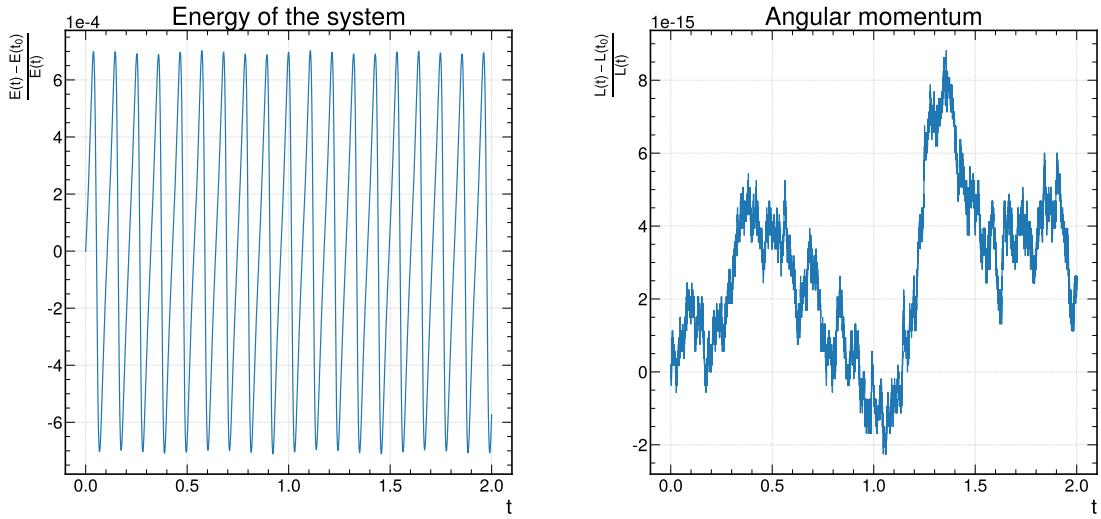


Figura 5: Conservazione di energia e momento angolare con l'integratore di Eulero simplettico.

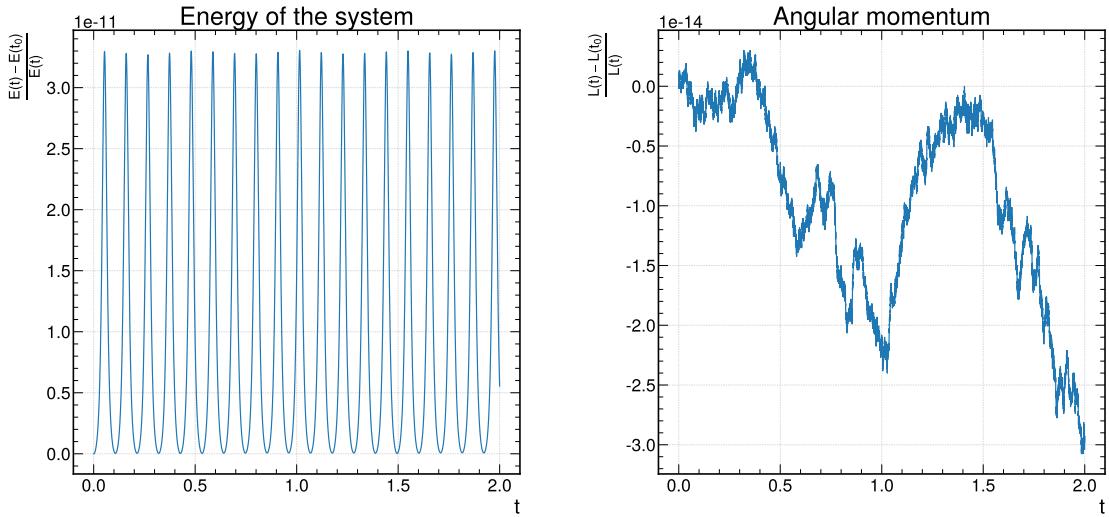


Figura 6: Conservazione di energia e momento angolare con l'integratore di Yoshida del quarto ordine.

Vediamo dunque come la conservazione dell'energia sia molto migliore nel caso di un integratore di ordine superiore, mentre la variazione di momento angolare è sempre dello stesso ordine circa. Avrete notato che lo stile dei plot è leggermente diverso, questo è dovuto al fatto che, per ottenere una migliore leggibilità, si è usato:

```
1 import mplhep
2 plt.style.use(mplhep.style.CMS)
```

Ok che è pallettarlo ma onore al merito.

12.3 Più che una funzione

Le classi sono molto utili perché ci permettono di poter fare più cose che una funzione, ma possono anche essere chiamate come una funzione; ad esempio grazie al metodo ”`__call__`” l’istanza che creiamo sarà una funzione. In una delle appendici è presente un codice che esegue un’interpolazione lineare; se andiamo a vederlo e ci fermiamo un attimo a pensare notiamo subito che quella funzione ogni volta che viene chiamata rifà tutto il conto necessario per trovare i coefficienti del polinomio in tutto l’intervallo. Con l’utilizzo di una classe possiamo calcolarci nel costruttore i coefficienti del polinomio e poi chiamare la funzione creata, la quale sa già i coefficienti del polinomio e quindi sarà effettivamente più veloce. Vediamo il caso, un po’ più complicato ma più interessante, di una spline cubica (anche se a mali estremi un’interpolazione lineare funziona sempre, ordini più alti possono dare problemi):

```

1 class CubicSpline:
2     ''
3     1-D interpolating natural cubic spline
4
5     Parameters
6     -----
7     xx : 1darray
8         value on x must be strictly increasing
9     yy : 1darray
10        value on y
11
12     Example
13     -----
14     >>>import numpy as np
15     >>>import matplotlib.pyplot as plt
16     >>>x = np.linspace(0, 1, 10)
17     >>>y = np.sin(2*np.pi*x)
18     >>>F = CubicSpline(x, y)
19     >>>print(F(0.2))
20     0.9508316728694627
21
22     >>>z = np.linspace(0, 1, 100)
23     >>>plt.figure(1)
24     >>>plt.title('Spline interpolation')
25     >>>plt.xlabel('x')
26     >>>plt.ylabel('y')
27     >>>plt.plot(z, F(z), 'b', label='Cubic')
28     >>>plt.plot(x, y, marker='.', linestyle='', c='k', label='data')
29     >>>plt.legend(loc='best')
30     >>>plt.grid()
31     >>>plt.show()
32     ''
33
34     def __init__(self, xx, yy):
35
36         self.x = xx                      # x data
37         self.y = yy                      # y data will be the constant of polynomial
38         self.N = len(xx)                 # len of data
39         alpha = np.zeros(self.N-1)        # auxiliyar array
40         self.b = np.zeros(self.N-1)        # linear term
41         self.c = np.zeros(self.N)          # quadratic term
42         self.d = np.zeros(self.N-1)        # cubic term
43         l = np.zeros(self.N)             # auxiliyar array
44         z = np.zeros(self.N)             # auxiliyar array
45         mu = np.zeros(self.N)            # auxiliyar array
46
47         if not np.all(np.diff(xx) > 0.0):
48             raise ValueError('x must be strictly increasing')
49
50         dx = xx[1:] - xx[:-1]
51         a = yy
52
53         for i in range(1, self.N-1):
54             alpha[i] = 3*(a[i+1] - a[i])/dx[i] - 3*(a[i] - a[i-1])/dx[i-1]
55
56         l[0] = 1.0
57         z[0] = 0.0
58         mu[0] = 0.0
59
60         for i in range(1, self.N-1):
61             l[i] = 2.0*(xx[i+1] - xx[i-1]) - dx[i-1]*mu[i-1]
62             mu[i] = dx[i]/l[i]
63             z[i] = (alpha[i] - dx[i-1]*z[i-1])/l[i]
64
65         l[self.N-1] = 1.0
66         z[self.N-1] = 0.0
67         self.c[self.N-1] = 0.0
68
69         #Coefficient's computation
70         for i in range(self.N-2, -1, -1):
71
72             self.c[i] = z[i] - mu[i]*self.c[i+1]
73             self.b[i] = (a[i+1] - a[i])/dx[i] - dx[i]*(self.c[i+1] + 2.0*self.c[i])/3.0
74             self.d[i] = (self.c[i+1] - self.c[i])/(3.0*dx[i])
75
76

```

```

77 def __call__(self, x):
78     """
79     x : float or 1darray
80         when we want compute the function
81     """
82     n = self.check(x)
83
84     if n == 1 :
85
86         for j in range(self.N-1):
87             if self.x[j] <= x <= self.x[j+1]:
88                 i = j
89                 break
90
91         q = (x - self.x[i])
92         return self.d[j]*q**3.0 + self.c[j]*q**2.0 + self.b[j]*q + self.y[j]
93
94     else:
95         F = np.zeros(n)
96         for k, x1 in enumerate(x):
97
98             for j in range(len(self.x)-1):
99                 if self.x[j] <= x1 <= self.x[j+1]:
100                     i = j
101                     break
102
103             q = (x1 - self.x[i])
104             F[k] = self.d[j]*q**3.0 + self.c[j]*q**2.0 + self.b[j]*q + self.y[j]
105
106         return F
107
108
109     def check(self, x):
110         try :
111             n = len(x)
112             x_in = np.min(self.x) <= np.min(x) and np.max(self.x) >= np.max(x)
113         except TypeError:
114             n = 1
115             x_in = np.min(self.x) <= x <= np.max(self.x)
116
117         # if the value is not in the correct range it is impossible to count
118         if not x_in :
119             errore = 'Value out of range'
120             raise Exception(errore)
121
122         return n
123 if __name__ == '__main__':
124
125     x = np.linspace(0, 1, 10)
126     y = np.sin(2*np.pi*x)
127
128     z = np.linspace(0, 1, 1000)
129     G = CubicSpline(x, y)
130
131     print(G(0.2))
132
133     plt.figure(1)
134     plt.title('Spline interpolation')
135     plt.xlabel('x')
136     plt.ylabel('y')
137     plt.plot(z, G(z), 'r', label='Cubic')
138     plt.plot(x, y, marker='.', linestyle=' ', c='k', label='data')
139     plt.legend(loc='best')
140     plt.grid()
141     plt.show()
142
143
144 ##### Cfr scipy and our spline #####
145
146
147
148     from scipy.interpolate import InterpolatedUnivariateSpline
149     s3 = InterpolatedUnivariateSpline(x, y, k=3)
150     plt.figure(2)
151     plt.subplot(211)
152     plt.title("Spline interpolation N = 10", fontsize=15);

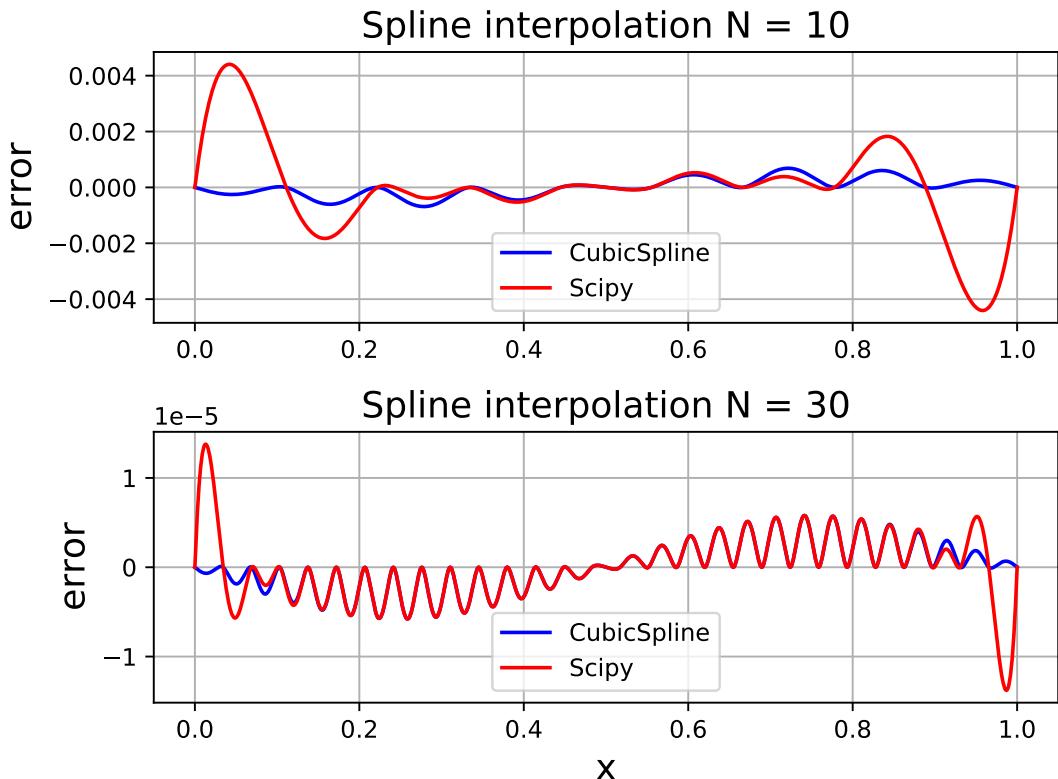
```

```

153 plt.ylabel("error", fontsize=15)
154 plt.plot(z, G(z)-np.sin(2*np.pi*z), 'b', label='CubicSpline');
155 plt.plot(z, s3(z)-np.sin(2*np.pi*z), 'r', label='Scipy');
156 plt.grid();plt.legend(loc='best');
157 plt.subplot(212);
158 plt.title("Spline interpolation N = 30", fontsize=15)
159
160 x = np.linspace(0, 1, 30)
161 y = np.sin(2*np.pi*x)
162 G = CubicSpline(x, y)
163 s3 = InterpolatedUnivariateSpline(x, y, k=3)
164
165 plt.ylabel("error", fontsize=15)
166 plt.xlabel('x', fontsize=15)
167 plt.plot(z, G(z)-np.sin(2*np.pi*z), 'b', label='CubicSpline');
168 plt.plot(z, s3(z)-np.sin(2*np.pi*z), 'r', label='Scipy');
169 plt.grid();plt.legend(loc='best')
170 plt.show()
171
172 [Output]
173 0.9508316728694627

```

Fondamentalmente che succede: noi creiamo G , istanza della classe `CubicSpline`, nel farlo chiamiamo il costruttore il quale calcola i coefficienti dei polinomi interpolanti. Ora però grazie al metodo `__call__` G è un oggetto chiamabile. Avete presente quando in altri codici passando funzioni ad altre funzioni nella documentazione scrivevamo `callable`? Ecco è proprio questo, è come se la vostra funzione fosse il metodo `__call__` della classe. Quindi chiamando l'istanza viene eseguito il metodo `__call__` il quale, nel nostro caso, sa già i dati necessari e sa calcolarci la spline. Giusto per completezza precisiamo che questa spline cubica non è esattamente la stessa spline cubica di `scipy` che abbiamo visto sopra; questa si chiama spline naturale e ai bordi si comporta un po' diversamente rispetto a `scipy` (meglio anche). Per vederlo calcoliamo la differenza fra l'interpolazione calcolata in z (l'array nel codice) e i valori che restituisce `"np.sin(2*np.pi*z)"`; Facciamo due casi, interpoliamo prima 10 e poi 30 punti. Il codice sopra mostrato è riportato nella cartella `interpolazioni`, benché mostrato in questa sezione. Inoltre è riportato la stessa implementazione per il caso lineare.



13 Quarta Lezione A

13.1 Reti neurali

Essendo il computer molto stupido a qualcuno è venuta la brillante idea di cercare di educarlo, tanto per divertirsi un po'. Cominciamo quindi questa *descensio ad inferos* di cui al più faremo i primi gradini. Vogliamo infatti costruire un semplice esempio di rete neurale, che serva a classificare dei dati. Quello che vogliamo fare è costruire una scatola nera che prenda in input un certo set di dati a cui corrisponde un certo label, e la nostra scatola nera deve imparare a capire qual è il label a seconda di varie caratteristiche presenti nei dati in input. Metaforicamente potremmo dire che "allenare" una rete neurale è come fare esercizi guardando le soluzioni finché non diventi bravo e impari a farli da solo. Si tratta quindi di apprendimento supervisionato. Vediamo uno schema di una rete neurale e cerchiamo di capire cosa succede.

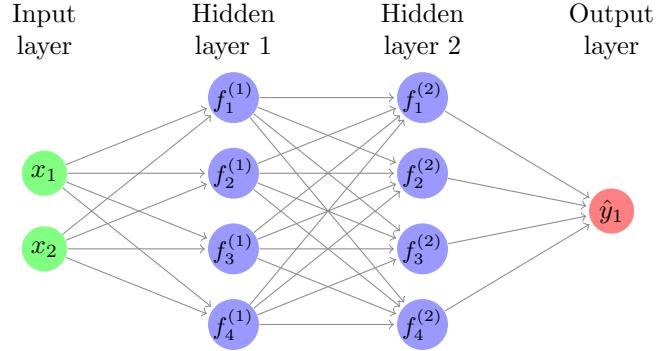


Figura 7: Schema di una rete neurale per una classificazione binaria, eventualmente il layer di output può avere due neuroni in caso di one-hot-encoding

Questo è un piccolo esempio della struttura di una rete neurale. Essa è suddivisa in layer e ogni layer contiene un certo numero di neuroni (i pallini). Il layer di input è quello a cui noi passiamo i dati, mentre il layer di output è quello che ci restituisce il risultato; è negli hidden layer che avviene la magia. Supponiamo di avere dei dati del tipo:

x_1	x_2	y
0.34	0.56	1
0.5	0.89	1
0.2	0.7	0
0.52	0.1	1
0.9	0.83	0
\vdots	\vdots	\vdots

Tabella 1: Tabella di dati da classificare: ogni dato ha due features ovvero le due coordinate x_1 e x_2 ed un label o target ovvero y , cioè abbiamo assegnato ad ogni punto sul piano un valore binario 0 o 1.

Quindi abbiamo dei punti sul piano, senza perdere di generalità supponiamoli fra 0 ed 1, e li abbiamo targhettabi con uno zero o con un uno. Vediamo ora come addestrare la rete. Come prima cosa passiamo i dati in input alla rete e facciamo il primo passo, cioè dobbiamo andare verso il primo layer nascosto, quello che in genere si fa è la seguente cosa:

$$\mathbf{z} = W\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (81)$$

Non molto magico eh? vediamo gli elementi di questa formula \mathbf{x} è il vettore in input quindi $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$; W è una matrice e gli elementi vengono chiamati pesi; infine \mathbf{b} è un vettore ed è chiamato bias. Le dimensioni di questa matrice e questo vettore sono dati dalla dimensione del layer: nella fattispecie per il primo layer W sarà una matrice 4×2 e \mathbf{b} un vettore lungo 4. Per cui anche il nostro output \mathbf{z} sarà un vettore lungo 4. Più in generale possiamo dire, essendo questa struttura la stessa per ogni layer, che la dimensione di W sarà sempre della forma: (numero di neuroni nel layer attuale) \times (numero di neuroni layer precedente), mentre \mathbf{b} sarà sempre un vettore lungo (numero di neuroni nel layer attuale). La domanda sorge spontanea: che valori hanno le entrate di W e di \mathbf{b} ? Inizialmente saranno scelte in maniera casuale e poi vedremo che durante le iterazioni di allenamento, dette epoch, esse verranno aggiornate secondo una certa regola. Prima di passare al secondo layer però c'è un'altra operazione da fare. Infatti solitamente non è \mathbf{z} l'output ma $f(\mathbf{z})$ dove f è una certa funzione $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Questa f è chiamata funzione di attivazione del neurone; essa restituirà nel nostro caso un vettore lungo 4 che sarà l'input per il layer successivo. Possiamo vedere tutto ciò come delle regole per far

accendere o spegnere un neurone. Fatto questo il procedimento si ripete in maniera uguale per ogni layer fino ad arrivare al layer di output. Ora che il passaggio attraverso la rete è stato fatto dobbiamo capire se l'output che genera la rete è simile a quello che noi vogliamo. È dunque arrivato il momento di calcolare una funzione che misuri la distanza tra risultato esatto e risultato della rete. Questa funzione è chiamata *loss* e nel nostro caso di classificazione binaria useremo quella che è chiamata binary cross entropy:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{N} \sum_i^N (y_i \log(\hat{y}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \hat{y}_i)) \quad . \quad (82)$$

Non vi sarà sfuggito il fatto che questa è la classica espressione per l'entropia di un sistema di fermioni. Precisiamo che N è il numero di dati che passiamo per farlo allenare (volendo il numero di righe della tabella di sopra). Fatto questo non ci resta che decidere il modo il cui aggiornare i pesi e bias della rete. Abbiamo detto che la loss misura la distanza di quanto la rete sbaglia, quindi basterà minimizzarla. Trovando il punto di minimo avremo i parametri (pesi e bias) ottimali della nostra rete. Come se stessimo eseguendo un fit, circa. Per farlo usiamo il più semplice e classico algoritmo: il gradiente discendente (di cui è presente una discussione in una delle appendici). Abbiamo quindi che:

$$W^{i+1} = W^i - \alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial W^i}, \quad (83)$$

$$\mathbf{b}^{i+1} = \mathbf{b}^i - \alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}^i}, \quad (84)$$

dove α è chiamato "learning rate" ed è un parametro che scegliamo noi. Immagino non vi sorprenderà sapere che le derivate copre citate si calcolano con la chain rule:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial W} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial (W\mathbf{x} + \mathbf{b})}{\partial W}, \quad (85)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{b}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \hat{y}} \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial (W\mathbf{x} + \mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}}. \quad (86)$$

Fatto questo abbiamo dei nuovi pesi e bias con cui ripartire prendendo nuovamente i dati in input e propagarli lungo la rete. Questo passaggio si chiama "feed forward" mentre l'updating è chiamato "backpropagation". Fatti questi, è finita un'iterazione, ovvero un'epoca, e parte la successiva. Il numero di epoche è anch'esso un parametro che scegliamo noi. Altra cosa che sta al nostro giudizio è la scelta delle funzioni di attivazione, per le quali, eccezion fatta per il layer di output, non ci sono chissà che criteri per selezionarle. In letteratura si possono trovare le scelte più disparate. Noi useremo per tutti i layer nascosti delle tangenti iperboliche e per il layer di output una sigmoide. Aggiungiamo altre due cose: avendo usato come loss la binary cross entropy può essere interessante misurare l'accuratezza del risultato della rete anche in un altro modo, calcoliamo:

$$a = 1 - \left| \sum_i^N \frac{\hat{y}_i - y_i}{N} \right|, \quad (87)$$

detta accuratezza più siamo vicini ad uno meglio è però bisogna stare attenti a non overfittare. La rete potrebbe infatti star "imparando a memoria" e questo non va bene. Per controllare che questo non succeda usiamo quella è chiamata validation loss. Si tratta sempre di calcolare la loss, ma non sui dati che usiamo come dati di allenamento, ma su un altro set che usiamo esclusivamente per questo calcolo. Quindi noi passiamo alla rete dei dati e li dividiamo in due, su un set allena e sull'altro valida. Quello che facciamo è plottare insieme la loss calcolata sui dati di allenamento e quella calcolata sui dati di validation (in funzione delle epoche). Se le due scendono insieme la rete si sta comportando bene. Se invece ad un certo punto la loss scende ma la loss di validation sale vuol dire che la rete sta overfittando, cioè sta imparando a memoria le caratteristiche dei dati di allenamento. Quindi per evitare questo bisogna scegliere alcuni parametri con un po' di senso, ad esempio learning rate, numero di neuroni e numero di layer o anche numero di epoche. Detto questo passiamo ora a vedere il codice. Implementeremo una rete neurale con un solo layer nascosto con numero di neuroni variabile, due neuroni in input e uno solo in output. Lo scopo sarà proprio di riconoscere dati dei punti nel quadrato $[0, 1] \times [0, 1]$ se essi hanno un valore associato 1 oppure 0. L'inizializzazione verrà fatta estraendo dei numeri distribuiti gaussianamente. Omettiamo per brevità, come sempre, le funzioni che fanno i plot e quello che è il main del codice.

```

1 """
2 Code that implement a shallow neural network for a binary classifications.
3 The code is written imposed 2 input, 1 output e one hidden layer.
4 Is possible to choose the dimensions of hidden layer.
5 It is also possible to save plots during the run to see how the network is learning.

```

```

6 """
7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9
10 #=====
11 # Loss function binary classification
12 #=====
13
14 def Loss(Yp, Y):
15     """
16         loss function, binary cross entropy
17
18     Parameters
19     -----
20     Yp : 1darray
21         actual prediction
22     Y : 1darray
23         Target
24
25     Returns
26     -----
27     float, binary cross entropy
28     """
29     m = len(Y)
30     return -np.sum(Y*np.log(Yp) + (1 - Y)*np.log(1 - Yp))/m
31
32 #=====
33 # Activation function
34 #=====
35
36 # Hidden layer
37 def g1(x):
38     return np.tanh(x)
39 # Output layer
40 def g2(x):
41     return 1 / (1 + np.exp(-x))
42
43 #=====
44 # Initialization
45 #=====
46
47 def init(n):
48     """
49         Random initialization of parameters weights and biases
50
51     Parameters
52     -----
53     n : int
54         number of neurons in the hidden layer
55
56     Returns
57     -----
58     W1, b1 : 2darray
59         weights and bias for hidden layer
60     W2, b2 : 2darray
61         weights and bias for output layer
62     """
63     # Hidden layer
64     # nx2 because 2 features and n neurons
65     W1 = np.random.randn(n, 2)
66     b1 = np.random.rand(n, 1)
67     # Output layer
68     # 1xn because 1 output and n neurons
69     W2 = np.random.randn(1, n)
70     b2 = np.random.rand(1, 1)
71     return W1, b1, W2, b2
72
73 #=====
74 # Network prediction function
75 #=====
76
77 def predict(X, W1, b1, W2, b2):
78     """
79         Function that returns the prediction of the network
80
81     Parameters
```

```

82     -----
83     X : 2darray
84         data, features
85     W1, b1, W2, b2 : 2darray
86         parameter of the network
87
88     Returns
89     -----
90     A1 : 1d array
91         intermediate prediction
92     A2 : 1d array
93         final prediction
94     """
95     # Hidden layer
96     Z1 = W1 @ X + b1
97     A1 = g1(Z1)
98     # Output layer
99     Z2 = W2 @ A1 + b2
100    A2 = g2(Z2)
101
102    return A1, A2
103
104 #=====
105 # Backpropagation function
106 #=====
107
108 def backpropagation(X, Y, step, A1, A2, W1, b1, W2, b2):
109     """
110     Backpropagation function.
111     Update weights and biases with gradient descendent
112     all the quantities came from taking the derivative of the Loss
113
114     Y : 1darray
115         Target
116     step : float
117         learning rate
118     A1, A2 : 1darray
119         predictions of the network
120     W1, b1, W2, b2 : 2darray
121         parameter of the network
122     """
123     m = len(Y)
124     # Output layer
125     dLdZ2 = (A2 - Y)
126     dLdW2 = dLdZ2 @ A1.T / m
127     dLdb2 = np.sum(dLdZ2, axis=1)[:, None] / m
128     # Hidden layer
129     dLdZ1 = W2.T @ dLdZ2 * (1 - A1**2)
130     dLdW1 = dLdZ1 @ X.T / m
131     dLdb1 = np.sum(dLdZ1, axis=1)[:, None] / m
132
133     # Update of parameters
134     W1 -= step * dLdW1
135     b1 -= step * dLdb1
136     W2 -= step * dLdW2
137     b2 -= step * dLdb2
138
139     return W1, b1, W2, b2
140
141 #=====
142 # Accuracy mesuraments
143 #=====
144
145 def accuracy(Yp, Y):
146     """
147     accuracy of prediction. We use:
148     accuracy = 1 - | sum ( prediction - target )/target_size |
149
150     Parameters
151     -----
152     Yp : 1darray
153         actual prediction
154     Y : 1darray
155         Target
156
157     Returns

```

```

158
159     a : float
160         accuracy
161     '',
162     m = len(Y)
163     a = 1 - abs(np.sum(Yp.ravel() - Y)/m)
164     return a
165
166 #=====
167 # Train of the network
168 #=====
169
170 def train(X, Y, n_epoch, neuro, step, sp=False, verbose=True):
171     ''
172     function for the training of the network
173
174     Parameters
175     -----
176     X : 2darray
177         data, featur
178     Y : 1darray
179         Target
180     n_epoch : int
181         number of epoch
182     neuro : int
183         number of neurons in the hidden layer
184     step : float
185         learning rate
186     sp : boolean, optional, default False
187         if True a plot of boundary is saved each 100 epoch
188         usefull for animations
189     verbose : boolean, optional, default True
190         if True print loss and accuracy each 100 epoch
191
192     Returns
193     -----
194     result : dict
195         params -> W1, b1, W2, b2 weights and bias of network
196         train_Loss -> loss on train data
197         valid_Loss -> loss on validation data
198     '',
199
200     W1, b1, W2, b2 = init(neuro)
201     L_t = np.zeros(n_epoch) # training loss
202     L_v = np.zeros(n_epoch) # validation loss
203     N = X.shape[1]          # total number of data
204     M = N//4                # nuber of data for validation
205
206     # split dataset in validation and train
207     X_train, Y_train = X[:, :N-M], Y[:N-M]
208     X_valid, Y_valid = X[:, N-M:], Y[N-M:]
209
210     for i in range(n_epoch):
211         # train
212         A1, A2 = predict(X_train, W1, b1, W2, b2)
213         L_t[i] = Loss(A2, Y_train)
214         # validation
215         _, Yp = predict(X_valid, W1, b1, W2, b2)
216         L_v[i] = Loss(Yp, Y_valid)
217         # update
218         W1, b1, W2, b2 = backpropagation(X_train, Y_train, step, A1, A2, W1, b1, W2, b2)
219
220         if not i % 100:
221             #if sp : plot(X_train, Y_train, (W1, b1, W2, b2), i)
222
223             if verbose:
224                 acc = accuracy(A2, Y_train)
225                 print(f'Loss = {L_t[i]:.5f}, accuracy = {acc:.5f}, epoch = {i} \r', end=' ')
226
227             if verbose: print()
228
229     result = {'params'      : (W1, b1, W2, b2),
230               'train_Loss'   : L_t,
231               'valid_Loss'   : L_v,
232             }
233

```

```
234     return result
```

Dopo queste belle tre paginate di codice vediamo un po' di risultati. Questo codice era scritto per far vedere come rete impara creando un gif, che trovate disponibile sulla cartella. Il risultato finale è il seguente:

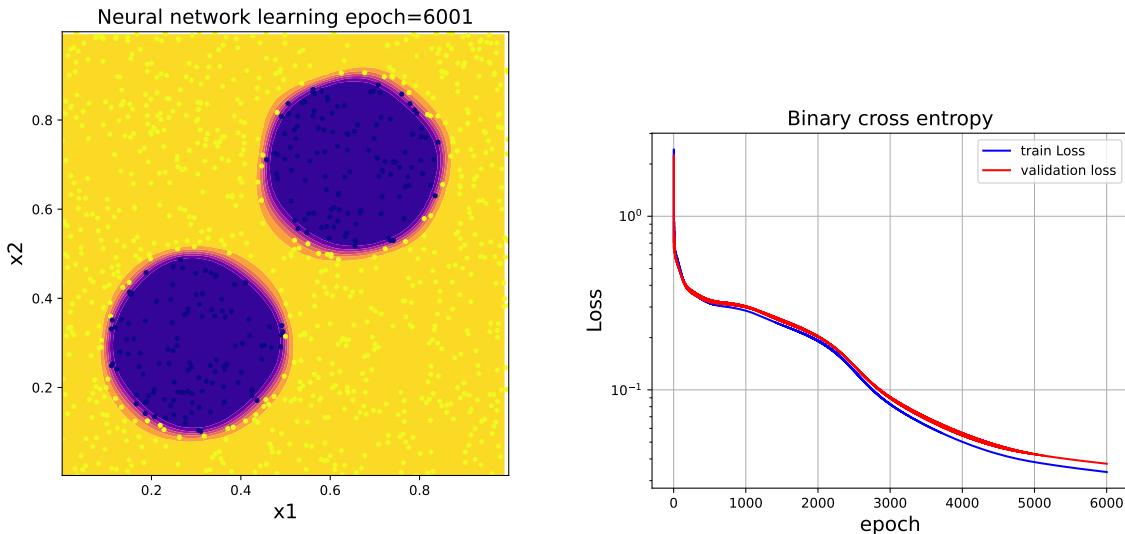


Figura 8: Risultati della rete neurale, predizione e andamento della loss. I parametri qui sono: 20 neuroni nel layer nascosto, un learning rate di 1.5, 6001 epoche, 3000 dati di train e 1000 di validation.

Il plot a sinistra è fatto sui dati di test, quindi un set di dati che la rete non ha usato per allenarsi e il risultato sembra soddisfacente, vediamo poi che le due loss scendono insieme il che è segno che la rete si comporta bene. Volendo ora farvi vedere andamenti diversi della loss vi mostro due grafici provenienti da un altro codice, in cui ho implementato una rete neurale in maniera leggermente diversa e un po' più generale. Anche perché, se vedete la loss nella figura sopra, noterete che la linea è un po' spessa, dovuto al fatto che sta oscillando (immagino sia una concausa tra problema da affrontare e algoritmo di minimizzazione). Il problema è questa volta il MNIST, ovvero il riconoscimento di cifre scritte a mano in bassa risoluzione, ogni immagine è 28×28 pixel. Vediamo un caso in cui la rete overfittata e un caso in cui si comporta bene:

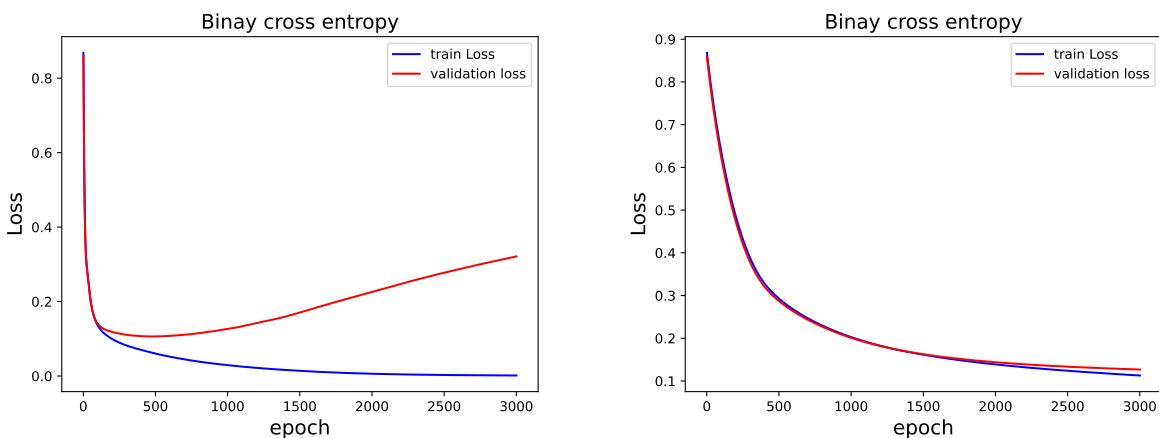


Figura 9: Andamento della loss in funzione delle epoche. Nel grafico a sinistra la rete sta overfittando, mentre a destra l'allenamento procede bene. I parametri qui sono: 2 layer nascosti ognuno da 50 neuroni; l'ottimizzatore usato è ADAM e il learning rate iniziale è di 0.05 per il caso di overfit e di 0.01 per quello di buon fit; le funzioni di attivazione sono: per i leayer nascosti le "relu", mentre una sigmoide per il layer finale. Le epoche sono 3001, 2250 i dati di train e 750 quelli di validation.

Vediamo quindi che anche solo il cambiamento del learning rate iniziale (dove si specifica iniziale in quanto ADAM è un algoritmo adattivo) provoca un comportamento che non vogliamo, facendo overfittare la rete. Questo lo possiamo vedere anche, trattandosi di un classificatore, grazie a quelle che sono le matrici di confusione. Mostriamo di seguito le matrici nel caso di overfit e di fit facendo anche il confronto vedendo i dati train

e quelli di test. Spieghiamo velocemente come si legge questa matrice: sull'asse delle ordinate è presente la predizione della rete mentre su quello delle ascisse ci sta il risultato esatto. Le entrate di questa matrice ci dicono fondamentalmente quante volte la rete ha detto "x" e doveva dire "y"; quindi gli elementi sulla diagonale sono le risposte esatte mentre i termini fuori sono risposte sbagliate. Per chiarezza precisiamo che questa matrice viene calcolata sempre a fine allenamento.

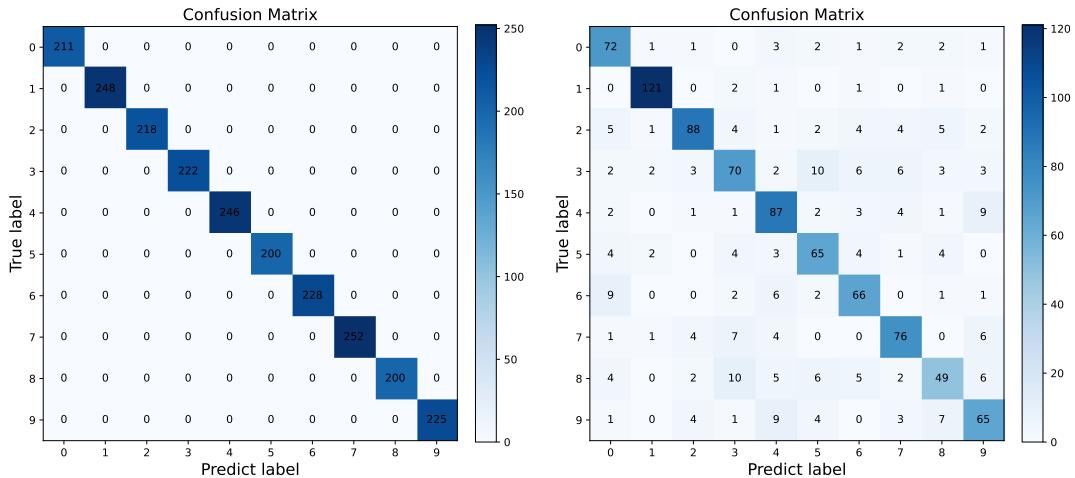


Figura 10: Vediamo qui le matrici nel caso di overfit calcolate sui dati di train, a sinistra, e su quelli di test, a destra. Avendo imparato a memoria le caratteristiche dei dati di train vediamo effettivamente che la rete non sbaglia una singola predizione. Mentre a destra, su dati che per la rete sono nuovi, ci sono molti più errori.

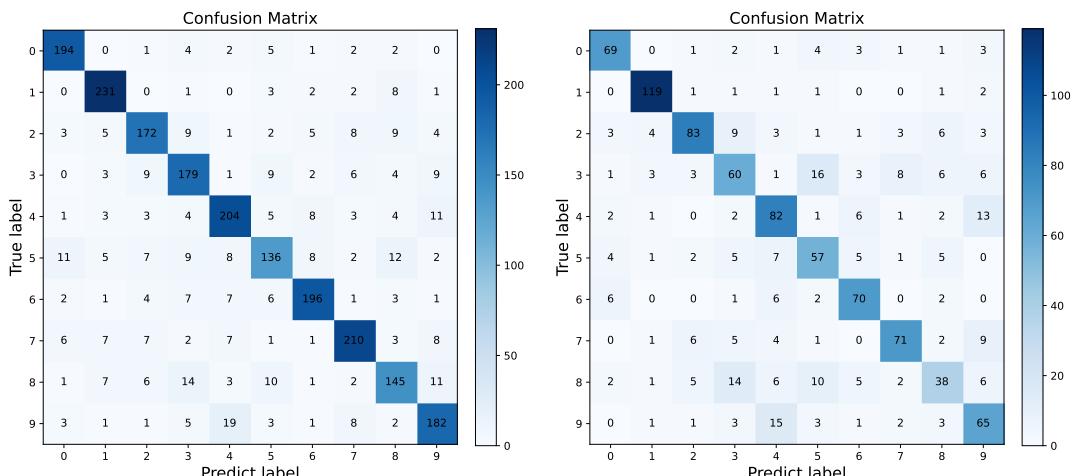


Figura 11: Vediamo qui le matrici nel caso di buon fit calcolate sui dati di train, a sinistra, e su quelli di test, a destra. Questa volta la rete non ha imparato a memoria, vediamo infatti che ci sono risposte sbagliate un po' ovunque. Le due matrici sembrano parenti.

Per concludere questa discussione in caso fosse di vostro interesse vi mostro il codice per calcolare queste matrici di confusione:

```

1 def confmat(true_target, pred_target, plot=True, k=0):
2     """
3         Function for creation and plot of confusion matrix
4
5     Parameters
6     -----
7     true_target : 1darray
8         vaules that must be predict
9     pred_target : 1darray
10        values that the network has predict

```

```

11     plot : bool, optional, default True
12         if True the matrix is plotted.
13     k : int, optional, default 0
14         number of figure, necessary in order not to overlap figures
15
16     Return
17     -----
18     mat : 2darray
19         confusion matrix
20     ,
21
22     dat = np.unique(true_target)      # classes
23     N = len(dat)                  # Number of classes
24     mat = np.zeros((N, N), dtype=int) # confusion matrix
25
26     # creation of confusion matrix
27     for i in range(len(true_target)):
28         mat[true_target[i]][pred_target[i]] += 1
29
30     if plot :
31         fig = plt.figure(0, figsize=(7, 7))
32         ax = fig.add_subplot()
33
34         c = ax.imshow(mat, cmap=plt.cm.Blues) # plot matrix
35         b = fig.colorbar(c, fraction=0.046, pad=0.04)
36         # write on plot the value of predictions
37         for i in range(mat.shape[0]):
38             for j in range(mat.shape[1]):
39                 ax.text(x=j, y=i, s=mat[i, j],
40                         va='center', ha='center')
41
42         # Label
43         ax.set_xticks(dat, dat)
44         ax.set_yticks(dat, dat)
45         ax.tick_params(top=False, bottom=True, labeltop=False, labelbottom=True)
46
47         plt.xlabel('Predict label', fontsize=15)
48         plt.ylabel('True label', fontsize=15)
49         plt.title('Confusion Matrix', fontsize=15)
50         plt.tight_layout()
51
52     return mat

```

A Zeri di una funzione

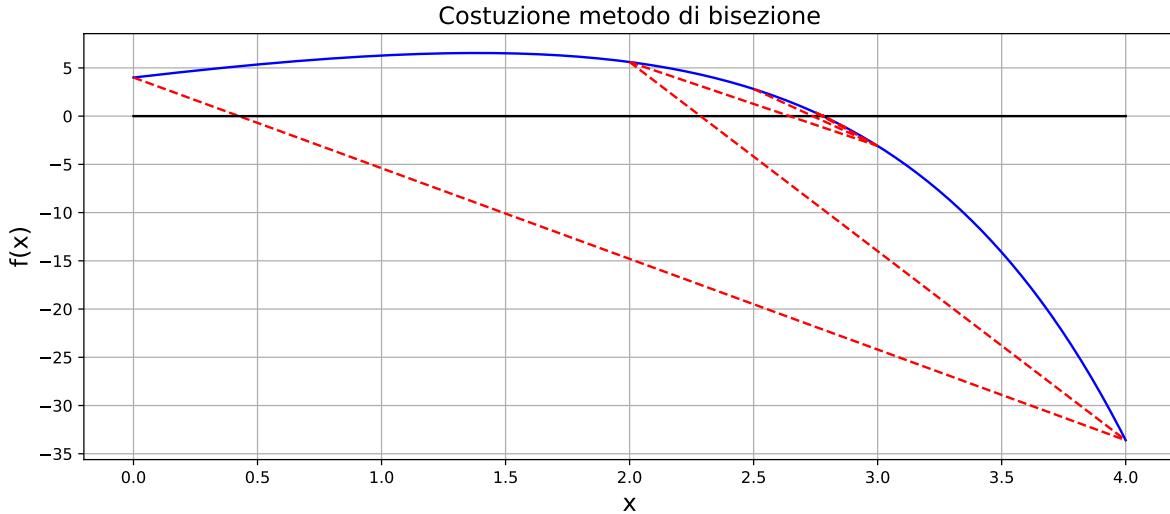
Capita spesso la necessità di trovare gli zeri di una funzione, o più, per risolvere un'equazione o un sistema di equazioni. Brevemente vedremo due metodi per la risoluzione di un'equazione, quindi per trovare lo zero, o gli zeri, di una funzione: il metodo di bisezione e il metodo di Newton, o delle tangenti. Ovviamente tutto ciò può essere fatto con la libreria "scipy.optimize" ma qui vogliamo fare le cose a mano.

A.1 Bisezione

L'algoritmo di bisezione è fondamentalmente una ricerca binaria, e si basa sul teorema degli zeri, ovvero se una funzione è buona quanto basta allora esiste uno zero. Chiaramente quindi dobbiamo più o meno sapere dove cercare perché è necessario che la regione selezionata contenga lo zero. Scelto un intervallo si cerca il punto medio e si valuta in quel punto la funzione, a seconda di una condizione il punto medio diventa il nuovo estremo dell'intervallo, e così via l'intervallo va riducendosi (praticamente la funzione calcolata in un estremo deve avere segno opposto rispetto alla stessa calcolata nell'altro estremo):

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4
5 def f(x) :
6     """
7         funzione di cui trovare lo zero
8     """
9     return 5.0+4.0*x-np.exp(x)
10
11 a = 0.0 #estremo sinistro dell'intervallo
12 b = 4.0 #estremo destro dell'intervallo
13 t = 1.0e-15 #tolleranza
14
15 x=np.linspace(a, b, 1000)
16 #plot per vedere come scegliere gli estremi
17 plt.figure(1)
18 plt.plot(x, f(x))
19 plt.grid()
20 plt.show()
21
22 ##metodo bisezione
23 fa = f(a)
24 fb = f(b)
25 if fa*fb>0:
26     print("potrebbero esserci piu' soluzioni" , fa , fb)
27 """
28 Potrebbero esserci piu' zeri anche se la condizione non fosse verificata
29 Ma se la condizione e' verificata allora di certo ci sono piu' soluzioni
30 non e' un se e solo se
31 """
32
33 iter = 1
34 #fai finche l'intervallo e' piu' grande della tolleranza
35 while (b-a) > t:
36     c = (a+b)/2.0 #punto medio
37     fc = f(c)
38     #se hanno lo stesso segno allora c e' piu' vicino allo zero che a
39     if fc*fa > 0:
40         a = c
41     #altrimenti e' b ad essere piu' lontano
42     else:
43         b = c
44     iter += 1
45
46 print(iter , " iterazioni necessarie:")
47 print("x0 = " ,c)
48 print("accuracy = " , '{:.2e}'.format(b-a))
49 print("f (x0)=" ,f(c))
50
51 [Output]
52 53 iterazioni necessarie:
53 x0 = 2.780080782051699
54 accuracy = 8.88e-16
55 f (x0)= 7.105427357601002e-15
```

Vediamo graficamente cosa succede:



Per generare il grafico precedente si può fare così:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 a = 0.0 #estremo sinistro dell'intervallo
5 b = 4.0 #estremo destro dell'intervallo
6 t = 1.0e-15 #tolleranza
7
8 plt.figure(2)
9 plt.title('Costuzione metodo di bisezione', fontsize=15)
10 plt.xlabel('x', fontsize=15)
11 plt.ylabel('f(x)', fontsize=15)
12 plt.plot(x, f(x), 'b')
13 plt.plot([a, b],[f(a), f(b)], linestyle='--', c='r')
14 plt.plot(x, x*0, 'k')
15
16 iter = 1
17 #fai finche l'intervallo e' piu' grande della tolleranza
18 while (b-a) > t:
19     c = (a+b)/2.0 #punto medio
20     fc = f(c)
21     #se hanno lo stesso segno allora c e' piu' vicino allo zero che a
22     if fc*fa > 0:
23         a = c
24     #altrimenti e' b che e' piu' lontano
25     else:
26         b = c
27     iter += 1
28     plt.plot([a, b],[f(a), f(b)], linestyle='--', c='r')
29
30 plt.grid()
31 plt.show()

```

Il metodo di bisezione non è il migliore in genere per questo tipo di cose però checché se ne dica funziona sempre, quindi in caso non sappiate che pesci pigliare...

A.2 Metodo di Newton

Se si considera un x_0 molto vicino alla soluzione possiamo espandere in serie di Taylor e ottenere:

$$f(s) = 0 = f(x_0) + (x_0 - s) \frac{df}{dx}(x_0) \quad \text{da cui} \quad s = x_0 + \frac{f(x_0)}{\frac{df}{dx}(x_0)}$$

che conduce quindi al metodo iterativo:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{f(x_n)}{\frac{df}{dx}(x_n)}$$

Nel seguente codice utilizzeremo la libreria sympy che permette di eseguire calcoli analitici. Ovviamamente qualora non sia fattibile la derivata va calcolata numericamente.

```

1 import sympy as sp
2
3 x = sp.Symbol('x')
4 f = sp.tan(x)-x #funzione di cui trovare gli zeri
5 df = sp.diff(f, x) #derivata della funzione f
6 t = 1e-13 #tolleranza
7
8 def tangenti(x0, t):
9     iter = 1
10    while abs(f.subs(x, x0))>=t:
11        x0 = x0 - ( f.subs(x,x0) / df.subs(x,x0) )
12        iter += 1
13        if iter > 10000 or abs(f.subs(x, x0))>500:
14            if iter > 10000:
15                raise Exception('troppe iterazioni')
16
17        if abs(f.subs(x, x0))>500:
18            raise Exception('la soluzione sta divergendo\nscegliere meglio il punto di
partenza')
19
20    return x0, iter
21
22
23 #valore iniziale da cui partire
24 init = 4.4
25
26
27 xs, iter = tangenti(init, t)
28
29 print(iter , " iterazioni necessarie")
30
31
32 print("xs= %.15f" %xs)
33
34 print("|f(xs)|= %e" %abs(f.subs(x,xs)))
35
36 [Output]
37 7 iterazioni necessarie
38 xs= 4.493409457909064
39 |f(xs)|= 8.881784e-16

```

Per vedere graficamente cosa succede, cambiamo funzione dato che la tangente è troppo ripida e costruiamo come prima il grafico delle iterazioni. Il codice è il seguente:

```

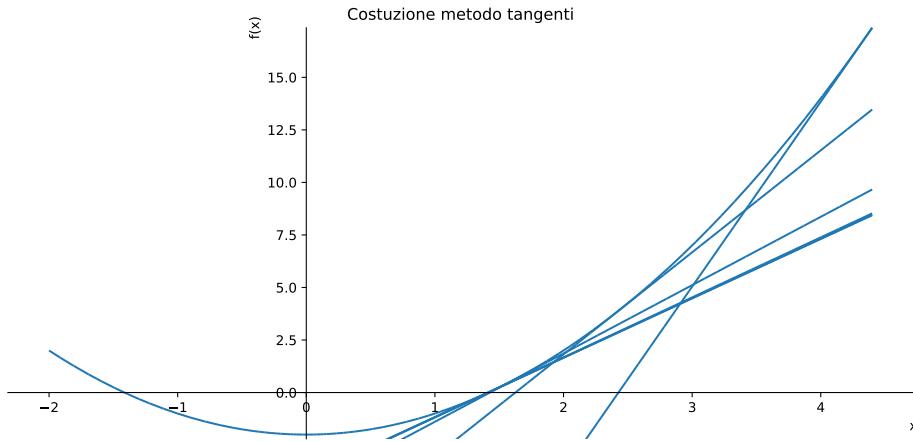
1 import sympy as sp
2 from sympy.plotting import plot
3
4 x = sp.Symbol('x')
5 f = x**2 - 2 #funzione di cui trovare gli zeri
6 df = sp.diff(f, x) #derivata della funzione f
7 t = 1e-13 #tolleranza
8 init = 4.4
9 P1 = plot(f, (x, -2, init), ylim=(-2.2, f.subs(x,init)), show=False, title='Costuzione metodo
tangenti')
10
11 def tangenti(x0, t):
12     iter = 1
13     while abs(f.subs(x, x0))>=t:
14         P2 = plot(f.subs(x,x0)+(x-x0)*df.subs(x,x0), (x, -2, init), ylim=(-2.2, f.subs(x,init))
), show=False)
15         P1.extend(P2)
16         x0 = x0 - ( f.subs(x,x0) / df.subs(x,x0) )
17         iter += 1
18         if iter > 10000 or abs(f.subs(x, x0))>500:
19             if iter > 10000:
20                 raise Exception('troppe iterazioni')
21
22             if abs(f.subs(x, x0))>500:
23                 raise Exception('la soluzione sta divergendo\nscegliere meglio il punto di
partenza')
24
25     return x0, iter
26
27
28 #valore iniziale da cui partire
29 xs, iter = tangenti(init, t)
30

```

```

31 print(iter , " iterazioni necessarie")
32 print("xs= %.15f" %xs)
33 print("|f(xs)|= %e" %abs(f.subs(x,xs)))
34
35 P1.show()
36
37 [Output]
38 7 iterazioni necessarie
39 xs= 1.414213562373095
40 |f(xs)|= 4.440892e-16

```



Purtroppo questo metodo può presentare problemi, provate a risolvere l'equazione $x^3 - 2x + 2 = 0$ vi accorgerete che a seconda di dove partite succedono cose strane...

A.3 Zeri in più dimensioni

Ovviamente oltre agli zeri di una singola funzione possiamo anche risolvere un sistema; vedremo sia un 'implementazione manuale, che è il newton raphson, sia un paio di funzioni di scipy. Fondamentalmente newton raphson è come la regola di newton vista sopra, solo che ora x è un vettore e invece della derivata dobbiamo calcolare la matrice delle derivate e invertirla. Passiamo quindi da un sistema non lineare a risolvere diverse volte, per ogni iterazione, un sistema lineare:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - J(\mathbf{x}_n)^{-1} F(\mathbf{x}_n)$$

Dove J è definito come:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad J_{ij} = \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j}.$$

Proviamo un caso semplice in cui possiamo anche visualizzare l'evoluzione della soluzione, quindi solo due equazioni:

$$\begin{cases} x^2 + y^2 - 1 = 0 \\ y - x^2 + x/2 = 0 \end{cases}$$

Vediamo il codice con sia implementazione manuale che tramite scipy:

```
1 """
2 newton method for nonlinear system of equations
3 """
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6 from scipy.optimize import fsolve, root
7
8 #=====
9 # Newton method implementation
10 #=====
11
12 def newton(f, start, tol, args=(), dense_output=False, max_it=1000):
13     '''
```

```

14 Generalizzation of newton method for n equations
15
16 Parameters
17 -----
18 f : callable
19     A vector function to find a root of.
20 start : ndarray
21     Initial guess. The method is very sensitive to this
22     must be chosen carefully
23 tol :float, optional, default 1e-8
24     required tollerance
25 args : tuple, optional
26     Extra arguments passed to f
27 dense_output : bool, optional
28     true for full and number of iteration
29 max_it : int, optional, default 1000
30     after max_it iteration the code stop raising an exception
31
32 Return
33 -----
34 x0 : 1darray
35     solution of the system
36     if dense_outupt=True all iteration are returned
37     in a matrix called X and also the number of iteration
38 ,,
39
40 # initial guess
41 x0 = start
42 f0 = f(x0, *args)
43 # for the computation of jacobian
44 nd = len(x0)
45 df = np.zeros((nd, nd))
46 h = 1e-8
47 s = np.zeros(nd)
48 #for full output
49 X = []
50 if dense_output : X.append(x0)
51 # count
52 n_iter = 0
53
54 while True:
55
56     # compute jacobian using symmetric derivative
57     for i in range(nd):          # loop over functions
58         for j in range(nd):      # loop over variables
59             s[j] = 1
60             xr, xl = x0 + h*s, x0 - h*s
61             df[i, j] = (f(xr, *args) - f(xl, *args))[i]/(2*h)
62             s[:] = 0
63
64     # update solution
65     delta = np.linalg.solve(df, f0)
66     x0 = x0 - delta
67     f0 = f(x0, *args)
68
69     if dense_output:
70         n_iter += 1
71         X.append(x0)
72
73     # stop condition
74     if all(abs(f0) < tol):
75         break
76     # check iterations
77     if n_iter > max_it :
78         err_msg = 'too many iteration, failure to converge, change initial guess'
79         raise Exception(err_msg)
80
81     if dense_output:
82         return np.array(X), n_iter
83     else:
84         return x0
85
86 =====
87 # System to solve
88 =====

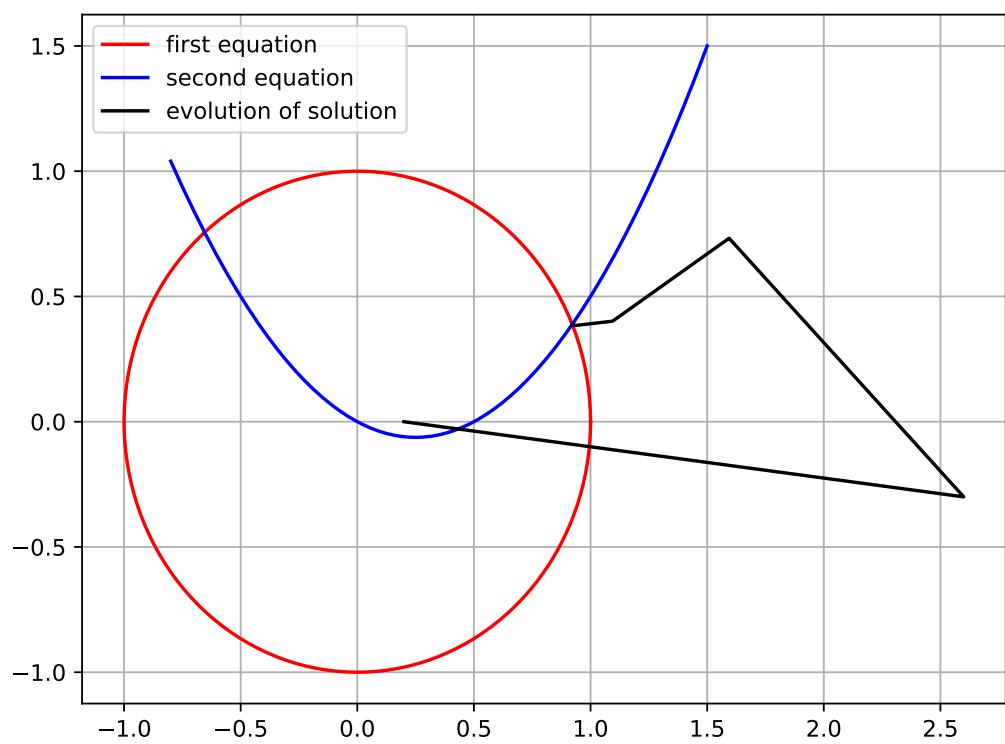
```

```

90 def system(V):
91     x1, x2 = V
92
93     r1 = x1**2 + x2**2 - 1#x3
94     r2 = x2 - x1**2 + x1/2 #+ x3/5
95     #r3 = x3**2 + 5*x2 - 7
96
97     R = np.array([r1, r2])#, r3])
98     return R
99
100 #=====
101 # Solution and compare with scipy
102 #=====
103
104 init = np.array([0.2, 0.0])
105 tol = 1e-12
106 sol, n_iter = newton(system, init, tol=tol, dense_output=True)
107 xs, ys = sol.T
108 print("Solution with newton: ", *sol[-1], "in", n_iter, "iterations")
109
110 sol = root(system, init, method='hybr', tol=tol)
111 print("Solution with root: ", *sol.x)
112
113 sol = fsolve(system, init, xtol=tol)
114 print("Solution with fsolve: ", *sol)
115
116 #=====
117 # Plot
118 #=====
119
120 t = np.linspace(0, 2*np.pi, 1000)
121 z = np.linspace(-0.8, 1.5, 1000)
122 plt.figure(1)
123 plt.grid()
124 plt.plot(np.cos(t), np.sin(t), 'r', label='first equation')
125 plt.plot(z, z**2 - z/2, 'b', label='second equation')
126 plt.plot(xs, ys, 'k', label='evolution of solution')
127 plt.legend(loc='best')
128 plt.show()
129
130 [Output]
131 Solution with newton:  0.9214908788160613 0.38840000033316596 in 7 iterations
132 Solution with root:    0.9214908788160611 0.388400000333166
133 Solution with fsolve:  0.9214908788160611 0.388400000333166

```

Vediamo che il nostro codice funziona ci sono però un paio di problemi. Esso presenta problemi simili a quello unidimensionale. Ci sono casi in cui lo jacobiano può non esistere, o essere singolare. Inoltre se già gli algoritmi sofisticati sono sensibili alle condizioni iniziali, questo metodo, essendo molto base, lo è infinitamente di più. Provate a cambiare un po' il valore della guess iniziale e vedrete il macello che si combina. Una strategia spesso usata, che è ciò che fa scipy (non a caso le funzioni se avete notato sono nella libreria "scipy.optimize", la stessa di "curve.fit"), è quella di promuovere il problema dalla ricerca di uno zero alla ricerca di un minimo. Ovvero si passa da cercare lo zero di f_i alla ricerca del minimo della somma su i delle f_i al quadrato $S^2 = \sum_i f_i^2$. Con qualche modifica si può anche usare metodo visto per fare i fit ma la cosa migliore e in genere più usata è risolvere questi problemi con degli algoritmi chiamati "trust-region".



B Calcolo degli integrali

Avere a che fare con integrali di cui non si conosce l'espressione analitica è una cosa estremamente comune in fisica, anche troppo. Bisogna quindi trovare un modo per poter calcolare i vari integrali. Molti sono i metodi usati, qui voglia illustrare un metodo di quadratura gaussiana, il metodo di Gauss-Legendre. Questo metodo ci permette di approssimare l'integrale con una somma pesata:

$$\int_{-1}^1 f(x) \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) , \quad (88)$$

dove n è il numero di punti, x_i sono le radici del polinomio di Legendre di grado n $P_n(x)$, e w_i sono definiti come:

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)(P'_n(x_i))^2} . \quad (89)$$

Questo però ci da solo integrali nell'intervallo $[-1, 1]$, problema facilmente risolvibile considerando un cambio di variabili:

$$I_{ab} = \int_a^b f(x) \simeq \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(x_i \frac{b-a}{2} + \frac{b+a}{2}\right) . \quad (90)$$

Ora in linea di principio basterebbe questo, calcoliamo quella somma una volta ed abbiamo finito. Però vogliamo fare qualcosa di più, vogliamo fare un algoritmo adattivo. Quello che facciamo è: scelti a e b estremi in integrazione calcoliamo l'integrale poi detto $m = (a+b)/2$ il punto medio calcoliamo l'integrale nei due sotto intervalli; se la differenza fra l'integrale intero e la somma degli integrali sui due sotto intervalli è piccola, abbiamo finito, altrimenti ripartiamo ricorsivamente dividendo ciascun intervallo in altri due intervalli et cetera. Possiamo così attribuire facilmente un errore al nostro integrale, useremo proprio la differenza che usiamo come criterio di convergenza. Vediamo dal punto di vista del codice:

```

1 """
2 code for integration with Gauss-Legendre quadrature
3 """
4
5 import math
6 from scipy.special import roots_legendre
7
8 def adaptive_gaussleg_quadrature(f, a, b, args=(), tol=1e-8, n=5):
9     """
10     Splits an integral into the right and left half
11     and compares it to the integral on the whole interval
12     if tolerance is not satisfied, left and right are
13     splitted into smaller intervals and so on until the
14     tolerance is satisfied they are added to the sum
15
16     Parameters
17     -----
18     f : callable
19         function to integrate
20     a : float
21         beginning of the interval
22     b : float
23         end of the interval
24     args : tuple, optional
25         extra arguments to pass to f
26     tol : float, optional
27         tollerance, default 1e-8
28     n : int, optional
29         number of nodes, default n=5
30
31     Return
32     -----
33     Int : float
34         \int_a^b f
35     diff : float
36         error on Int
37     """
38
39     #interval division
40     m = a + (b - a)/2
41     #compute integral
42     Int = gauss_leg(f, a, b, args, n)
43     I_r = gauss_leg(f, m, b, args, n)
44     I_l = gauss_leg(f, a, m, args, n)

```

```

45     #check tollerance
46     diff = abs( Int - (I_l + I_r) )
47     if diff < tol:
48         return Int, diff
49     #recursive call
50     div1, err1 = adaptive_gaussleg_quadrature(f, m, b, args, tol, n)
51     div2, err2 = adaptive_gaussleg_quadrature(f, a, m, args, tol, n)
52     #sum of all integrals in the several intervals
53     x = div1 + div2
54     r = err1 + err2
55
56     return x, r
57
58
59 def gauss_leg(f, a, b, args=(), n=5):
60     """
61     Calculation of the integral of f
62     with the Gaussian-Legendre quadrature method
63
64     Parameters
65     -----
66     f : callable
67         function to integrate
68     a : float
69         beginning of the interval
70     b : float
71         end of the interval
72     args : tuple, optional
73         extra arguments to pass to f
74     n : int
75         number of nodes, default n=5
76
77     Return
78     -----
79     Inte : float
80         \int_a^b f
81     """
82
83     #b must be grather tha a
84     if b < a:
85         a, b = b, a
86     else :
87         pass
88
89     Inte = 0
90     dxddxi = (b - a)/2
91     roots, weights = roots_legendre(n)
92
93     for x_i, w_i in zip(roots, weights):
94         Inte += w_i * f(x_i * dxddxi + (b + a)/2, *args)
95
96     Inte *= dxddxi
97
98     return Inte
99
100
101 def test():
102     """ little test
103     """
104     def h(x):
105         """sine
106         """
107         return math.sin(x)
108     def f(x, a1):
109         """gaussian
110         """
111         return math.exp(-x**2/(2*a1))/(math.sqrt(2*math.pi)*a1)
112     def g(x, a1, a2):
113         """fermi dirac
114         """
115         return math.exp(-(x - a1)/a2)/(1 + math.exp(-(x - a1)/a2))
116
117     I, dI = adaptive_gaussleg_quadrature(h, 0, math.pi)
118     print('Integral value is', I, '+-', dI)
119     I, dI = adaptive_gaussleg_quadrature(f, -100, 100, args=(1,))
120     print('Integral value is', I, '+-', dI)
121     I, dI = adaptive_gaussleg_quadrature(g, 0, 20, args=(10, 0.02))

```

```

121 print('Integral value is', I, '+-', dI)
122
123
124 if __name__ == '__main__':
125     test()
126
127
128 [Output]
129 Integral value is 2.0000000000791305 +- 7.905831544974262e-11
130 Integral value is 1.0000000051542988 +- 5.442503145328187e-09
131 Integral value is 10.0 +- 0.0

```

Volendo fare un confronto con una funzione Python quella adatta è ”scipy.integrate.quad” la quale adopera sempre una quadratura gaussiana ma con pesi e nodi diversi, infatti usa la tecnica: 21-point Gauss–Kronrod quadrature, con una leggera modifica. Non se ne riporta l’implementazione in quanto sarebbe analogo tolta la parte dei nodi che però sono tabulati (più di 400 linee di codice). Nella cartella sarà tuttavia presente per chi fosse interessato. Giusto per completezza facciamo notare che in Gauss–Kronrod l’errore è calcolato in maniera diversa e più efficiente. Si considerano infatti due integrali che denominiamo GN, KM, rispettivamente per Gauss e Kronrod, uno calcolato in N punti e l’altro in M e come errore si considera la differenza del valore assoluto. L’implementazione di scipy è basata su (G10, K21). Nella cartella è presente il codice in cui sono raccolte le seguenti possibili composizioni (’gkdata.py’): (G7, K15), (G10, K21), (G15, K31), (G20, K41), (G25, K51), (G30, K61).

C Risolvere numericamente le ODE: IVP

In questa sezione ci occuperemo dei così-detti problemi ai valori iniziali (initial value problem IVP).

In fisica è prassi che spuntino fuori equazioni differenziali che non ammettano soluzione analitica; piuttosto che lamentarci di questo ringraziamo quando ciò capita con le ODE, cioè le equazione differenziali ordinarie, perché spesso e volentieri madre natura preferisce l'utilizzo delle equazioni differenziali alle derivate parziali(dette PDE) che in genere da risolvere sono abbastanza più complicate. Qui vedremo semplici esempi per risolvere un'ode. I metodi mostrati saranno per brevità solo due: l'utilizzo delle funzione "odeint()" di scipy e il metodo di eulero, basato sulla definizione di derivata, che mostriamo brevemente: sia

$$\begin{cases} f'(t) = g(t, f(t)) \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{equazione differenziale} \\ \text{condizione iniziale} \end{array} \quad (91)$$

il problema ai valori iniziali da risolvere ,allora:

$$f' = \frac{df}{dt} \xrightarrow{\text{discretizzando}} \frac{f(t+dt) - f(t)}{dt} \quad (92)$$

Dove la forma ottenuta discretizzando non è altro che il rapporto incrementale di $f(t)$, di cui per definizione la derivata ne è il limite per $dt \rightarrow 0$. Sapendo la forma funzionale della derivata, ovvero la $g(t, f(t))$, data dall'equazione differenziale, possiamo ottenere la soluzione dell'equazione per passi:

$$f(t+dt) = f(t) + dt g(t, f(t)) \quad (93)$$

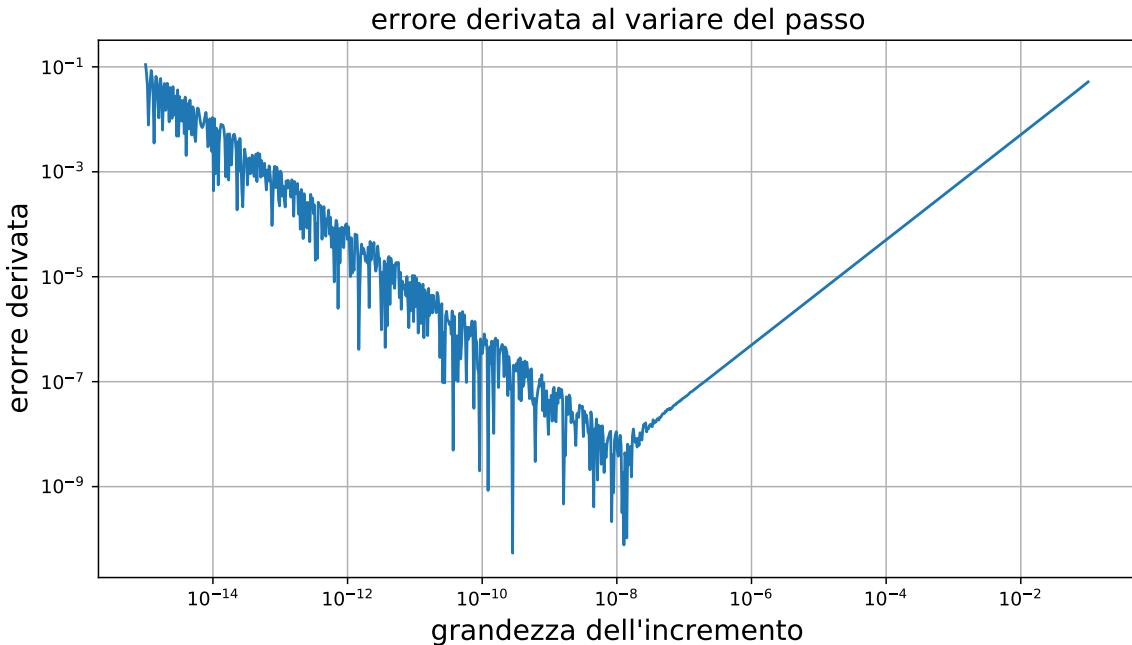
quindi possiamo trovare la soluzione al tempo $t+dt$, sapendo quella al tempo t , e andando a ritroso, grazie alla condizione iniziale possiamo avere tutta la soluzione. Inoltre nella g non compare la dipendenza da $f(t+dt)$ ma solo da $f(t)$, per questo il metodo è chiamato esplicito. Importante notare che la discretizzazione che abbiamo deciso di usare è del tutto arbitraria (la più semplice possibile che ci da appunto il metodo di Eulero), e anche il passo dt è un argomento delicato, vediamo perché.

C.1 Calcolo delle derivate

Vediamo un esempio di come varia l'errore nel calcolo di una derivata numerica al variare dell'incremento:

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 def f(x):
5     """
6         funzione di cui calcolare la derivata
7     """
8     return np.exp(x)
9
10 def df(f, x, h):
11     """
12         derivata di f
13     """
14     dy = (f(x+h) - f(x))/h
15     return dy
16
17 #array del passo di discretizzazione
18 h = np.logspace(-15, -1, 1000)
19
20 plt.figure(1)
21 plt.title('errore derivata al variare del passo', fontsize=15)
22 plt.ylabel('errore derivata', fontsize=15)
23 plt.xlabel("grandezza dell'incremento", fontsize=15)
24
25 plt.plot(h, abs(df(f, 0, h)-f(0)))
26
27 plt.xscale('log')
28 plt.yscale('log')
29 plt.grid()
30 plt.show()
```



vediamo quindi come un passo di 10^{-14} che intuitivamente potremmo credere migliore da lo stesso errore di un passo di 10^{-2} . Inoltre tutta la trattazione è immancabilmente affetta dal metodo di approssimazione che usiamo. Un algoritmo di alto ordine darà risultati migliori con un passo grande piuttosto che uno piccolo. Vediamo diversi modi di approssimare una derivata prima:

$$f' = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} \quad (94)$$

$$f' = \frac{f(x) - f(x - h)}{h} \quad (95)$$

$$f' = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h} \quad (96)$$

$$f' = \frac{-3f(x) + 4f(x + h) - f(x + 2h)}{2h} \quad (97)$$

$$f' = \frac{3f(x) - 4f(x - h) + f(x - 2h)}{2h} \quad (98)$$

$$f' = \frac{-f(x + 2h) + 8f(x + h) - 8f(x - h) + f(x - 2h)}{12h} \quad (99)$$

Rispettivamente i primi due primo ordine, i seguenti tre del secondo ordine e il terzo del quarto ordine. Vediamo un piccolo codice nel quale vi potete divertire a cambiare la grandezza passo per rendervi conto di quanto dicevamo:

```

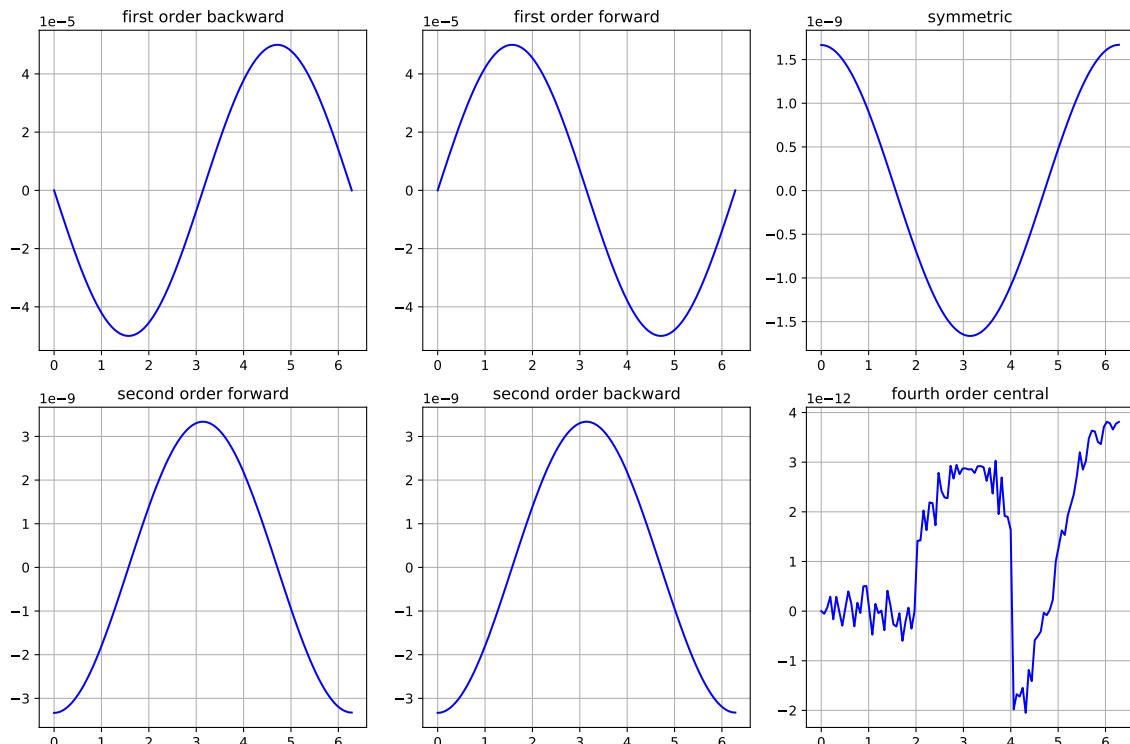
1 """
2 Code that compiles some method of calculating a derivative to various orders of accuracy
3 """
4 import numpy as np
5 import matplotlib.pyplot as plt
6
7
8 def d1b(f, x0, dx):
9     '''first order, backward derivative
10    '''
11    dfdx = (f(x0) - f(x0-dx))/dx
12    return dfdx
13
14 def d1f(f, x0, dx):
15     '''first order, forward derivative
16    '''
17    dfdx = (f(x0+dx) - f(x0))/dx
18    return dfdx
19
20 def d2c(f, x0, dx):

```

```

21     ''' second order, symmetric derivative
22     '''
23     dfdx = (f(x0+dx) - f(x0-dx))/(2.0*dx)
24     return dfdx
25
26 def d2f(f, x0, dx):
27     ''' second order forward derivative
28     '''
29     dfdx = ( - 3.0*f(x0) + 4.0*f(x0+dx) - f(x0+2.0*dx) )/(2.0*dx)
30     return dfdx
31
32 def d2b(f, x0, dx):
33     ''' second order backward derivative
34     '''
35     dfdx = ( 3.0*f(x0) - 4.0*f(x0-dx) + f(x0-2.0*dx) )/(2.0*dx)
36     return dfdx
37
38 def d4c(f, x0, dx):
39     ''' fourth order centered derivative
40     '''
41     dfdx = ( -f(x0+2*dx) + 8.0*f(x0+dx) - 8.0*f(x0-dx) + f(x0-2*dx) )/(12.0*dx)
42     return dfdx
43
44 #=====
45 # Plot
46 #=====
47
48 plt.figure(1, figsize=(12, 8))
49 x = np.linspace(0, 2*np.pi, 100)
50 f = np.sin
51 g = np.cos
52 h = 1e-4
53 Df = [d1b, d1f, d2c, d2f, d2b, d4c]
54 l = ['first order backward', 'first order forward', 'symmetric',
55       'second order forward', 'second order backward', 'fourth order central']
56
57 for i, df in enumerate(Df):
58     plt.subplot(2, 3, i+1)
59     plt.title(l[i])
60     plt.plot(x, g(x)-np.array([df(f, t, h) for t in x]), 'blue')
61     plt.grid()
62
63 plt.tight_layout()
64 plt.show()

```

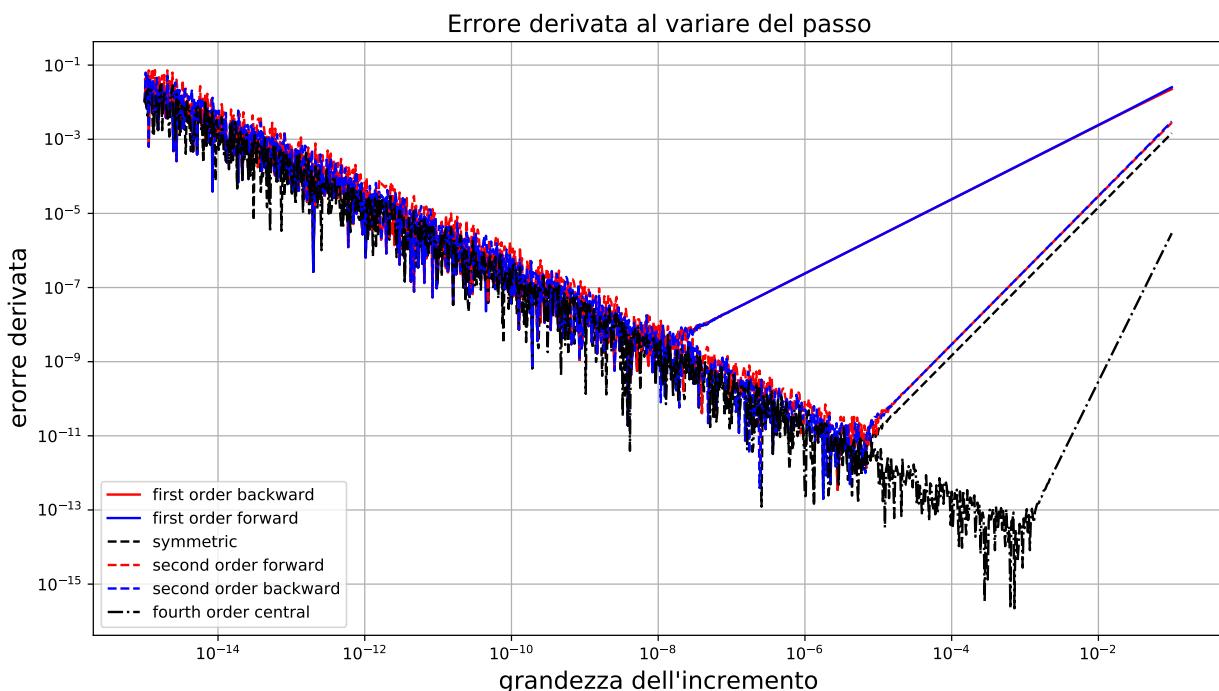


Se aggiungiamo al codice precedente queste poche righe possiamo effettuare lo stesso plot fatto inizialmente:

```

1 #array del passo di discretizzazione
2 h = np.logspace(-15, -1, 1000)
3 s = ['-', '--', '---', '...', '...', '-.']
4 c = ['r', 'b', 'k', 'r', 'b', 'k']
5 plt.figure(2)
6 plt.title('Errore derivata al variare del passo', fontsize=15)
7 plt.ylabel('errore derivata', fontsize=15)
8 plt.xlabel("grandezza dell'incremento", fontsize=15)
9
10 for i, df in enumerate(Df):
11     plt.plot(h, abs(df(f, 0.5, h)-g(0.5)), label=l[i], linestyle=s[i], color=c[i])
12
13 plt.xscale('log')
14 plt.yscale('log')
15 plt.legend(loc='best')
16 plt.grid()
17 plt.show()

```



Potete divertirvi a prendere le parti finali delle curve e calcolare i coefficienti angolari, se c'è giustizia a questo mondo, essi saranno parenti di 1, 2 e 4.

C.2 Esponenziale

Passiamo ora alle equazioni differenziali vere e proprie. Cominciamo con il problema di Cauchy:

$$\begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = x(t) \\ x(t=0) = 1 \end{cases}$$

Abbiamo una funzione incognita $x(t)$ di cui sappiamo che la derivata è uguale a se stessa e che calcolata in zero restituisce uno. Nella fattispecie la soluzione è semplice, si tratta di un esponenziale crescente, tuttavia vediamo come risolvere numericamente tale equazione.

```

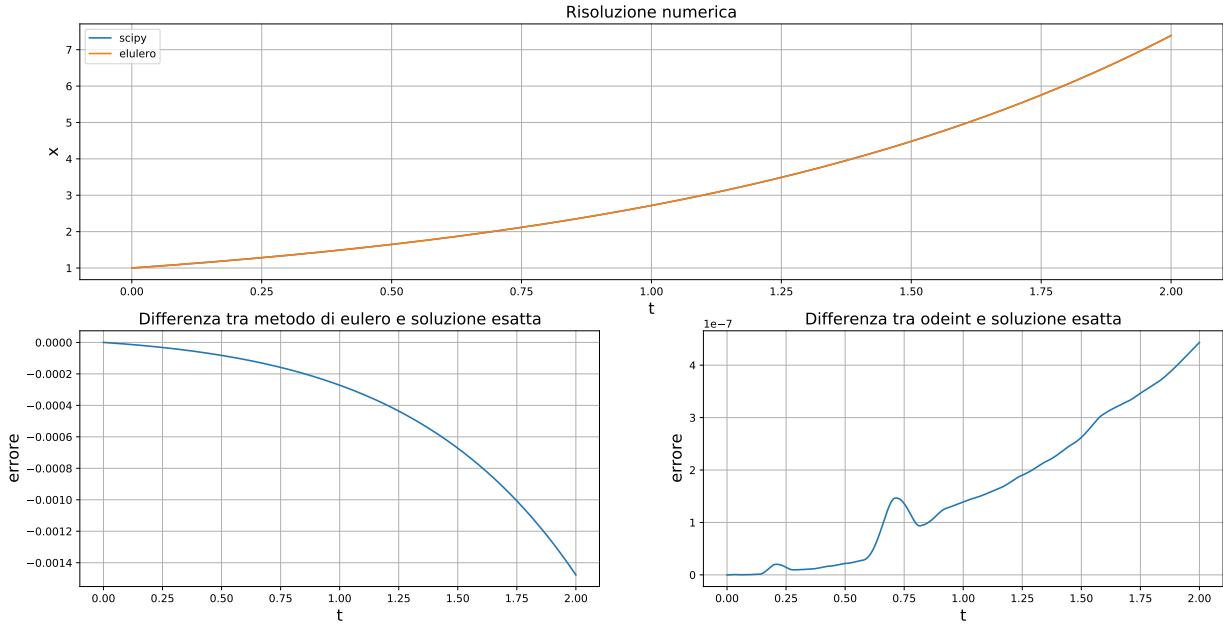
1 import numpy as np
2 import scipy.integrate
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 #parametri
6 x0 = 1      #condizione iniziale
7 tf = 2      #fino a dove integrare
8 N = 10000   #numero di punti

```

```

9
10 #odeint
11 def ODE_1(y, t):
12     """
13     equazione da risolvere per odeint
14     """
15     x = y
16     dydt = x
17     return dydt
18
19
20 y0 = [x0] #x(0)
21 t = np.linspace(0, tf, N+1)
22 sol = scipy.integrate.odeint(ODE_1, y0, t)
23
24 x_scipy = sol[:,0]
25
26 #metodo di eulero
27 def ODE_2(x):
28     """
29     equazione da risolvere per eulero
30     """
31     x_dot = x
32     return x_dot
33
34 def eulero(N, tf, x0):
35     """
36     si usa che  $dx/dt = (x[i+1]-x[i])/dt$ 
37     che e' praticamente la definizione di rapporto incrementale
38     discretizzata la derivata sappiamo a cosa egualiarla
39     perche  $dx/dt = g(x(t))$  nella fattispecie  $g(x) = x$ 
40     quindi discretizzando tutto:
41      $(x[i+1]-x[i])/dt = x[i]$ 
42     da cui si isola  $x[i+1]$ 
43     """
44     dt = tf/N #passo di integrazione
45     x = np.zeros(N+1)
46     x[0] = x0
47
48     for i in range(N):
49         x[i+1] = x[i] + dt*ODE_2(x[i])
50
51     return x
52
53 x_eulero = eulero(N, tf, x0)
54
55 plt.figure(1)
56
57 ax1 = plt.subplot(211)
58 ax1.set_title('Risoluzione numerica', fontsize=15)
59 ax1.set_xlabel('t', fontsize=15)
60 ax1.set_ylabel('x', fontsize=15)
61 ax1.plot(t, x_scipy, label='scipy')
62 ax1.plot(t, x_eulero, label='elulero')
63 ax1.legend(loc='best')
64 ax1.grid()
65
66 ax2 = plt.subplot(223)
67 ax2.set_title('Differenza tra metodo di eulero e soluzione esatta', fontsize=15)
68 ax2.set_xlabel('t', fontsize=15)
69 ax2.set_ylabel('errore', fontsize=15)
70 ax2.plot(t, x_eulero-np.exp(t))
71 ax2.grid()
72
73
74 ax3 = plt.subplot(224)
75 ax3.set_title('Differenza tra odeint e soluzione esatta', fontsize=15)
76 ax3.set_xlabel('t', fontsize=15)
77 ax3.set_ylabel('errore', fontsize=15)
78 ax3.plot(t, x_scipy-np.exp(t))
79 ax3.grid()
80
81 plt.show()

```



Vediamo che entrambi i metodi sembrano funzionare bene, scipy usa un integratore migliore rispetto ad eulero infatti vediamo che la differenza fra le due soluzioni è dell'ordine di 10^{-7} , ma costruirne uno analogo non è difficile, si può provare con i metodi di Runge-kutta; famoso e molto usato è quello di ordine 4. Abbiamo risolto un'ode del primo ordine, e per ordine più elevati la cosa è analoga perché con cambi di variabili si può abbassare l'ordine fino ad ottenere un sistema di ode accoppiate di ordine 1;

C.3 Pendolo

Vediamo un esempio sta volta con un'equazione che non sappiamo risolvere:

$$\begin{cases} \frac{d^2x(t)}{dt^2} = -\frac{l}{g} \sin(x(t)) \\ \frac{dx(t)}{dt}|_{t=0} = v_0 \\ x(t=0) = x_0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{dx(t)}{dt} = v(t) \\ \frac{dv(t)}{dt} = -\frac{l}{g} \sin(x(t)) \\ x(t=0) = x_0 \\ v(t=0) = v_0 \end{cases}$$

È la famosa equazione del pendolo semplice che approssimata dà luogo all'oscillatore armonico ovvero a tutta la fisica. Vediamo come si modifica il codice di sopra ora:

```

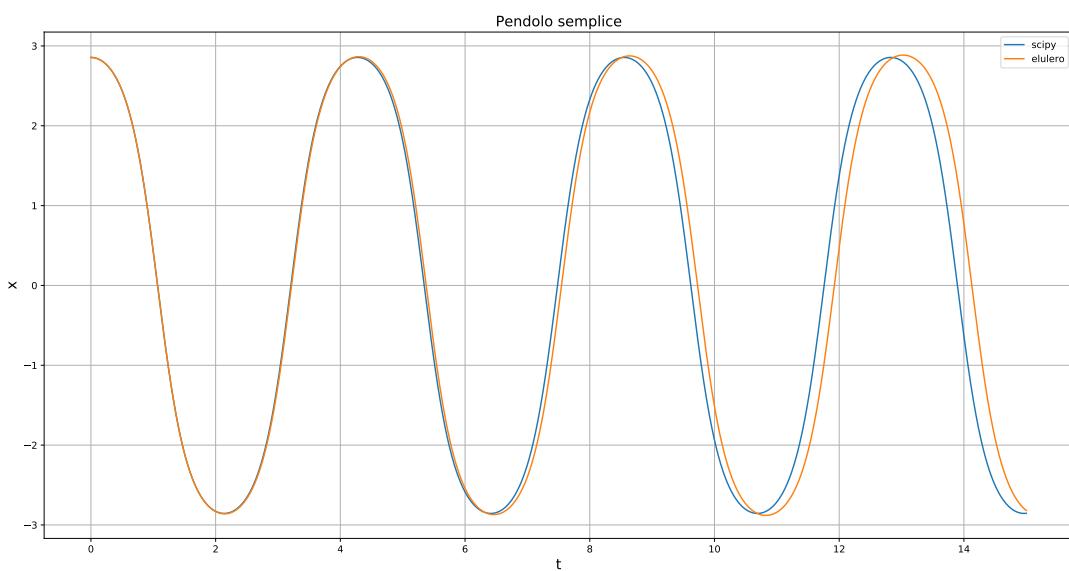
1 import numpy as np
2 import scipy.integrate
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 #parametri
6 N = 100000      #numero di punti
7 l = 1            #lunghezza pendolo
8 g = 9.81         #accelerazione di gravità
9 o0 = g/l         #frequenza piccole oscillazioni
10 v0 = 0           #condizioni iniziali velocità
11 x0 = np.pi/1.1  #condizioni iniziali posizione
12 tf = 15          #fin dove integrare
13
14 #odeint
15 def ODE_1(y, t):
16     """
17         equazione da risolvere per odeint
18     """
19     theta, omega = y
20     dydt = [omega, -o0*np.sin(theta)]
21     return dydt
22
23
24 y0 = [x0, v0] #x(0), x'(0)
25 t = np.linspace(0, tf, N+1)

```

```

26 sol = scipy.integrate.odeint(ODE_1, y0, t)
27
28 x_scipy = sol[:,0]
29
30 #metodo di eulero
31 def ODE_2(x, v):
32     """
33     equazione da risolvere per eulero
34     """
35     x_dot = v
36     v_dot = -o0*np.sin(x)
37     return x_dot, v_dot
38
39 def eulero(N, tf, x0, v0):
40     """
41     si usa che  $dx/dt = (x[i+1]-x[i])/dt$ 
42     che e' praticamente la definizione di rapporto incrementale
43     discretizzata la derivata sappiamo a cosa egualiarla
44     perche  $dx/dt = g(x(t))$  nella fattispecie  $g(x) = x$ 
45     quindi discretizzando tutto:
46      $(x[i+1]-x[i])/dt = x[i]$ 
47     da cui si isola  $x[i+1]$ 
48     """
49     dt = tf/N #passo di integrazione
50     x = np.zeros(N+1)
51     v = np.zeros(N+1)
52     x[0], v[0] = x0, v0
53
54     for i in range(N):
55         dx, dv = ODE_2(x[i], v[i])
56         x[i+1] = x[i] + dt*dx
57         v[i+1] = v[i] + dt*dv
58
59     return x, v
60
61 x_eulero, _ = eulero(N, tf, x0, v0)
62
63
64 plt.figure(1)
65
66 plt.title('Pendolo semplice')
67 plt.xlabel('t')
68 plt.ylabel('x')
69 plt.plot(t, x_scipy, label='scipy')
70 plt.plot(t, x_eulero, label='eulero')
71 plt.legend(loc='best')
72 plt.grid()
73
74 plt.show()

```



Dal grafico vediamo le due soluzioni distaccarsi, questo è dovuto al fatto che l'integrazione con il metodo di eulero non è delle migliori perché è un metodo del primo ordine e il passo di integrazione non è sufficientemente piccolo; si potrebbe fare tutta una trattazione su come scegliere il passo di integrazione anche più approfondita di quanto abbiamo trattato prima, inoltre menzioniamo che esistono poi algoritmi adattivi in cui il valore del passo può cambiare durante l'integrazione.

C.4 Animazione

Abbiamo simulato il movimento del pendolo semplice e abbiamo visto il grafico dell'ampiezza in funzione del tempo ma sarebbe carino riprodurre il movimento del pendolo e creare un'animazione semplice ma comunque realistica. Grazie a matplotlib possiamo farlo senza troppi problemi. Per quanto visto sopra useremo come integratore la funzione "odeint()".

```

1 import numpy as np
2 import scipy.integrate
3 from matplotlib import animation
4 import matplotlib.pyplot as plt
5
6 #parametri
7 N = 10000      #numero di punti
8 l = 1           #lunghezza pendolo
9 g = 9.81        #accelerazione di gravità
10 o0 = g/l       #frequenza piccole oscillazioni
11 v0 = 0          #condizioni iniziali velocità
12 x0 = np.pi/1.1 #condizioni iniziali posizione
13 tf = 15         #fin dove integrare
14
15 #odeint
16 def ODE_1(y, t):
17     """
18     equazione da risolvere per odeint
19     """
20     theta, omega = y
21     dydt = [omega, -o0*np.sin(theta)]
22     return dydt
23
24
25 y0 = [x0, v0] #x(0), x'(0)
26 t = np.linspace(0, tf, N+1)
27 sol = scipy.integrate.odeint(ODE_1, y0, t)
28
29 #passaggio in cartesiane
30 theta = sol[:,0]
31 x = l*np.sin(theta)
32 y = -l*np.cos(theta)
33
34 #grafico e bellurie
35 fig = plt.figure(1, figsize=(10, 6))
36 plt.suptitle('Pendolo semplice')
37 ax = fig.add_subplot(121)
38 time_template = 'time = %.1fs'
39 time_text = ax.text(0.05, 0.9, '', transform=ax.transAxes)
40 plt.xlim(-2, 2)
41 plt.ylim(-2, 2)
42 plt.gca().set_aspect('equal', adjustable='box')
43
44 #coordinate del perno e della pallina
45 xf, yf = [0,x[0]], [0,y[0]]
46
47 line1, = plt.plot(xf, yf, linestyle='-', marker='o', color='k')
48
49 plt.grid()
50
51 def animate(i):
52     """
53     funzione che a ogni i aggiorna le coordinate della pallina
54     """
55     xf[1] = x[i]
56     yf[1] = y[i]
57     line1.set_data(xf, yf)
58     time_text.set_text(time_template % (i*t[1]))
59
60     return line1, time_text
61

```

```
62 #funzione che fa l'animazione vera e propria
63 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=range(0, len(t), 5), interval=1, blit=True
64     , repeat=True)
65 plt.subplot(122)
66 plt.ylabel(r'$\theta$(t) [rad]')
67 plt.xlabel('t [s]')
68 plt.plot(t, theta)
69 plt.grid()
70 plt.show()
```

Provate da voi ad eseguire il codice e vedrete il pendolo oscillare.

D Risolvere numericamente le ODE: BVP

In questa sezione si vuole invece introdurre i problemi con condizioni al bordo, (boundary value problem BVP). Questo tipo di problemi sono un po' più delicati in quanto la soluzione non è detto che sia unica. Due metodi famosi per risolvere questi problemi sono il metodo di shooting, utile anche per equazioni come l'equazione di Schrödinger, e il metodo di rilassamento.

D.1 Shooting

Supponiamo di avere il seguente problema al bordo:

$$\begin{cases} \ddot{y}(t) = f(t, y(t), \dot{y}(t)) \\ y(t_0) = y_0 \\ y(t_1) = y_1 \end{cases} \quad (100)$$

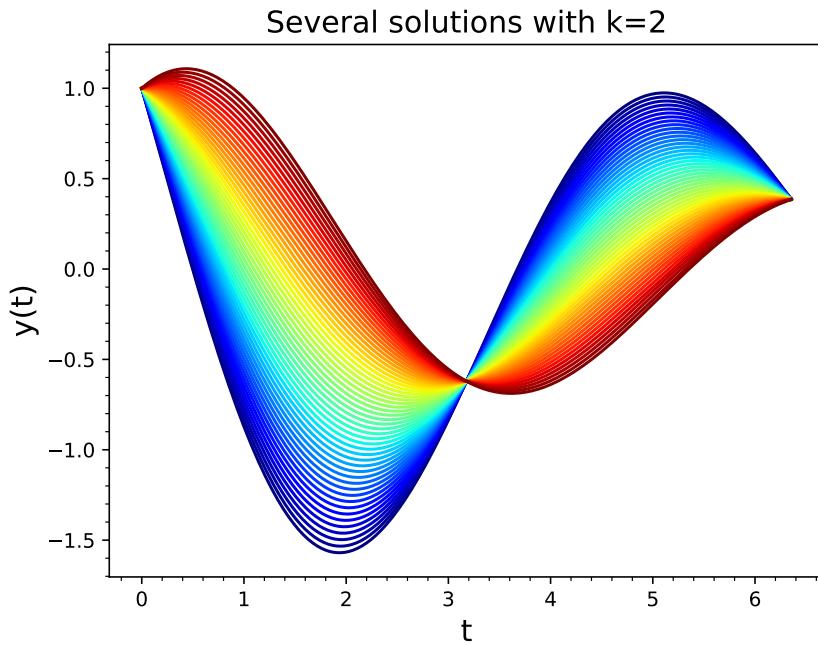
Quel che si fa è trasformare tale problema in un problema ai valori iniziali dipendenti da un parametro, chiamiamolo 's':

$$\begin{cases} \ddot{y}(t) = f(t, y(t), \dot{y}(t)) \\ y(t_0) = y_0 \\ \dot{y}(t_0) = s \end{cases} \quad (101)$$

Per cui detta $F(s) = y(t_1, s) - y_1$, ci basta trovare lo zero di questa funzione e avremo la condizione iniziale s che ci dà il valore al bordo da noi desiderato. Consideriamo la seguente equazione differenziale:

$$\ddot{y}(t) + \gamma \dot{y}(t) + \omega_0^2 y(t) = 0 \quad , \quad (102)$$

Si può vedere che le soluzioni di questa equazione al variare della condizione iniziale sulla derivata prima assumono lo stesso valore in dati istanti di tempo: $t_k = k\pi/\omega$ dove k è un generico numero naturale e $\omega^2 = \omega_0^2 - (\gamma/2)^2$. Vediamo queste soluzioni con $k = 2$:



Mi spiace per gli amici daltonici, ma ammetto che questo grafico è stato fatto solo perché bellino vederlo arcobaleno. Come al solito non riportiamo tutto il codice ma solo le due funzioni principali, sia perché il resto del codice non è così istruttivo, sia per invogliarvi a scrivere da voi. In ogni caso però nella cartella sarà presente tutto.

Abbiamo detto quindi che ci siamo ricondotti a risolvere una ode come nella sezione di sopra; sfruttiamo l'occasione per introdurre un nuovo metodo di integrazione: un predittore correttore del quarto ordine, Adams-Bashforth-Moulton. Esso fondamentalmente è l'unione di un metodo esplicito, con cui si fa una prima stima

della soluzione, la predizione, e poi si inserisce il valore all'interno di un metodo implicito per ottenere il valore finale, la correzione. Detta f la funzione dell'equazione differenziale:

$$\bar{y}_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(55f(t_i, y_i) - 59f(t_{i-1}, y_{i-1}) + 37f(t_{i-2}, y_{i-2}) - 9f(t_{i-3}, y_{i-3})) \quad \text{A.B. predico,} \quad (103)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9f(t_{i+1}, \bar{y}_{i+1}) + 19f(t_i, y_i) - 5f(t_{i-1}, y_{i-1}) + f(t_{i-2}, y_{i-2})) \quad \text{A.M. correggo.} \quad (104)$$

Può ora sorgere un dubbio, come otteniamo i primi tre valori necessari per fare il primo passo di predizione? Dato che si tratta di un integratore di quarto ordine usiamo per i primi tre un Runge-Kutta di ordine 4 che brevemente riportiamo:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (105)$$

dove:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_n, y_n) \\ k_2 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_1 h\right) \\ k_3 &= f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_2 h\right) \\ k_4 &= f(t_n + h, y_n + k_3 h) \end{aligned}$$

Passiamo ora al codice:

```

1 #=====
2 # Integration: Adams-Bashforth-Moulton predictor and corrector of order 4
3 #=====
4
5 def AMB4(num_steps, t0, tf, f, init, args=()):
6     """
7         Integrator with Adams-Bashforth-Moulton
8         predictor and corrector of order 4
9
10    Parameters
11    -----
12        num_steps : int
13            number of point of solution
14        t0 : float
15            lower bound of integration
16        tf : float
17            upper bound of integration
18        f : callable
19            function to integrate, must accept vectorial input
20        init : 1darray
21            array of initial condition
22        args : tuple, optional
23            extra arguments to pass to f
24
25    Return
26    -----
27        X : array, shape (num_steps + 1, len(init))
28            solution of equation
29        t : 1darray
30            time
31    """
32    #time steps
33    dt = tf/num_steps
34
35    X = np.zeros((num_steps + 1, len(init))) #matrice delle soluzioni
36    t = np.zeros(num_steps + 1) #array dei tempi
37
38    X[0, :] = init #condizioni iniziali
39    t[0] = t0
40
41    #primi passi con runge kutta
42    for i in range(3):
43        xk1 = f(t[i], X[i, :], *args)
44        xk2 = f(t[i] + dt/2, X[i, :] + xk1*dt/2, *args)
45        xk3 = f(t[i] + dt/2, X[i, :] + xk2*dt/2, *args)
46        xk4 = f(t[i] + dt, X[i, :] + xk3*dt, *args)
47        X[i + 1, :] = X[i, :] + (dt/6)*(xk1 + 2*xk2 + 2*xk3 + xk4)
48        t[i + 1] = t[i] + dt

```

```

49
50     # Adams-Bashforth-Moulton
51     i = 3
52     AB0 = f(t[i], X[i, :], *args)
53     AB1 = f(t[i-1], X[i-1, :], *args)
54     AB2 = f(t[i-2], X[i-2, :], *args)
55     AB3 = f(t[i-3], X[i-3, :], *args)
56
57     for i in range(3,num_steps):
58         #predico
59         X[i + 1, :] = X[i, :] + dt/24*(55*AB0 - 59*AB1 + 37*AB2 - 9*AB3)
60         t[i + 1] = t[i] + dt
61         #correggo
62         AB3 = AB2
63         AB2 = AB1
64         AB1 = AB0
65         AB0 = f(t[i+1], X[i + 1, :], *args)
66
67         X[i + 1, :] = X[i, :] + dt/24*(9*AB0 + 19*AB1 - 5*AB2 + AB3)
68
69     return X, t
70
71 #####
72 # Binary research to find the right solution with shooting method
73 #####
74
75 def SH(N, x0, start, xi, xf, step, x1, tau, f, args=()):
76     """
77     Function that calculates zeros with the bisection method
78     Parameters
79     -----
80     N : Integer
81         number of integration steps.
82     x0 : float
83         initial condition on position.
84     start : float
85         initial condition on speed.
86     xi : float
87         initial time of integration.
88     xf : float
89         final time of integration.
90     step : float
91         start increment
92     x1 : float
93         boundary condition of solution
94     tau : float
95         tollerance on find value
96     f : callable
97         function to integrate, must accept vectorial input
98     args : tuple, optional
99         extra arguments to pass to f
100    Returns
101    -----
102    m : float
103        ideal intial condition for speed
104    sol : one dimensional array
105        solution of the equation
106    """
107    a = start
108    sol = AMB4(N, xi, xf, f, init=(x0, a), args=args)
109    k = sol[0][-1, 0] - xi
110    while True:
111        b = a + step
112        sol = AMB4(N, xi, xf, f, init=(x0, b), args=args)
113        D = sol[0][-1, 0] - x1
114        if (k*D)<0.0:
115            break
116        k = D
117        a = b
118    while abs(a - b)>tau:
119        m = (a + b)/2.0
120        sol = AMB4(N, xi, xf, f, init=(x0, m), args=args)
121        M = sol[0][-1, 0] - x1
122        if (M*k)>0 :
123            k = M
124            a = m

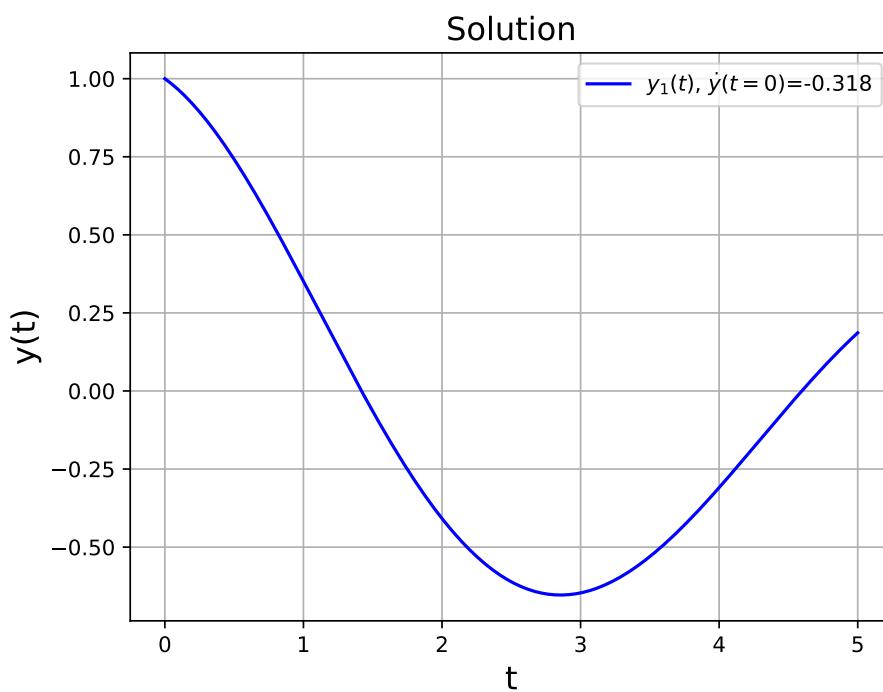
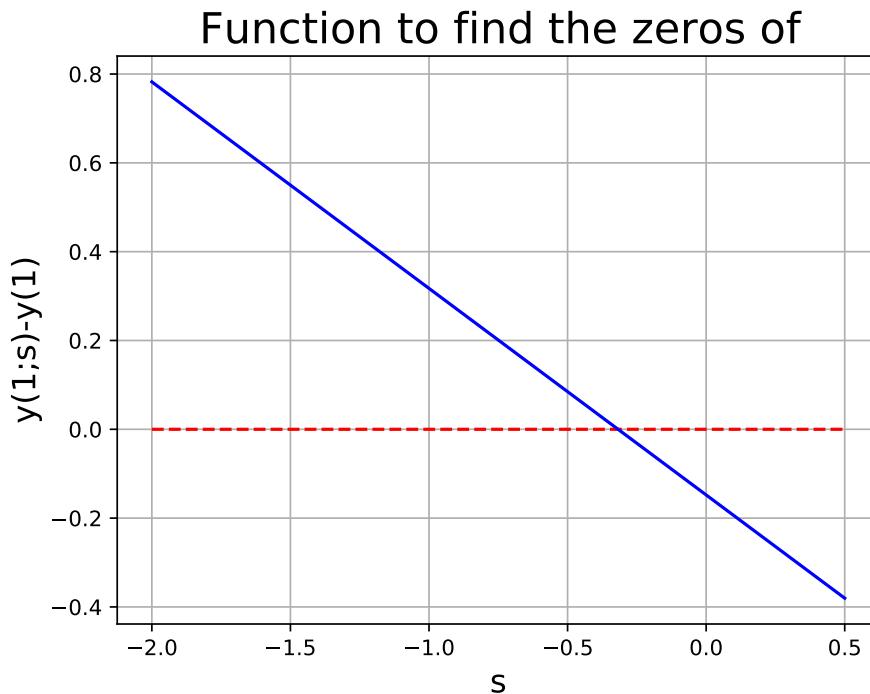
```

```

125     else :
126         D = M
127         b = m
128     return m, sol

```

scegliendo ora come tempo finale $tf = 5$ e il valore al bordo $x1 = 0.1862$, in modo che la soluzione sia unica, otteniamo:



D.2 Relaxation

Un altro metodo per risolvere equazioni di questo tipo è il metodo di rilassamento, consideriamo come prima, un esempio del tipo precedente:

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = f(t, y(t), \dot{y}(t)) \\ y(t_0) = y_0 \\ y(t_1) = y_1 \end{cases} \quad (106)$$

Discretizzando la prima equazione abbiamo su una griglia di N punti nella variabile indipendente t abbiamo:

$$\frac{y[i-1] - 2y[i] + y[i+1]}{h^2} = f(x[i], y[i], \frac{y[i-1] - y[i+1]}{2h}) \quad , \quad (107)$$

dove usiamo la derivata simmetrica per avere tutto al secondo ordine; imponendo le condizioni al bordo otteniamo il seguente sistema:

$$P\mathbf{y} = f(\mathbf{y}) - b \quad , \quad (108)$$

in forma matriciale abbiamo

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y[0] \\ y[1] \\ \vdots \\ y[N-1] \\ y[N-2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f[0] \\ f[1] \\ \vdots \\ f[N-1] \\ f[N-2] \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} y_0/h^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ y_1/h^2 \end{pmatrix} . \quad (109)$$

Però f è una generica funzione quindi fondamentalmente abbiamo un sistema di equazioni non lineare da risolvere nella forma:

$$H(\mathbf{y}) = 0 \quad \text{con} \quad H(\mathbf{y}) = P\mathbf{y} - f(\mathbf{y}) + b \quad , \quad (110)$$

quindi sappiamo bene che la soluzione la possiamo ottenere linearizzando H con il metodo di newton, si arriva dunque ad un'espressione iterativa:

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n - \left[P - \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right]^{-1} [P\mathbf{y} - f(\mathbf{y}) + b] \quad , \quad (111)$$

dove $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$ è lo jacobiano di f . Come guess iniziale possiamo provare una funzione generica in linea di principio, certamente più siamo vicini, più il metodo converge senza problemi. La cosa più semplice è una retta che passa per i punti al bordo:

$$y_{\text{initial guess}} = (t - t_0) \frac{y_1 - y_0}{t_1 - t_0} + y_0 \quad . \quad (112)$$

Dove t è il nostro array che va da t_0 a t_1 in N passi. Scelta la guess, il sistema piano piano rilassa verso la soluzione cercata. Come criterio di stop calcoliamo la distanza tra le soluzioni ad ogni iterazione:

$$R = \sqrt{\sum (\mathbf{y}^{n+1} - \mathbf{y}^n)^2} \quad , \quad (113)$$

se questa quantità è minore di una certa tolleranza allora il programma termina. Vediamo ora il codice:

```

1 import numpy as np
2 from scipy.sparse import diags
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 #=====
6 # Function for the solution of boundary value problem via relaxation
7 #=====
8
9 def relax(f, y0, y1, x, init, args=(), tol=1e-8, max_iter=100, dense_output=False):
10     """
11     Implementation of relaxation method for ODE 2pt-BVP.
12     The equation must be in the form: y''(x) = f(x, y, y')
13
14     Parameters
15     -----
16     f : callable
17         A vector function of differential equation like: y'' = f
18     y0, y1 : float
19         required value of solution at boundary
20     x : 1darray

```

```

21     array of position, or time, independent variable
22     init : 1darray
23         Initial guess.
24     args : tuple, optional
25         Extra arguments passed to f
26     tol :float, optional, default 1e-8
27         required tollerance
28     max_iter : int, optional, default 100
29         after max_it iteration the code stop raising an exception
30     dense_output : bool, optional, default False
31         true for full and number of iteration
32
33     Return
34 -----
35     yo : 1darray
36         solution of differential equation
37         if dense_outupt=True all iteration are returned
38         in a matrix called Y and also the number of iteration
39     '',
40
41     # parameter of discretizzation
42     N = len(x)
43     h = np.diff(x)[0]
44     # second derivative matrix
45     d2 = diags([1, -2, 1], [-1, 0, 1], shape=(N, N)).toarray()
46     d2 = d2/h**2
47     # bound values required
48     yb = [y0/h**2] + [0]*int(N-2) + [y1/h**2]
49     yb = np.array(yb)
50     # init guess from imput
51     yo = init
52     # interation count
53     it = 0
54     #for full output
55     Y = []
56     if dense_output : Y.append(yo)
57
58     while True:
59         # for jacobian computation
60         df = np.zeros(d2.shape)
61         s = np.zeros(N)
62
63         for i in range(N):
64             s[i] = 1
65             yr, yl = yo + h*s, yo - h*s
66             df[i, :] = (f(x, yr, h, *args) - f(x, yl, h, *args)) / (2*h)
67             s[:] = 0
68
69         yn = yo - np.linalg.solve(d2-df, d2@yo - f(x, yo, h, g, o02) + yb)
70         # residual
71         R = np.sqrt(np.sum((yn-yo)**2))
72         if R < tol:
73             yo = yn
74             break
75
76         if it > max_iter:
77             raise Exception("to many iteration")
78
79         #update
80         yo = yn
81         it = it + 1
82         if dense_output : Y.append(yo)
83
84     if dense_output:
85         return Y, it
86     else:
87         return yo
88
89 #=====
90 # RHS of differential equations y' = f
91 #=====
92 def f(t, y, h, g, o02):
93     ''
94     RHS of differential equations y' = f
95     f can be a function non only of y but also y' so
96     we use a second order approximation to compute y'

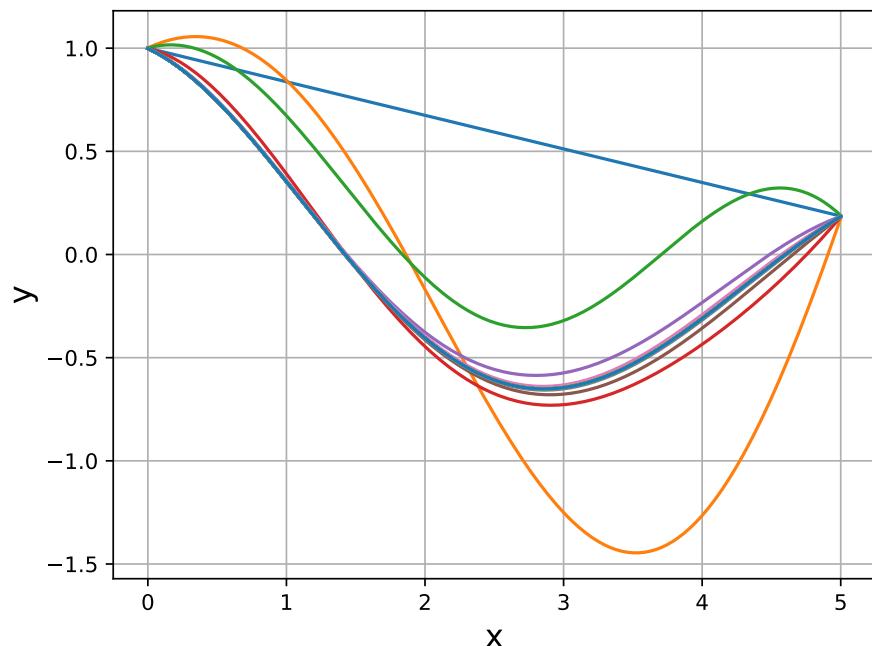
```

```

97     Parameter
98     -----
99
100    t : 1darray
101        independent variable
102    y : 1darray
103        solution or guess of solution
104    h : float
105        step's size for derivative computation
106    g, o02 : float
107        parameter of our differential equation
108
109    Return
110    -----
111    y_ddot : float
112        RHS of equation computed on a grid
113        ,
114    y_dot    = (y[2:] - y[:-2])/(2*h)          # second order derivative
115    y_dot_0 = (- 3*y[0] + 4*y[1] - y[2])/ (2*h) # second order derivative on left bound
116    y_dot_n = ( 3*y[-1] - 4*y[-2] + y[-3])/ (2*h) # second order derivative on right bound
117    # join everything together to get the second order derivative
118    y_dot = np.insert(y_dot, 0, y_dot_0)
119    y_dot = np.insert(y_dot, len(y_dot), y_dot_n)
120
121    # equation to solve
122    y_ddot = -g*y_dot - o02*y
123
124    return y_ddot
125
126 ##### Main code and plot #####
127 # Main code and plot
128 #####
129
130 g      = 0.3      # damping factor
131 o02   = 1         # proper frequency squared
132 xi    = 0         # left end of the interval
133 xf    = 5         # right end of the interval
134 N     = 1000     # number of points
135 y0    = 1         # boundary condition on xi
136 y1    = 0.1862   # boundary condition on xf
137
138 x = np.linspace(xi, xf, N)
139 y = (x - xi) * (y1 - y0)/(xf - xi) + y0 # linear guess
140
141 Y, n = relax(f, y0, y1, x, y, args=(g, o02), dense_output=True)
142 print(f"{n} iterations required")
143
144 for y in Y:
145     plt.plot(x, y)
146
147 plt.title("Solution via relaxation method", fontsize=15)
148 plt.xlabel("x", fontsize=15)
149 plt.ylabel("y", fontsize=15)
150 plt.grid()
151 plt.show()
152
153 [Output]
154 30 iterations required

```

Solution via relaxation method



E Sistemi lineari

Spesso capita, come abbiamo visto sopra con il caso dei fit, di dover risolvere dei sistemi di equazioni o di invertire una matrice. Abbiamo un sistema del tipo:

$$Ax = b \quad (114)$$

dove

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

E.1 Metodo Gauss-Seidel

Detta L una matrice triangolare inferiore e U matrice triangolare superiore, con diagonale nulla tale che $A = L + U$

$$L = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (115)$$

Allora abbiamo:

$$Ax = b \quad (116)$$

$$(L + U)x = b \quad (117)$$

$$Lx + Ux = b \quad (118)$$

$$Lx = b - Ux \quad (119)$$

e quindi abbiamo in maniera iterativa:

$$x^{k+1} = L^{-1}(b - Ux^k) \quad (120)$$

e per la riga i -esima di x^{k+1} possiamo scrivere:

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^k \right) \quad (121)$$

Questo metodo converge solo per alcune caratteristiche della matrice A : A deve essere simmetrica definita positiva, oppure deve essere dominante diagonale ($|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \quad \forall i$). Esiste una versione modificata di questo metodo chiamata: successive over-relaxation (SOR)

E.2 Successive over-relaxation

Se ora scomponiamo A come $D + L + U$:

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (122)$$

Introducendo il parametro ω di overrelaxation l'algoritmo diventa:

$$x_i^{k+1} = (1 - \omega)x_i^k + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^k \right) \quad (123)$$

Vediamo quindi che per $\omega = 1$ recuperiamo il metodo precedente. Vediamo ora un esempio di codice e vedremo che due esecuzioni con ω diversi cambiano molto. In particolare $0 < \omega < 2$ e valori più vicini a due ne migliorano la convergenza.

```

1 import time
2 import numpy as np
3
4 def SOR(A, b, omg, tol=1e-6):
5     """
6         Implementation of successive over-relaxation method for solve A @ x = b;
7         A must be:
8             1) symmetric (i.e. A.T = A)
9             2) positive-definite (i.e. x.T@A@x > 0 for all non-zero x)
10            3) real.
11
12     Parameters
13     -----
14     A : 2darray
15         matrix of system.
16     b : 1darray
17         Ordinate or dependent variable values.
18     tol : float, optional
19         required tollerance default 1e-6
20
21     Return
22     -----
23     x : 1darray
24         solution of system
25     iter : int
26         number of iteration
27     """
28     x = np.zeros(len(b))
29     iter = 0
30     while True:
31
32         x_new = np.zeros(len(x))
33
34         for i in range(A.shape[0]):
35             s1 = np.dot(A[i, :i], x_new[:i])
36             s2 = np.dot(A[i, i + 1:], x[i + 1:])
37             x_new[i] = (1 - omg)*x[i] + omg*(b[i] - s1 - s2) / A[i, i]
38
39         res = np.sqrt(np.sum((A @ x_new - b)**2))
40         if res < tol:
41             break
42
43         x = x_new
44         iter += 1
45
46     return x, iter
47
48 if __name__ == "__main__":
49     np.random.seed(69420)
50     N = 20
51     A = np.random.normal(size=[N, N])
52     A = A.T @ A #per garantire la convergenza del metodo
53     b = np.random.normal(size=[N])
54
55     start = time.time()
56     x1, iter = SOR(A, b, 1.9, 1e-8)
57     print(f"number of iteration = {iter}")
58     print(f"Elapsed time = {time.time()-start}")
59
60     start = time.time()
61     x2 = np.linalg.solve(A, b)
62     print(f"Elapsed time = {time.time()-start}")
63
64     d = np.sqrt(np.sum((x1 - x2)**2))
65     print(f'difference with numpy = {d}')
66
67 [Output] (omg=1)
68 number of iteration = 10794
69 Elapsed time = 1.4843645095825195
70 Elapsed time = 0.0
71 difference with numpy = 4.5979072526656344e-07
72
73 [Output] (omg=1.9)
74 number of iteration = 2590
75 Elapsed time = 0.35565781593322754
76 Elapsed time = 0.0

```

```
77 difference with numpy = 2.1632731207202056e-08
```

E.3 Metodo del gradiente coniugato

Un altro modo per risolvere sistemi lineari, e che ci permette di far crescere la dimensione dalla matrice, è il metodo del gradiente coniugato. La matrice A come sopra deve essere definita positiva. L'algoritmo è iterativo e l'aggiornamento della posizione è fatto secondo la seguente regola:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \quad (124)$$

dove p_k è la direzione di discesa ed è scelto in modo che sia ortogonale rispetto al prodotto scalare indotto da A : $\langle p_j, p_k \rangle_A = 0, \forall j = 0, \dots, k-1$. Mentre α_k è la grandezza del passo, $\frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$. Vediamone l'implementazione:

```

1 """
2 Implementation and test for
3 conjugate gradient method
4 """
5
6 import time
7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 from scipy.sparse.linalg import cg
10
11
12 def conj_grad(A, b, tol=1e-6, dense_output=False):
13     """
14         Implementation of conjugate gradient method for solve A @ x = b
15         A must be:
16             1) symmetric (i.e. A.T = A)
17             2) positive-definite (i.e. x.T @ A @ x > 0 for all non-zero x)
18             3) real.
19
20     Parameters
21     -----
22     A : 2darray
23         matrix of system.
24     b : 1darray
25         Ordinate or dependent variable values.
26     tol : float, optional
27         required tollerance default 1e-6
28     dense_output : bool, optional
29         if True all iteration of th solution, error and number
30         of iteration are stored and reurned, default is False
31
32     Return
33     -----
34     x : 1darray
35         solution of system
36     err : float
37         error of solution
38
39     if dense_output :
40         s : 2darray
41             all iteration of solution
42         e : 1darray
43             error of all iteration,
44         iter : int
45             number of iteration
46
47 """
48
49 N = len(b)
50 x = np.zeros(N) #initia guess
51
52 r = b - A @ x    #residuals
53 p = r            #descent direction
54 r2 = sum(r*r)   #norm^2 residuals
55
56 if dense_output:
57     s = []
58     e = []
59     s.append(x)
60     e.append(np.sqrt(r2))
61
```

```

62     iter = 0
63
64     while True:
65
66         Ap = A @ p           #computation of
67         alpha = r2 / (p @ Ap) #descent's step
68
69         x = x + alpha * p    #update position
70         r = r - alpha * Ap   #update residuals
71
72         r2_new = sum(r*r)    #norm^2 new residuals
73         beta = r2_new/r2      #compute step for p
74
75         r2 = r2_new    #update norm
76
77         if dense_output:
78             s.append(x)
79             e.append(np.sqrt(r2))
80
81         if np.sqrt(r2_new) < tol : #break condition
82             break
83
84         p = r + beta * p    #update p
85         iter += 1
86
87         if not dense_output:
88             err = np.sqrt(r2_new)
89             return x, err
90         else:
91             return np.array(s), np.array(e), iter
92
93
94 if __name__ == '__main__':
95
96     np.random.seed(69420)
97
98     N = 1000
99     P = np.random.normal(size=[N, N])
100    A = np.dot(P.T, P) #deve essere simmetrica e semidef >0
101    b = np.random.normal(size=[N])
102
103    t1 = time.time()
104    sol, err, iter = conj_grad(A, b, 1e-8, dense_output=True)
105    x1 = sol[-1]
106    t2 = time.time()
107    print(f'numero di iterazioni: {iter}')
108    print(f'Elapsed time          = {t2 - t1}')
109
110    t1 = time.time()
111    x2 = np.linalg.solve(A, b)
112    t2 = time.time()
113    print(f'Elapsed time numpy = {t2 - t1}')
114
115    t1 = time.time()
116    x3, exit_code = cg(A, b)
117    t2 = time.time()
118    print(f'Elapsed time scipy = {t2 - t1}')
119
120    print('confronto soluzioni')
121    print(f'distanza delle due soluzioni(cg-n) = {np.sqrt(np.sum((x1-x2)**2))}')
122    print(f'distanza delle due soluzioni(cg-s) = {np.sqrt(np.sum((x1-x3)**2))}')
123
124
125    plt.figure(1)
126    plt.grid()
127    plt.plot(abs(err))
128    plt.xlabel('iteration')
129    plt.ylabel('error')
130    #plt.xscale('log')
131    plt.yscale('log')
132    plt.show()
133
134 [Output]
135 numero di iterazioni: 1916
136 Elapsed time          = 1.2752277851104736
137 Elapsed time numpy = 0.03131294250488281

```

```
138 Elapsed time scipy = 1.1133522987365723
139 confronto soluzioni
140 distanza delle due soluzioni(cg-n) = 3.295292002340236e-08
141 distanza delle due soluzioni(cg-s) = 5.375356794116895e-07
```

Come è possibile vedere ne abbiamo guadagnato molto con questo metodo, risulta essere più veloce e non fatica non matrici molto grosse.

F Risolvere numericamente le PDE

Come si diceva sopra sono tantissimi i fenomeni fisici che sono descritti da un'equazione differenziale alle derivate parziali, e per non dilungarci nella trattazione, tratteremo solo due esempi: equazione del trasporto ed equazione del calore (per dimensioni 1+1), che possono essere viste come casi specifici della stessa equazione. I metodi che vedremo, sempre per dare giusto un'infarinatura e lasciare molto all'approfondimento personale, sono l'FCTS (forward time centered space) e il metodo di Lax. I metodi sono entrambi esplicativi, ovvero non richiedono la risoluzione di un'equazione algebrica, o di un sistema di equazioni. Sono presenti nei codici delle animazioni per meglio visualizzare la soluzione:

F.1 Equazione del trasporto

L'equazione di nostro interesse è:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

ovviamente ci serve una condizione iniziale $u(x, t = 0)$ per far evolvere il sistema. Per risolverlo si potrebbe pensare il metodo di euler (notazione: gli apici indicano la dipendenza temporale i pedici quella spaziale) :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = -v \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x}$$

dove per approssimare la derivata nello spazio si è utilizzata il metodo delle differenze centrali, più preciso, poiché date le condizioni iniziali sappiamo la soluzione per ogni x ad un dato tempo. Se però per le ode il metodo di Eulero, detto per le PDE: FCTS, funziona praticamente sempre, già in questo esempio il metodo fallisce. Per vederlo si esegue quella che è un'analisi di stabilità, ovvero si sostituisce nella formula di sopra una soluzione del tipo $u_j^n = \xi^n \exp ikj\Delta x$ e si vede che l'ampiezza ξ diverge per ogni scelta di Δt e Δx per risolvere si può usare il metodo di Lax nel quale in termine u_j^n viene sostituito dalla media dei punti spaziali immediatamente accanto:

$$u_j^{n+1} = \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2} - v\Delta t \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x}$$

Ora il metodo è stabile se $\frac{v\Delta t}{\Delta x} < 1$

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 import matplotlib.animation as animation
4
5 N = 100      #numero punti sulle x
6 T = 400      #numero di punti nel tempo
7 v = 1         #velocita' di propagazione
8 dt = 0.001   #passo temporale
9 dx = 0.01    #passo spaziale
10
11 alpha = v*dt/dx #<1
12 print(alpha)
13
14 Sol = np.zeros((N+1, T))
15 sol_v = np.zeros(N+1)
16 sol_n = np.zeros(N+1)
17
18 #condizione iniziale
19 q = 2*np.pi
20 x = np.linspace(0, (N+1)*dx, N+1)
21 sol_v = np.sin(q*x)
22 Sol[:, 0] = sol_v
23
24 #evoluzione temporale con lax
25 for time in range(1, T):
26     for j in range(1, N):
27         sol_n[j] = 0.5*(sol_v[j+1]*(1 - alpha)) + 0.5*(sol_v[j-1]*(1 + alpha))
28
29 #condizione periodiche al bordo
30 sol_n[0] = sol_n[N-1]
31 sol_n[N] = sol_n[1]
32
33 #aggiorno la soluzione
34 sol_v = sol_n
35
36 #conservo la soluzione per l'animazione
37 Sol[:, time] = sol_v
```

```

38
39
40 fig = plt.figure(1)
41 ax = fig.add_subplot(projection='3d')
42 ax.set_title('Equazione trasporto con Lax')
43 ax.set_ylabel('Distanza')
44 ax.set_xlabel('Tempo')
45 ax.set_zlabel('Ampiezza')
46
47 gridx, gridy = np.meshgrid(range(T), x)
48 ax.plot_surface(gridx, gridy, Sol)
49
50 plt.figure(2)
51
52 plt.title('Animazione soluzione', fontsize=15)
53 plt.xlabel('distanza')
54 plt.ylabel('ampiezza')
55 plt.grid()
56 plt.xlim(np.min(x), np.max(x))
57 plt.ylim(np.min(Sol[:,0]) - 0.1, np.max(Sol[:,0]) + 0.1)
58
59 line, = plt.plot([], [], 'b-')
60
61 def animate(i):
62     line.set_data(x, Sol[:, i])
63     return line,
64
65 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=np.arange(0, T, 1), interval=10, blit=True,
66 , repeat=True)
67
68 plt.show()

```

Eseguendo il codice è possibile vedere che l'ampiezza dell'onda iniziale va diminuendo, cosa che guardando l'equazione non ci aspetteremmo; ciò è dovuto al fatto che il metodo di Lax può essere visto come un FCTS di un'equazione con un termine diffusivo, ovvero un termine di derivata seconda stile equazione del calore. Vi è quindi un problema di diffusione numerica. Possiamo però risolverlo utilizzando un altro metodo, quello di Lax-Wendroff.

F.2 Equazione del calore

L'equazione del calore è:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

Questa volta si può vedere che lo schema FCTS è stabile:

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

La condizione di stabilità è: $\frac{D\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib as mp
3 import matplotlib.pyplot as plt
4 import matplotlib.animation as animation
5
6 N = 100 #punti sulle x
7 x = np.linspace(0, N, N)
8 tstep = 5000 #punti sul tempo
9 T = np.zeros((N,tstep))
10
11 #Profilo di temperatura iniziale
12 T[0:N,0] = 500*np.exp(-((50-x)/20)**2)
13
14 D = 0.5
15 dx = 0.01
16 dt = 1e-4
17 r = D*dt/dx**2
18 #r < 1/2 affinche integri bene
19 print(r)
20
21 for time in range(1,tstep):
22     for i in range(1,N-1):
23         T[i,time]=T[i,time-1] + r*(T[i-1,time-1]+T[i+1,time-1]-2*T[i,time-1])

```

```

24 #     T[0,time]=T[1,time] #per avere bordi non fissi
25 #     T[N-1,time]=T[N-2,time]
26
27 fig = plt.figure(1)
28 ax = fig.gca(projection='3d')
29 gridx, gridy = np.meshgrid(range(tstep), range(N))
30 ax.plot_surface(gridx,gridy,T, cmap=mp.cm.coolwarm,vmax=250,linewidth=0,rstride=2, cstride
   =100)
31 ax.set_title('Diffusione del calore')
32 ax.set_xlabel('Tempo')
33 ax.set_ylabel('Lunghezza')
34 ax.set_zlabel('Temperatura')
35
36 fig = plt.figure(2)
37 plt.xlim(np.min(x), np.max(x))
38 plt.ylim(np.min(T), np.max(T))
39
40 line, = plt.plot([], [], 'b')
41 def animate(i):
42     line.set_data(x, T[:,i])
43     return line,
44
45
46 anim = animation.FuncAnimation(fig, animate, frames=tstep, interval=10, blit=True, repeat=True
   )
47
48 plt.grid()
49 plt.title('Diffusione del calore')
50 plt.xlabel('Distanza')
51 plt.ylabel('Temperatura')
52
53 #anim.save('calore.mp4', fps=30, extra_args=['-vcodec', 'libx264'])
54
55 plt.show()

```

G Presa dati da foto

Può capitare che sia interessante prendere dei dati da analizzare, in un qualche modo o maniera, da una foto. Riportiamo quindi un semplice codice che permettere di aprire una foto e salvare su file.txt le coordinate dei pixel, tutto ciò semplicemente cliccando sulla foto (Ogni click che si effettua sulla foto vengono lette e salvate le coordinate del pixel cliccato).

```
1 import matplotlib as mp
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4
5 #il file txt su cui scrivere se non esiste viene creato automaticamente
6
7 path_dati = "C:\\\\Users\\\\franc\\\\Desktop\\\\dati0.txt"
8 path_img = "C:\\\\Users\\\\franc\\\\Documents\\\\DatiL\\\\datiL3\\\\FIS2\\\\eOverm\\\\DSC_0005.jpg"
9
10 fig, ax = plt.subplots()
11
12 img = mp.image.imread(path_img)
13
14 ax.imshow(img)
15
16
17 def onclick(event):
18     #apre file, il permesso e' a altrimenti sovrascriverebbe i dati
19     file= open(path_dati, "a")
20
21     x=event.xdata
22     y=event.ydata
23     print('x=%f, y=%f' %(x, y)) #stampa i dati sulla shell
24
25     #scrive i dati sul file belli pronti per essere letti da codice del fit
26     file.write(str(x))
27     file.write('\\t')
28     file.write(str(y))
29     file.write('\\n')
30     file.close() #chiude il file
31
32
33 fig.canvas.mpl_connect('button_press_event', onclick)
34
35
36 plt.show()
```

H Fit

Illustriamo brevemente alcuni modi di eseguire dei fit numerici, cosa in generale in fisica molto utile poiché ci permette di determinare se i dati seguano o meno un certo andamento predetto dalla teoria.

H.1 Fit con scipy

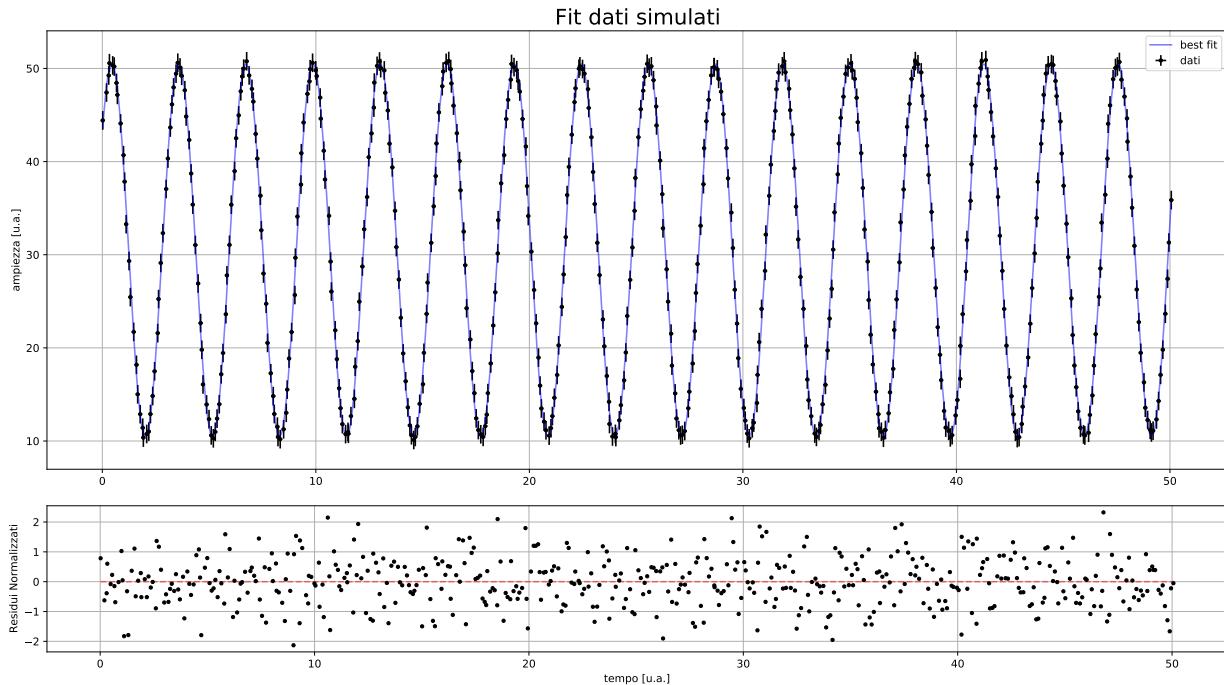
La libreria scipy grazie alla funzione "curve_fit()" ci permette di eseguire un gran numero di fit; riportiamo sotto un esempio di codice e relativi risultati e grafico:

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy.optimize import curve_fit
4
5 #Importiamo i dati (va inserito il path assoluto per permettere di trovare) e definiamo la
6 #funzione di fit:
7 #x, y= np.loadtxt(r'C:\Users\franc\Desktop\datiL\datiL2\onda.txt', unpack = True)
8 N = 500
9 ex, ey = 0.1, 1
10 dy = np.array(N*[ey])
11 dx = np.array(N*[ex])
12 x = np.linspace(0, 50, N)
13
14 A1 = 20
15 o1 = 2
16 v1 = 30
17 phi = np.pi/4
18
19 y = A1*np.sin(o1*x + phi) + v1
20 k = np.random.uniform(0, ey, N)
21 l = np.random.uniform(0, ex, N)
22 y = y + k #aggiungo errore
23 x = x + l
24
25 def f(x, A, o, f, v):
26     '''funzione modello
27     ,,
28     return A*np.sin(o*x + f) + v
29 """
30 definiamo un array di parametri iniziali contenente
31 i valori numerici che ci si aspetta il fit restituisca,
32 per aiutare la convergenza dello stesso:
33 init = np.array([A, o, f, v])
34 """
35 init = np.array([25, 2.1, 3, 29])
36
37
38 #Eseguiamo il fit e stampiamo i risultati:
39 pars, covm = curve_fit(f, x, y, init, sigma=dy, absolute_sigma=False)
40 print('A = %.5f +- %.5f ' % (pars[0], np.sqrt(covm.diagonal()[0])))
41 print('o = %.5f +- %.5f ' % (pars[1], np.sqrt(covm.diagonal()[1])))
42 print('f = %.5f +- %.5f ' % (pars[2], np.sqrt(covm.diagonal()[2])))
43 print('v = %.5f +- %.5f ' % (pars[3], np.sqrt(covm.diagonal()[3])))
44
45 #Calcoliamo il chi quadro, indice ,per quanto possibile, della bonta' del fit:
46 chisq = sum(((y - f(x, *pars))/dy)**2.)
47 ndof = len(y) - len(pars)
48 print(f'chi quadro = {chisq:.3f} ({ndof:d} dof)')
49
50
51 #Definiamo un matrice di zeri che divvera' la matrice di correlazione:
52 c=np.zeros((len(pars),len(pars)))
53 #Calcoliamo le correlazioni e le inseriamo nella matrice:
54 for i in range(0, len(pars)):
55     for j in range(0, len(pars)):
56         c[i][j] = (covm[i][j])/np.sqrt(covm.diagonal()[i])*np.sqrt(covm.diagonal()[j])
57 print(c) #matrice di correlazione
58
59
60 #Grafichiamo il risultato
61 fig1 = plt.figure(1)
62 #Parte superiore contenente il fit:
63 frame1=fig1.add_axes((.1,.35,.8,.6))
64 #frame1=fig1.add_axes((trasla lateralmente, trasla verticalmente, larghezza, altezza))
```

```

65 frame1.set_title('Fit dati simulati', fontsize=20)
66 plt.ylabel('ampiezza [u.a.]', fontsize=10)
67 #plt.ticklabel_format(axis = 'both', style = 'sci', scilimits = (0,0))#notazione scientifica
68 sugliassi
69 plt.grid()
70
71 #grafichimao i punti e relative barre d'errore
72 plt.errorbar(x, y, dy, dx, fmt='.', color='black', label='dati')
73 t = np.linspace(np.min(x),np.max(x), 10000)
74 s = f(t, *pars)
75 plt.plot(t,s, color='blue', alpha=0.5, label='best fit') #grafico del best fit
76 plt.legend(loc='best')#inserisce la legenda nel posto migliore
77
78 #Parte inferiore contenente i residui
79 frame2=fig1.add_axes((.1,.1,.8,.2))
80
81 #Calcolo i residui normalizzati
82 ff = (y-f(x, *pars))/dy
83 frame2.set_ylabel('Residui Normalizzati')
84 plt.xlabel('tempo [u.a.]', fontsize=10)
85 #plt.ticklabel_format(axis = 'both', style = 'sci', scilimits = (0,0))
86
87 plt.plot(t, 0*t, color='red', linestyle='--', alpha=0.5) #grafico la retta costantemente zero
88 plt.plot(x, ff, '.', color='black') #grafico i residui normalizzati
89 plt.grid()
90
91 plt.show()
92
93 [Output]
94 A = 19.95561 +- 0.05547
95 o = 1.99991 +- 0.00019
96 f = 6.96973 +- 0.00565
97 v = 30.54562 +- 0.03930
98 chi quadro = 382.795 (496 dof)
99 [[ 1.          0.00576834 -0.00302643  0.00468354]
100 [ 0.00576834  1.          -0.86984711 -0.02110156]
101 [-0.00302643 -0.86984711  1.          0.02174398]
102 [ 0.00468354 -0.02110156  0.02174393  1.        ]]
103

```



H.2 Fit circolare, metodo di Coope

Ci sono casi in cui, come per un circonferenza o un'ellisse, curve fit non è comodo da usare, in quanto non si tratta di vere e proprie funzioni. Mostriamo un esempio di fit circolare seguito con il metodo di Coope e riportiamo qui il link all'articolo originale: <https://core.ac.uk/download/pdf/35472611.pdf>

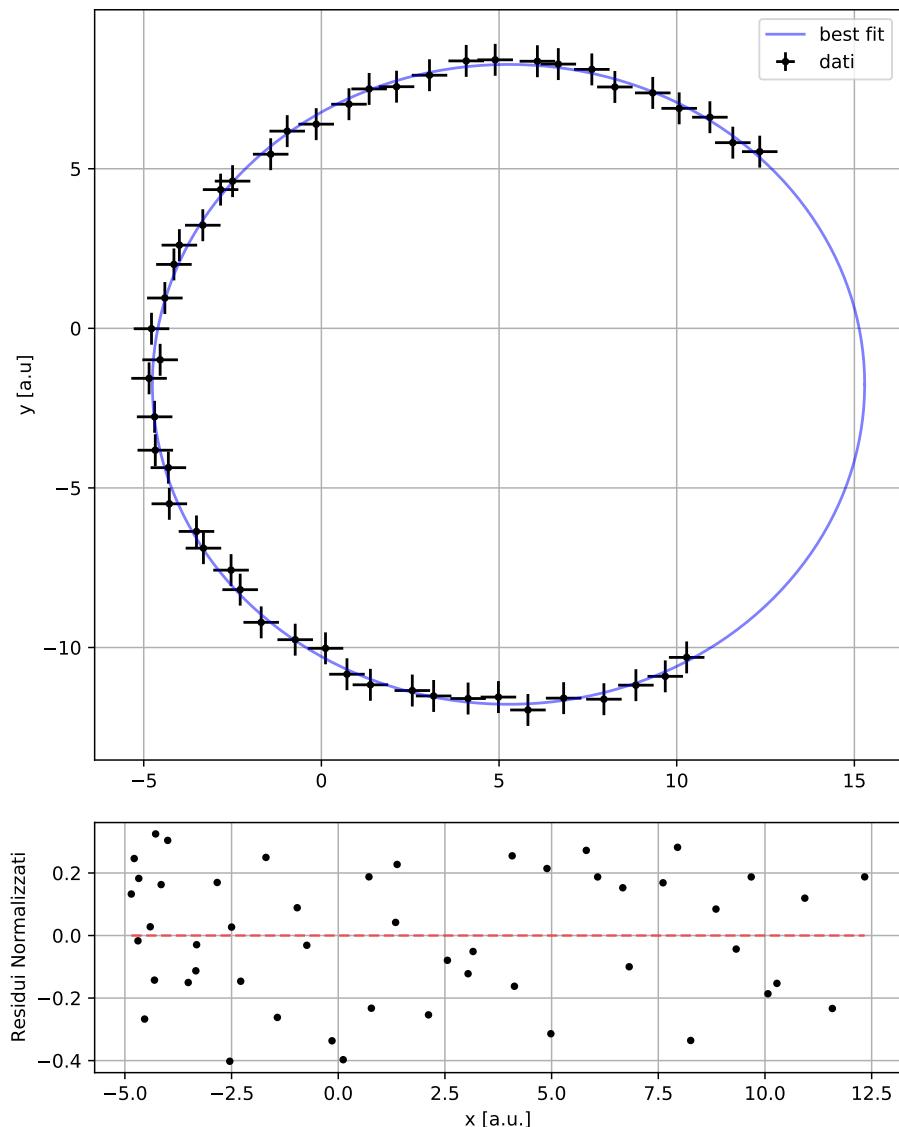
```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4
5 def cerchio(xc, yc, r, N, phi_min=0, phi_max=2*np.pi):
6     """
7         Restituisce un cerchio di centro (xc, yc) e di raggio r
8         phi e' il parametro di percorrenza del cerchio
9     """
10
11    phi = np.linspace(phi_min, phi_max, N)
12
13    x = xc + r*np.cos(phi)
14    y = yc + r*np.sin(phi)
15
16    return x, y
17
18
19 def fitcerchio(pt, w=None):
20     """
21         fit di un cerchio con metodo di coope
22         Parameters
23         -----
24         pt : 2Darray
25             contiene le coordinate del cerchio
26         w : None or 1Darray
27             w = np.sqrt(dx**2 + dy**2)
28             if None => w = np.ones(len(pt[0]))
29
30
31     Returns
32     -----
33     c : 1Darray
34         array con le coordinate del centro del cerchio
35     r : float
36         raggio del cerchio
37     d : 1Darray
38         array con gli errori associati a c ed r
39     A1 : 2Darray
40         matrice di covarianza
41     ,
42     npt = len(pt[0])
43
44     S = np.column_stack((pt.T, np.ones(npt)))
45     y = (pt**2).sum(axis=0)
46
47     if w is None:
48         w = np.ones(npt)
49
50     w = np.diag(1/w)
51
52     A = S.T @ w @ S #@ -> prodotto matriciale
53     b = S.T @ w @ y
54     sol = np.linalg.solve(A, b)
55
56     c = 0.5*sol[:-1]
57     r = np.sqrt(sol[-1] + c.T @ c)
58
59     d = np.zeros(3)
60     A1 = np.linalg.inv(A)
61
62     for i in range(3):
63         d[i] = np.sqrt(A1[i,i])
64     return c, r, d, A1
65
66
67 if __name__ == "__main__":
68     np.random.seed(69420)
69     #numero di punti
70     N = 50
71     #parametri cerchio
```

```

72 xc, yc, r1 = 5, -2, 10
73 #errori
74 ex, ey = 0.5, 0.5
75 dy = np.array(N*[ey])
76 dx = np.array(N*[ex])
77 dr = np.sqrt(dx**2 + dy**2)
78 k = np.random.uniform(0, ex, N)
79 l = np.random.uniform(0, ey, N)
80 #creiamo il cerchio
81 x, y = cerchio(xc, yc, r1, N, np.pi/4, 5/3*np.pi)
82 x = x + k #aggiungo errore
83 y = y + l
84
85 a = np.array([x, y])
86 c, r, d, A = fitcerchio(a, dr) #fit
87
88 print(f'x_c = {c[0]:.5f} +- {d[0]:.5f}; valore esatto = {xc:.5f}')
89 print(f'y_c = {c[1]:.5f} +- {d[1]:.5f}; valore esatto = {yc:.5f}')
90 print(f'r = {r:.5f} +- {d[2]:.5f}; valore esatto = {r1:.5f}')
91
92
93 chisq = sum(((np.sqrt((x-c[0])**2 + (y-c[1])**2) - r)/dr)**2.)
94 ndof = N - 3
95 print(f'chi quadro = {chisq:.3f} ({ndof:d} dof)')
96
97 corr=np.zeros((3,3))
98 for i in range(0, 3):
99     for j in range(0, 3):
100         corr[i][j]=(A[i][j])/(np.sqrt(A.diagonal()[i])*np.sqrt(A.diagonal()[j]))
101 print(corr)
102
103 #plot
104 fig1 = plt.figure(1, figsize=(7.5,9.3))
105 frame1=fig1.add_axes((.1,.35,.8,.6))
106 #frame1=fig1.add_axes((trasla lateralmente, trasla verticalmente, larghezza, altezza))
107 frame1.set_title('Fit dati simulati', fontsize=20)
108 plt.ylabel('y [a.u]', fontsize=10)
109 plt.grid()
110
111 plt.errorbar(x, y, dy, dx, fmt='.', color='black', label='dati')
112 xx, yy = cerchio(c[0], c[1], r, 10000)
113 plt.plot(xx, yy, color='blue', alpha=0.5, label='best fit')
114 plt.legend(loc='best')
115
116
117 frame2=fig1.add_axes((.1,.1,.8,.2))
118 frame2.set_ylabel('Residui Normalizzati')
119 plt.xlabel('x [a.u.]', fontsize=10)
120
121 ff=(np.sqrt((x-c[0])**2 + (y-c[1])**2) - r)/dr
122 x1=np.linspace(np.min(x),np.max(x), 1000)
123 plt.plot(x1, 0*x1, color='red', linestyle='--', alpha=0.5)
124 plt.plot(x, ff, '.', color='black')
125 plt.grid()
126
127 plt.show()
128
129 [Output]
130 x_c = 5.26652 +- 0.02239; valore esatto = 5.00000
131 y_c = -1.75547 +- 0.01536; valore esatto = -2.00000
132 r = 10.02356 +- 0.12864; valore esatto = 10.00000
133 chi quadro = 2.125 (47 dof)
134 [[ 1.           -0.09873297 -0.3480512 ]
135 [-0.09873297   1.           0.18918522]
136 [-0.3480512    0.18918522  1.          ]]

```

Fit dati simuli



H.3 Fit di un'ellisse, metodo di Halir e Flusser

Riportiamo anche un esempio di fit di ellisse basato sull'articolo di Halir e Flusser: <http://autotrace.sourceforge.net/WSCG98.pdf> (n.d.r. è consigliato leggere l'articolo per i vedere i caveat del metodo). Non è riportato il calcolo degli errori sui parametri perché nemmeno nell'articolo è trattato.

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4
5 def ellisse(parametri, n, tmin=0, tmax=2*np.pi):
6     """
7         Resistuisce un'ellisse di centro (x0, y0),
8         di semiassi maggiore e minore (semi_M, semi_m)
9         inclinata di un angolo (phi) rispetto all'asse x
10        t e' il parametro di "percorrenza" dell'ellisse
11    """
12
13    x0, y0, semi_M, semi_m, phi = parametri
14    t = np.linspace(tmin, tmax, n)
15
16    x = x0 + semi_M*np.cos(t)*np.cos(phi) - semi_m*np.sin(t)*np.sin(phi)
17    y = y0 + semi_M*np.cos(t)*np.sin(phi) + semi_m*np.sin(t)*np.cos(phi)
18
19    return x, y
20
21
22 def cartesiano_a_polari(coef):
23     """
24         Converte i coefficienti di: ax^2 + bxy + cy^2 + dx + fy + g = 0
25         nei coefficienti polari: centro, semiassi, inclinazione ed eccentricita'
26         Per dubbi sulla geometria: https://mathworld.wolfram.com/Ellipse.html
27     """
28     #i termini misti presentano un 2 nella forma piu' generale
29     a = coef[0]
30     b = coef[1]/2
31     c = coef[2]
32     d = coef[3]/2
33     f = coef[4]/2
34     g = coef[5]
35
36     #Controlliamo sia un ellisse (i.e. il fit sia venuto bene, forse)
37     den = b**2 - a*c
38     if den > 0:
39         Error = 'I coefficienti passati non sono un ellisse: b^2 - 4ac deve essere negativo'
40         raise ValueError(Error)
41
42     #Troviamo il centro dell'ellisse
43     x0, y0 = (c*d - b*f)/den, (a*f - b*d)/den
44
45     num = 2*(a*f**2 + c*d**2 + g*b**2 - 2*b*d*f - a*c*g)
46     fac = np.sqrt((a - c)**2 + 4*b**2)
47     #Troviamo i semiassi maggiori e minori
48     semi_M = np.sqrt(num/den/(fac - a - c))
49     semi_m = np.sqrt(num/den/(-fac - a - c))
50
51     #Controlliamo che il semiasse maggiore sia maggiore
52     M_gt_m = True
53     if semi_M < semi_m:
54         M_gt_m = False
55         semi_M, semi_m = semi_m, semi_M
56
57     #Troviamo l'eccentricita'
58     r = (semi_m/semi_M)**2
59     if r > 1:
60         r = 1/r
61     e = np.sqrt(1 - r)
62
63     #Troviamo l'angolo di inclinazione del semiasse maggiore dall'asse x
64     #l'angolo come solito e misurato in senso antiorario
65     if b == 0:
66         if a < c:
67             phi = 0
68         else:
69             phi = np.pi/2
70
71     else:
```

```

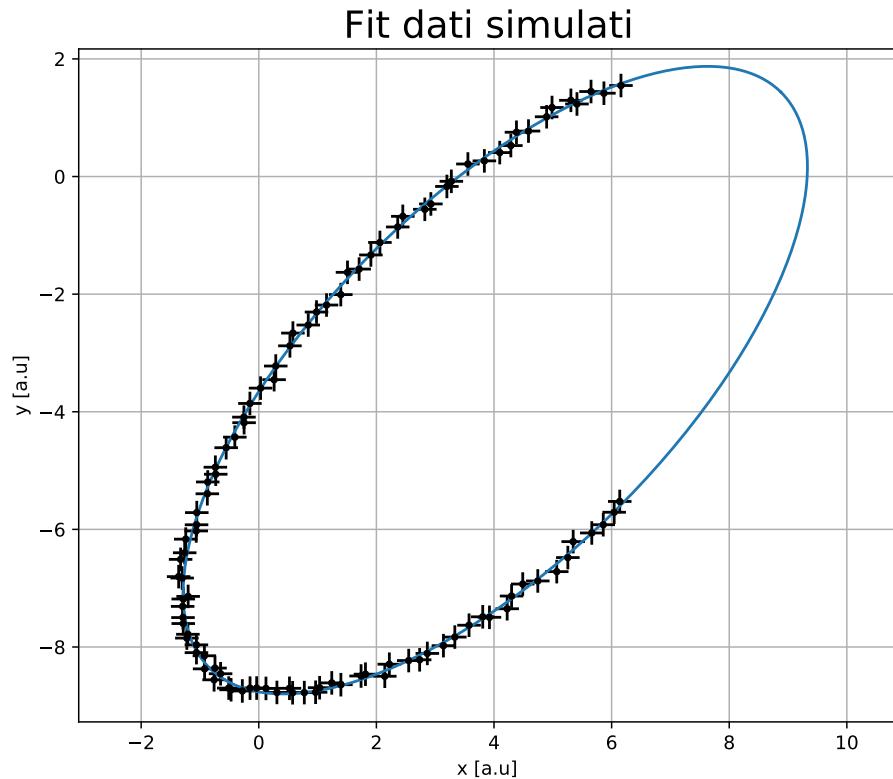
72     phi = np.arctan((2*b)/(a - c))/2
73     if a > c:
74         phi += np.pi/2
75
76     if not M_gt_m :
77         phi += np.pi/2
78
79 #periodicità della rotazione
80 phi = phi % np.pi
81
82 return x0, y0, semi_M, semi_m, e, phi
83
84
85 def fit_ellisse(x, y):
86     """
87     Basato sull'articolo di Halir and Flusser,
88     "Numerically stable direct
89     least squares fitting of ellipses".
89
90     """
91
92     D1 = np.vstack([x**2, x*y, y**2]).T
93     D2 = np.vstack([x, y, np.ones(len(x))]).T
94
95     S1 = D1.T @ D1
96     S2 = D1.T @ D2
97     S3 = D2.T @ D2
98
99     T = -np.linalg.inv(S3) @ S2.T
100    M = S1 + S2 @ T
101    C = np.array(((0, 0, 2), (0, -1, 0), (2, 0, 0)), dtype=float)
102    M = np.linalg.inv(C) @ M
103
104    eigval, eigvec = np.linalg.eig(M)
105    cond = 4*eigvec[0]*eigvec[2] - eigvec[1]**2
106    ak = eigvec[:, cond > 0]
107
108    return np.concatenate((ak, T @ ak)).ravel()
109
110
111 if __name__ == "__main__":
112
113     #numero di punti
114     N = 100
115     #parametri dell'ellisse
116     x0, y0 = 4, -3.5
117     semi_M, semi_m = 7, 3
118     phi = np.pi/4
119     #eccentricità non fondamentale per la creazione
120     r = (semi_m/semi_M)**2
121     if r > 1:
122         r = 1/r
123     e = np.sqrt(1 - r)
124
125     #errori
126     ex, ey = 0.2, 0.2
127     dy = np.array(N*[ey])
128     dx = np.array(N*[ex])
129     #creiamo l'ellisse
130     x, y = ellisse((x0, y0, semi_M, semi_m, phi), N, np.pi/4, 3/2*np.pi)
131     k = np.random.uniform(0, ex, N)
132     l = np.random.uniform(0, ey, N)
133     x = x + k #aggiungo errore
134     y = y + l
135
136     coef_cart = fit_ellisse(x, y) #fit
137
138     print('valori esatti:')
139     print(f'{x0:.4f}, {y0:.4f}, semi_M:{semi_M:.4f}, semi_m:{semi_m:.4f}, phi:{phi:.4f}, e:{e:.4f}')
140     x0, y0, semi_M, semi_m, e, phi = cartesiano_a_polaris(coef_cart)
141     print('valori fittati')
142     print(f'{x0:.4f}, {y0:.4f}, semi_M:{semi_M:.4f}, semi_m:{semi_m:.4f}, phi:{phi:.4f}, e:{e:.4f}')
143
144     #plot
145     plt.figure(1)

```

```

146 plt.title('Fit dati simulati', fontsize=20)
147 plt.ylabel('y [a.u]', fontsize=10)
148 plt.xlabel('x [a.u]', fontsize=10)
149 plt.axis('equal')
150 plt.errorbar(x, y, dy, dx, fmt='.', color='black', label='dati')
151 x, y = ellisse((x0, y0, semi_M, semi_m, phi), 1000)
152 plt.plot(x, y)
153 plt.grid()
154 plt.show()
155
156 [Output]
157 valori esatti:
158 x0:4.0000, y0:-3.5000, semi_M:7.0000, semi_m:3.0000, phi:0.7854, e:0.9035
159 valori fittati
160 x0:4.0888, y0:-3.4169, semi_M:6.9755, semi_m:2.9975, phi:0.7859, e:0.9030

```



I Metodi Montecarlo

In molte simulazioni di interesse fisico è necessario dover generare numeri casuali, o quanto meno pseudo casuali. La generazione di numeri casuali è effettivamente sempre argomento di ricerca per riuscire a raggiungere sempre un livello di casualità maggiore; esistono poi in letteratura esempi di buoni generatori che però in certe simulazioni falliscono, dando risultati fisicamente molto poco sensati. Insomma è un argomento abbastanza delicato. Non potendone parlare nel dettaglio vedremmo brevemente un esempio di generatore di numeri casuali e poi una simulazione vera e propria con l'utilizzo però di librerie di python apposite (sia la libreria numpy che la libreria random, sono molto utili nella generazione di numeri random).

I.1 Generatori numeri pseudo-casuali

Uno dei modi più famosi di costruire un generatore è secondo uno schema che ha in nome di: generatore congruenziale lineare. Dato un certo seme x_0 posso generare il numero x_1 e da questo x_2 e via seguendo. Lo schema generale è:

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \mod M$$

dove a, c e M , detti rispettivamente: moltiplicatore, incremento e modulo sono dei numeri scelti con più o meno cura. Vediamo un esempio:

```
1 import numpy as np
2
3 def GEN(r0, n=1, M=2**64, a=6364136223846793005, c=1442695040888963407, norm=True):
4     """
5         generatore congruenziale lineare
6         Parametri
7         -----
8         r0 : int
9             seed della generazione
10        n : int, opzionale
11            dimensione lista da generare, di default e' 1
12        M : int, opzionale
13            periodo del generatore di default e' 2**64
14        a : int, opzionale
15            moltiplicatore del generatore, di default e' 6364136223846793005
16        c : int, opzionale
17            incremento del generatore, di default e' 1442695040888963407
18        norm : bool, opzionale
19            se True il numero restituito e' fra zero ed 1
20
21     Returns
22     -----
23     r : list
24         lista con numeri distribuiti casualmente
25     """
26     if n==1:
27         r = (a*r0 + c)%M
28     else:
29         r = []
30         x = r0
31         for i in range(1, n):
32             x = (a*x + c)%M
33             r.append(x)
34
35     if norm :
36         if n==1:
37             return float(r)/(M-1)
38         else :
39             return [float(el)/(M-1) for el in r]
40     else :
41         return r
42
43 if __name__ == '__main__':
44     seed = 42
45
46     print(GEN(seed, n=5))
47     momenti1 = [np.mean(np.array(GEN(seed, n=int(5e5)))**i) for i in range(1, 10)]
48     momenti2 = [1/(1+p) for p in range(1, 10)]
49
50     for M1, M2 in zip(momenti1, momenti2):
51         print(f'{M1:.3f}, {M2:.3f}')
52
53 [Output]
```

```

54 [0.5682303266439077, 0.22546342894775137, 0.41283831882951183, 0.6303980498395979]
55 0.500, 0.500
56 0.333, 0.333
57 0.250, 0.250
58 0.200, 0.200
59 0.167, 0.167
60 0.143, 0.143
61 0.125, 0.125
62 0.111, 0.111
63 0.100, 0.100

```

Quello che si fa a Riga 47 è il calcolo dei primi momenti della distribuzione uniforme con il nostro generatore; alla riga successiva troviamo i momenti analitici, da confrontare con quelli da noi calcolati per fare un piccolo test sulla bontà del generatore.

I.2 Calcolo di Pi greco

Prendete dei coriandoli e buttateli a caso su una mattonella con un cerchio disegnato sopra e contando quanti sono dentro al cerchio rispetto al totale avete calcolato π . Fondamentalmente quel che si fa è il calcolo di un'area (i.e. un'integrale) e benché ci siano modi più efficienti il calcolo di π è un classico esempio e quindi non mancheremo di esporlo. La particolarità di usare un metodo Monte-Carlo infatti si vede in alte dimensioni poiché a differenza dei possibili metodi di integrazione che uno può inventarsi l'errore dato da Monte-Carlo non dipende dalla dimensione ma va sempre come $1/\sqrt{N}$. Per comodità l'esempio è fatto su un quarto di circonferenza quindi la probabilità che il coriandolo sia dentro è $\pi/4$.

```

1 import time
2 import numpy as np
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5 N = int(5e4)
6 start_time=time.time()
7
8 x = np.linspace(0,1, 10000)
9
10 def f(x):
11     """
12         semi circonferenza superiore
13     """
14     return np.sqrt(1-x**2)
15
16 c = 0
17 X_in = []
18 Y_in = []
19 X_out = []
20 Y_out = []
21
22 for i in range(1,N):
23     #genero due variabili casuali uniformi fra 0 e 1
24     a = np.random.rand()
25     b = np.random.rand()
26     r = a**2 + b**2
27     #se vero aggiorno c di 1
28     if r < 1:
29         X_in.append(a)
30         Y_in.append(b)
31         c += 1
32     else:
33         X_out.append(a)
34         Y_out.append(b)
35
36 #moltiplico per quattro essendo su un solo quadrante
37 Pi = 4*c/N
38 #propagazione errore, viene dalla binomiale
39 dPi = np.sqrt(c/N * (1-c/N))/np.sqrt(N)
40 print('%.3f +- %.3f' %(Pi, dPi))
41 print(np.pi)
42 print(abs((Pi-np.pi)/np.pi))
43
44 plt.figure(1)
45 plt.title('Pi \simeq %.3f \pm %.3f ; N=%.0e' %(Pi, dPi, N), fontsize=20)
46 plt.xlim(0,1)
47 plt.ylim(0,1)
48 plt.plot(x, f(x),color='blue', lw=1)
49 plt.errorbar(X_in, Y_in, fmt='.', markersize=1, color='blue')

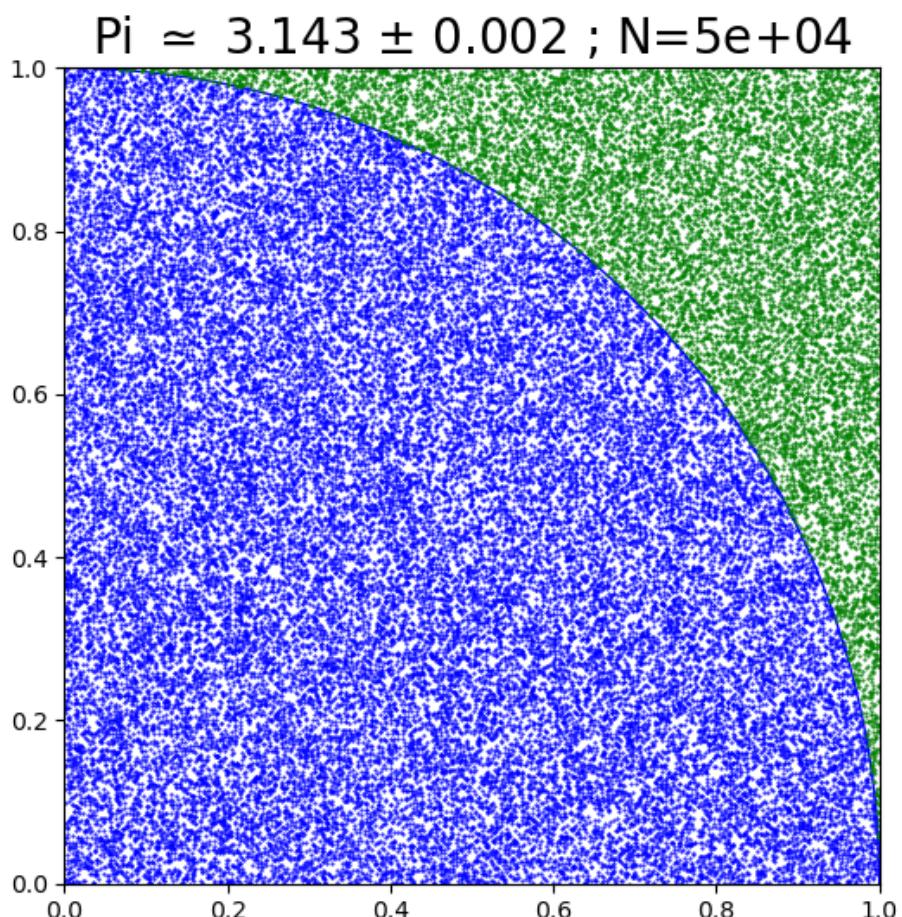
```

```

50 plt.errorbar(X_out, Y_out, fmt='.', markersize=1, color='green')
51 ax = plt.gca()
52 ax.set_aspect('equal')
53 plt.show()
54
55 print("--- %s seconds ---" % (time.time() - start_time))
56
57 [Output]
58 3.142720 +- 0.001835
59 3.141592653589793
60 0.0003588455075227156
61 --- 0.19469761848449707 seconds ---

```

Cambiando N si può controllare quanto velocemente questo metodo converga, e si vedrà che non è velocissimo ma va beh, come dicevamo prima siamo solo in due dimensioni.



(ok, sgrana un po' ma in pdf era troppo pesante e il pdf non scorreva bene)

J Propagazione errori

Può capitare spesso che vadano propagati degli errori, purtroppo. A Laboratorio 1 si vede che il modo di propagarli è fare le derivate, e in casi più semplici ci sono dei trucchetti. Noi per andare sul sicuro faremo sempre le derivate, dove il guaio è che è facile sbagliare i calcoli, ma per fortuna noi li facciamo fare al computer.

J.1 Propagarli a mano

Volendo scrivere un breve codice facile da modificare all'occorrenza si potrebbe provare così:

```
1 import numpy as np
2 import sympy as sp
3
4 x = sp.Symbol('x')
5 y = sp.Symbol('y')
6 z = sp.Symbol('z')
7 t = sp.Symbol('t')
8
9 def Errore(x1, dx1, y1, dy1, z1, dz1, t1, dt1):
10     """
11     Prende in input certe quantita' con un errore
12     e propaga l'errore su una certa funzione di queste
13     """
14     #funzione su cui propagare l'errore da modifica all'occorenza
15     f1 = ((x-y)/(z+t))
16
17     #valor medio
18     f = float(f1.subs(x,x1).subs(y,y1).subs(z,z1).subs(t,t1))
19
20     #derivate parziali calcolate nel punto
21     a = sp.diff(f1, x).subs(x,x1).subs(y,y1).subs(z,z1).subs(t,t1)
22     b = sp.diff(f1, y).subs(x,x1).subs(y,y1).subs(z,z1).subs(t,t1)
23     c = sp.diff(f1, z).subs(x,x1).subs(y,y1).subs(z,z1).subs(t,t1)
24     d = sp.diff(f1, t).subs(x,x1).subs(y,y1).subs(z,z1).subs(t,t1)
25
26     #somma dei vari contributi
27     df1 = ((a*dx1)**2 + (b*dy1)**2 + (c*dz1)**2 + (d*dt1)**2 )
28     df = np.sqrt(float(df1))
29
30     return f, df
31
32
33 print(Errore(1, 0.1, 2, 0.1, 3, 0.1, 2, 0.1))
34
35 [Output]
36 (-0.2, 0.02884441020371192)
```

J.2 Uncertainties

Ottimamente volendo si potrebbe usare questa comoda libreria:

```
1 from uncertainties import ufloat
2 import uncertainties.umath as um
3
4 #il primo argomento e' il valore centrale, il secondo l'errore
5 x = ufloat(7.1, 0.2)
6 y = ufloat(12.3, 0.7)
7
8
9 print(x)
10 print(2*x-y)
11 print(um.log(x**y))
12
13 [Output]
14 7.10+-0.20
15 1.9+-0.8
16 24.1+-1.4
```

Vediamo ora un riassunto della propagazione degli errori:

PRECISE + PRECISE = SLIGHTLY LESS
NUMBER + NUMBER = PRECISE NUMBER

PRECISE × PRECISE = SLIGHTLY LESS
NUMBER × NUMBER = PRECISE NUMBER

PRECISE + GARBAGE = GARBAGE
NUMBER

PRECISE × GARBAGE = GARBAGE
NUMBER

$\sqrt{\text{GARBAGE}}$ = LESS BAD
GARBAGE

$(\text{GARBAGE})^2$ = WORSE
GARBAGE

$\frac{1}{N} \sum (\text{N PIECES OF STATISTICALLY INDEPENDENT GARBAGE})$ = BETTER
GARBAGE

$(\text{PRECISE NUMBER})^{\text{GARBAGE}}$ = MUCH WORSE
GARBAGE

GARBAGE - GARBAGE = MUCH WORSE
GARBAGE

$\frac{\text{PRECISE NUMBER}}{\text{GARBAGE} - \text{GARBAGE}}$ = MUCH WORSE
GARBAGE, POSSIBLE
DIVISION BY ZERO

GARBAGE × 0 = PRECISE
NUMBER

K Interpolazione

Nel mondo della fisica computazionale, ad esempio nel mondo dell'astrofisica computazionale, capita spesso che alcune cose siano tabulate. Ovvero per fare una qualche simulazione si prendono delle certe quantità a loro volta frutto in genere di simulazioni e che quindi sono date per passi; se però fossimo interessati ad analizzare determinati valori magari in un range con un passo più piccolo della tabella, dobbiamo necessariamente interpolare, per cercare di capire cosa succede tra i due punti nella tabella.

K.1 Interpolazione lineare

Il modo più semplice è unire i punti con una retta, ovvero eseguire un'interpolazione lineare. Dati due punti consecutivi nella tabella indicati come (x_i, y_i) e (x_{i+1}, y_{i+1}) l'interpolazione lineare non fa altro che assegnare ad ogni valore di x compreso nell'intervallo $[x_i, x_{i+1}]$ la media ponderata tra y_i e y_{i+1} .

$$f(x) = \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} y_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} y_{i+1}$$

L'espressione precedente non è altro quindi che la retta che unisce i due punti. Vediamo il codice:

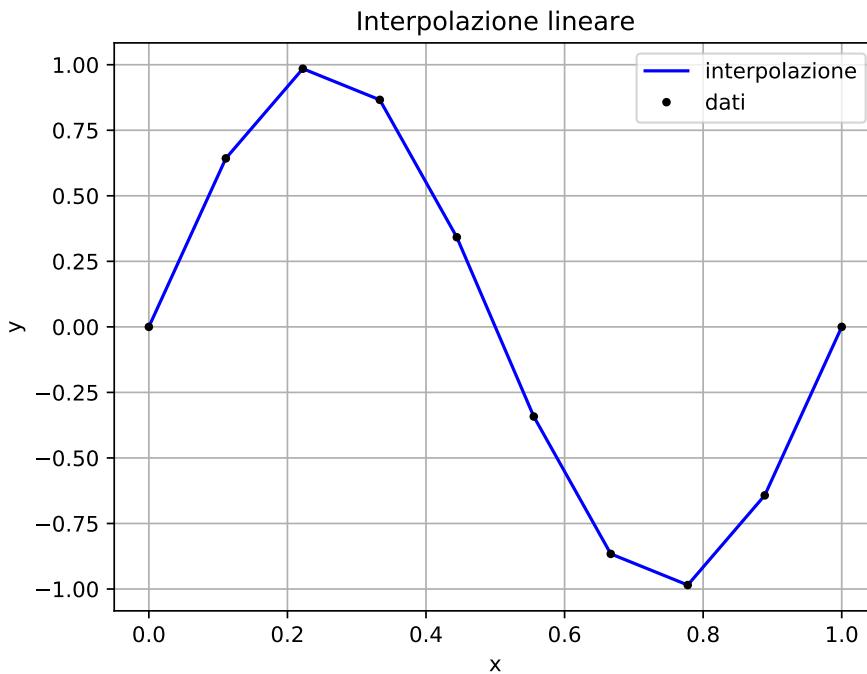
```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 def f(x, xx, yy):
5     """
6         restituisce l'interpolazione dei punti xx yy
7         x puo' essere un singolo valore in cui calcolare
8         la funzione interpolante o un intero array
9     """
10    #proviamo se x e' un array
11    try :
12        n = len(x)
13        x_in = np.min(xx) <= np.min(x) and np.max(xx) >= np.max(x)
14    except TypeError:
15        n = 1
16        x_in = np.min(xx) <= x <= np.max(xx)
17
18    #se il valore non e' nel range corretto e' impossibile fare il conto
19    if not x_in :
20        a = 'uno o diversi valori in cui calcolare la funzione'
21        b = ' interpolante sono fuori dal range di interpolazione'
22        errore = a+b
23        raise Exception(errore)
24
25    #array che conterra' l'interpolazione
26    F = np.zeros(n)
27
28    if n == 1 :
29        #controllo dove e' la x e trovo l'indice dell'array
30        #per sapere in che range bisogna interpolare
31        for j in range(len(xx)-1):
32            if xx[j] <= x <= xx[j+1]:
33                i = j
34
35            A = yy[i] * (xx[i+1] - x)/(xx[i+1] - xx[i])
36            B = yy[i+1] * (x - xx[i])/(xx[i+1] - xx[i])
37            F[0] = A + B
38
39    else:
40        #per ogni valore dell'array in cui voglio calcolare l'interpolazione
41        for k, x in enumerate(x):
42            #controllo dove e' la x e trovo l'indice dell'array
43            #per sapere in che range bisogna interpolare
44            for j in range(len(xx)-1):
45                if xx[j] <= x <= xx[j+1]:
46                    i = j
47
48                A = yy[i] * (xx[i+1] - x)/(xx[i+1] - xx[i])
49                B = yy[i+1] * (x - xx[i])/(xx[i+1] - xx[i])
50                F[k] = A + B
51
52    return F
53
54 if __name__ == '__main__':
55     x = np.linspace(0, 1, 10)
```

```

56 y = np.sin(2*np.pi*x)
57 z = np.linspace(0, 1, 100)
58
59 plt.figure(1)
60 plt.title('Interpolazione lineare')
61 plt.xlabel('x')
62 plt.ylabel('y')
63 plt.plot(z, f(z, x, y), 'b', label='interpolazione')
64 plt.plot(x, y, marker='.', linestyle='', c='k', label='dati')
65 plt.legend(loc='best')
66 plt.grid()
67 plt.show()

```

La funzione scritta prende due array "xx" e "yy" che sono i dati da interpolare, e una variabile "x" che può essere un singolo punto dell'intervallo o un intero array per ottenere una curva. Si è usato un try except perché chiaramente Python da errore se si calcola la lunghezza di un numero. Vi è poi il sollevamento di un'eccezione in caso i valori di interesse siano fuori dagli estremi della tabella dove non si può dire nulla quindi il codice si interrompe. Vediamo il risultato:



K.2 Interpolazione Polinomiale

Un altro modo per interpolare è usare un polinomio di grado $n - 1$ per n punti e si può fare facilmente con la matrice di Vandermonde, il problema è che tale matrice è mal condizionata, quindi non funziona sempre benissimo e il costo computazionale è alto dato che bisogna invertire una matrice.

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^{n-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \dots & x_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \dots & x_m^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_0 \\ s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

Dove le x e le y sono i nostri dati tabulati e gli s_i sono i coefficienti del polinomio. Vediamo un semplice esempio di codice:

```

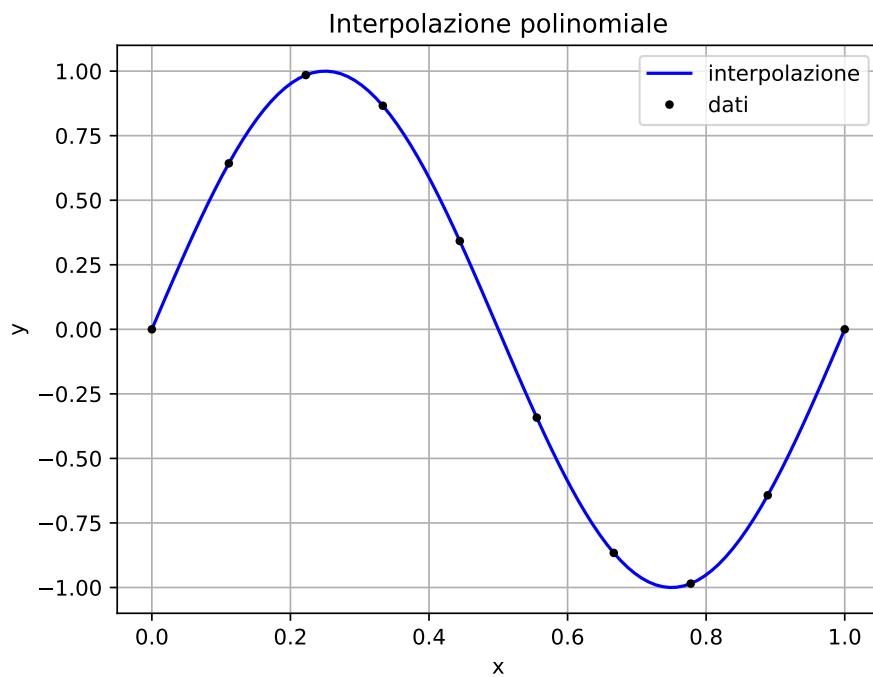
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 N = 10
5 x = np.linspace(0, 1, N)
6 y = np.sin(2*np.pi*x)
7
8 #Matrice di Vandermonde

```

```

9 A = np.zeros((N, N))
10 A[:, 0] = 1
11 for i in range(1, N):
12     A[:, i] = x**i
13
14 #risolvo il sistema, la soluzione sono i coefficienti del polinomio
15 s = np.linalg.solve(A, y)
16
17
18 def f(s, zz):
19     """
20         funzione per fare il grafico
21     """
22     n = len(zz)
23     y = np.zeros(n)
24     for i, z in enumerate(zz):
25         y[i] = sum([s[j]*z**j for j in range(len(s))])
26     return y
27
28 z = np.linspace(0, 1, 100)
29
30 plt.figure(1)
31 plt.title('Interpolazione polinomiale')
32 plt.xlabel('x')
33 plt.ylabel('y')
34 plt.plot(z, f(s, z), 'b', label='interpolazione')
35 plt.plot(x, y, marker='.', linestyle='', c='k', label='dati')
36 plt.legend(loc='best')
37 plt.grid()
38 plt.show()

```



K.3 Scipy.interpolate

Ovviamente esiste una libreria di Python che ci permette facilmente di eseguire le interpolazioni, riportiamo un semplice esempio (ricordando sempre che il modo migliore per capire a pieno è leggere la documentazione).

```

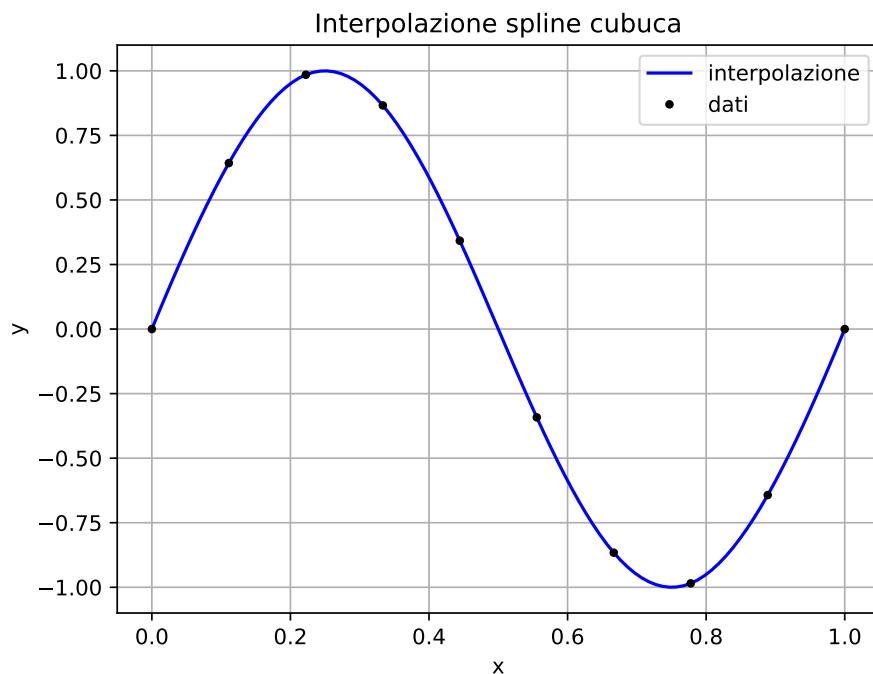
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from scipy.interpolate import InterpolatedUnivariateSpline
4
5 N = 10
6 x = np.linspace(0, 1, N)
7 y = np.sin(2*np.pi*x)
8
9 #interpolazione con una, spline cubica (k=3)

```

```

10 s3 = InterpolatedUnivariateSpline(x, y, k=3)
11
12 z = np.linspace(0, 1, 100)
13
14 plt.figure(1)
15 plt.title('Interpolazione spline cubica')
16 plt.xlabel('x')
17 plt.ylabel('y')
18 plt.plot(z, s3(z), 'b', label='interpolazione')
19 plt.plot(x, y, marker='.', linestyle='', c='k', label='dati')
20 plt.legend(loc='best')
21 plt.grid()
22 plt.show()

```



L Risolve numericamente le SDE

Nelle sezioni precedenti abbiamo parlato delle equazioni differenziali alle derivate ordinarie (ODE) e alle derivate parziali (PDE); veniamo ora a fare un piccolo accenno alle equazioni differenziali stocastiche (SDE). Le SDE sono equazioni in cui un termine è un processo stocastico e quindi anche la soluzione sarà un processo stocastico; sono utilizzate per modellare gli andamenti dei mercati o un qualche fenomeno soggetto a fluttuazioni termiche. Vedremo due semplici esempi, il moto geometrico Browniano e un processo di Ornstein–Uhlenbeck.

L.1 Processo di Ornstein–Uhlenbeck

Un processo di Ornstein–Uhlenbeck è descritto dalla seguente equazione stocastica:

$$dx = \theta(\mu - x) dt + \sigma dW$$

dove θ, σ costanti positive e μ costante, mentre dW è un processo di Wiener. In genere data una certa SDE della forma:

$$dx = f(x)dt + g(x)dW,$$

possiamo risolverla nel seguente modo (metodo di Euler–Maruyama):

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)dt + g(x_n)dW$$

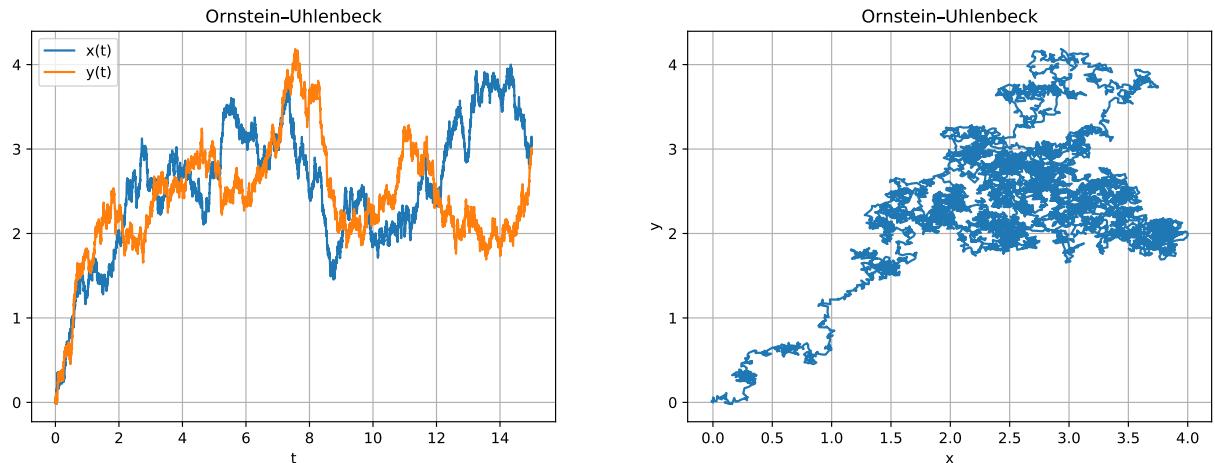
dove dt ora è il passo di integrazione e dW , che sarebbe un integrale stocastico, lo trattiamo una variabile gaussiana di media zero e varianza uguale alla radice del passo di integrazione. Vediamo un semplice esempio:

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 def f(z):
5     """
6         funzione che moltiplica il dt
7     """
8     theta = 0.7
9     mu = 2.5
10    return theta * (mu - z)
11
12 def g():
13     """
14         funzione che moltiplica il processo di wiener
15     """
16     sigma = 0.6
17     return sigma
18
19 def dW(delta_t):
20     """
21         processo di wiener trattato come variabile gaussiana
22     """
23     return np.random.normal(loc=0.0, scale=np.sqrt(delta_t))
24
25 #parametri simulazione
26 N = 10000
27 tf = 15
28 dt = tf/N
29
30 ts = np.zeros(N + 1)
31 ys = np.zeros(N + 1)
32 xs = np.zeros(N + 1)
33
34 ys[0], xs[0] = 0, 0 #condizioni iniziali
35
36 for i in range(N):
37     ys[i+1] = ys[i] + f(ys[i]) * dt + g() * dW(dt)
38     xs[i+1] = xs[i] + f(xs[i]) * dt + g() * dW(dt)
39     ts[i+1] = ts[i] + dt
40
41 plt.figure(1)
42 plt.plot(xs, ys)
43 plt.title('Ornstein Uhlenbeck')
44 plt.xlabel("x")
45 plt.ylabel("y")
46 plt.grid()
47
48 plt.figure(2)
```

```

49 plt.plot(ts, xs, label='x(t)')
50 plt.plot(ts, ys, label='y(t)')
51 plt.title('Ornstein Uhlenbeck')
52 plt.xlabel('t')
53 plt.legend()
54 plt.grid()
55
56 plt.show()

```



L.2 Moto geometrico Browniano

Il moto geometrico browniano è un moto browniano esponenziale, che ha applicazioni nella descrizione dei mercati finanziari ad esempio; l'equazione associata è:

$$dx = \mu x dt + \sigma x dW$$

Vedremo per risolverla il metodo di heun che si può scrivere così, facendo riferimento all'equazione generica di sopra($dx = f(x)dt + g(x)dW$):

$$\begin{cases} \bar{x} = x_n + z_1 g(x_n) + f(x_n)dt + \frac{1}{2}g(x_n)g'(x_n)z_1^2 \\ \hat{x} = x_n + z_1 g(\bar{x}) + f(\bar{x})dt + \frac{1}{2}g(\bar{x})g'(\bar{x})z_1^2 \\ x_{n+1} = \frac{1}{2}(\hat{x} + \bar{x}) \end{cases}$$

dove z_1 rappresenta il processo di wiener ed è sempre una variabile gaussiana a media zero e varianza dt . Vediamone l'implementazione:

```

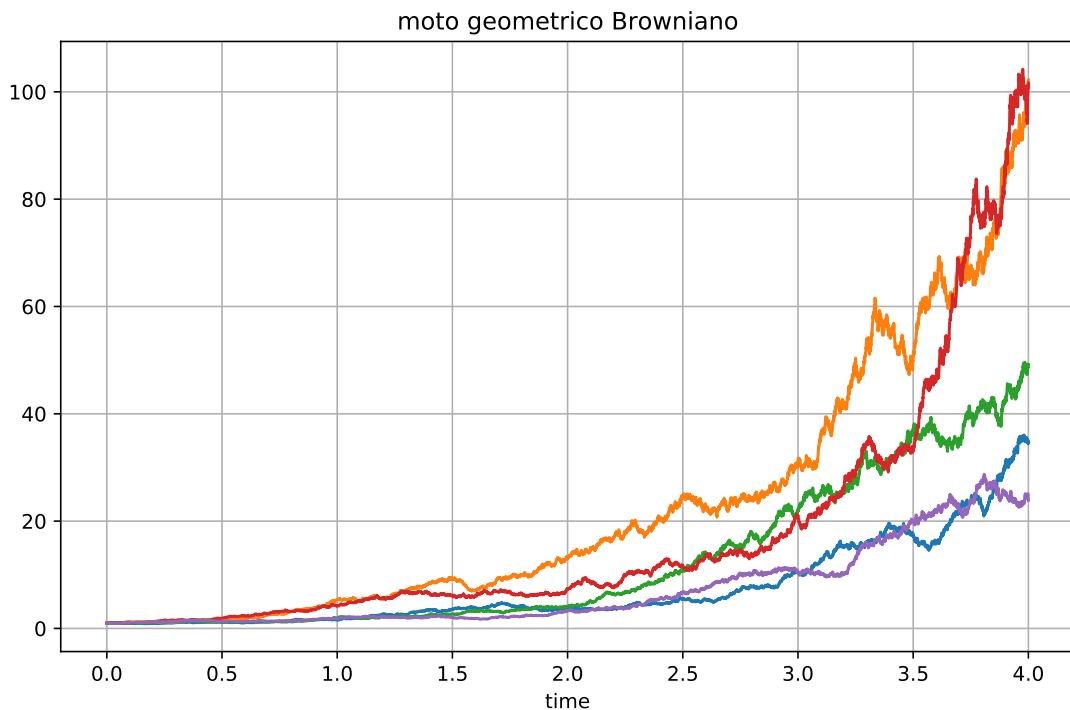
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 # geometric Brownian motion
5 # Heun method
6
7 def f(z):
8     """
9         funzione che moltiplica il dt
10    """
11    mu = 1
12    return mu*z
13
14 def g(z):
15     """
16        funzione che moltiplica il processo di wiener
17    """
18    sigma = 0.5
19    return sigma*z
20
21 def dg():
22     """
23        derivata di g
24    """
25    sigma = 0.5

```

```

26     return sigma
27
28 def dW(delta_t):
29     """
30     processo di wiener trattato come variabile gaussiana
31     """
32     return np.random.normal(loc=0.0, scale=np.sqrt(delta_t))
33
34
35 #parametri simulazioni
36 N = 10000
37 tf = 4
38 dt = tf/N
39 #faccio 5 simulazioni diverse
40 for _ in range(5):
41     #array dove conservare la soluzione, ogni volta inizializzati
42     ts = np.zeros(N + 1)
43     ys = np.zeros(N + 1)
44
45     ys[0] = 1#condizioni iniziali
46
47     for i in range(N):
48         ts[i+1] = ts[i] + dt
49         y0 = ys[i] + f(ys[i])*dt + g(ys[i])*dW(dt) + 0.5*g(ys[i])*dg()*(dW(dt)**2)
50         y1 = ys[i] + f(y0)*dt + g(y0)*dW(dt) + 0.5*g(y0)*dg()*(dW(dt)**2)
51         ys[i+1] = 0.5*(y0 + y1)
52
53 plt.plot(ts, ys)
54
55 plt.figure(1)
56 plt.title('moto geometrico Browniano')
57 plt.xlabel("time")
58 plt.grid()
59
60 plt.show()

```



M Ottimizzazione

Per quanto la discussione fatta nella quarta lezione con curve.fit sia appunto di ottimizzazione, parliamo brevemente degli algoritmi di ottimizzazione. Tratteremo del gradiente discendente e di una sua modifica spiegando al computer che esiste il principio di inerzia. Sia $F(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ la funzione da minimizzare.

M.1 Discesa del gradiente

La regola del gradiente discendente ci fa aggiornare iterativamente il punto di minimo con:

$$x_{n+1} = x_n - \alpha_n \nabla F(x_n) \quad (125)$$

Ci sono vari modi per scegliere α_n noi lo supporremo costante, scelta non delle migliori, perché può allungare la convergenza del metodo. Ricordiamo inoltre che i metodi iterativi convergono solo a minimi locali quindi bisogna scegliere attentamente il punto iniziale.

```
1 def grad_disc(f, x0, tol, step):
2     """
3         implementation of gradient descent
4         you have to be careful about the values
5         you pass in x0 if the function has more minima
6         and also the value of steps is a delicate choice
7         to be made wisely
8
9     Parameters
10    -----
11     f : callable
12         function to find the minimum,
13         can be f(x), f(x,y) and so on
14     x0 : ndarray
15         initial guess, to choose carefully
16     tol : float
17         required tollerance
18         the function stops when all components
19         of the gradient have smaller than tol
20     step : float
21         size of step to do, to choose carefully
22
23     Returns
24    -----
25     X : ndarray
26         array with all steps of solution
27     iter : int
28         number of iteration
29     """
30     iter = 0          #initialize iteration counter
31     h = 1e-7          #increment for derivatives
32     X = []            #to store solution
33     M = len(x0)       #number of variable
34     s = np.zeros(M)   #auxiliary array for derivatives
35     grad = np.zeros(M) #gradient
36
37     while True:
38         #gradient computation
39         for i in range(M):           #loop over variables
40             s[i] = 1                  #we select one variable at a time
41             dz1 = x0 + s*h           #step forward
42             dz2 = x0 - s*h           #step backward
43             grad[i] = (f(*dz1) - f(*dz2))/(2*h) #derivative along z's direction
44             s[:] = 0                  #reset to select the other variables
45
46         if all(abs(grad) < tol):
47             break
48
49         x0 = x0 - step*grad      #move towards the minimum
50         X.append(x0)            #store iteration
51         iter += 1               #update counter
52
53     X = np.array(X)
54     return X, iter
```

M.2 Principio di inerzia

Fondamentalmente se vediamo l'evoluzione della soluzione è come se una pallina stesse scendendo lungo una verde vallata, cioè la nostra F è il potenziale a cui la pallina è soggetta, quindi in analogia con la fisica si introduce il : gradiente discendente con momento. Cioè sia ggiunge un termine di velocità e un termine di attrito dipendente dalla velocità in modo che l'algoritmo non oscilli.

$$w_{n+1} = \beta w_n + \nabla F(x_n) \quad (126)$$

$$x_{n+1} = x_n - \alpha w_{n+1} \quad (127)$$

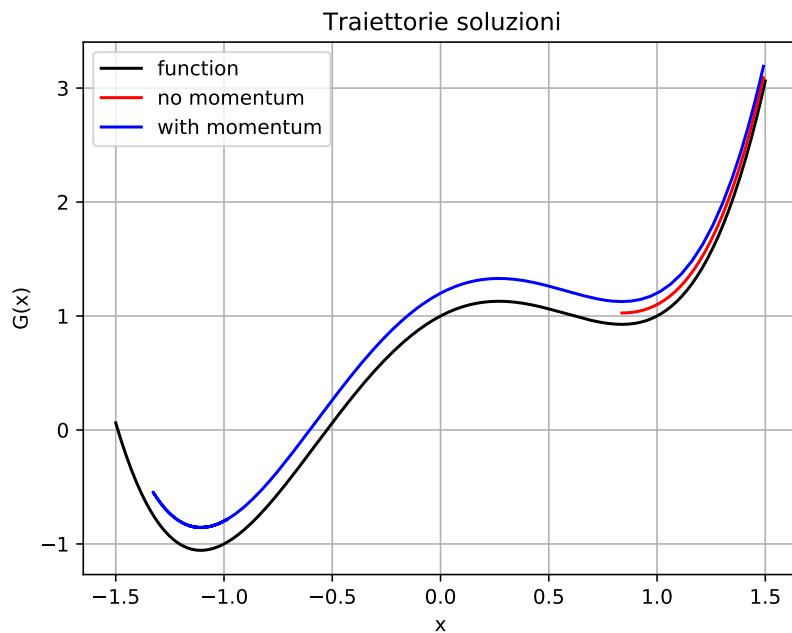
α è sempre lo step mentre β rappresenta pittoricamente il coefficiente di attrito. Se $\beta = 1$ l'algoritmo oscilla tra due punti con lo stesso valore di F (si conserva l'energia) quindi bisogna avere $\beta < 1$.

```

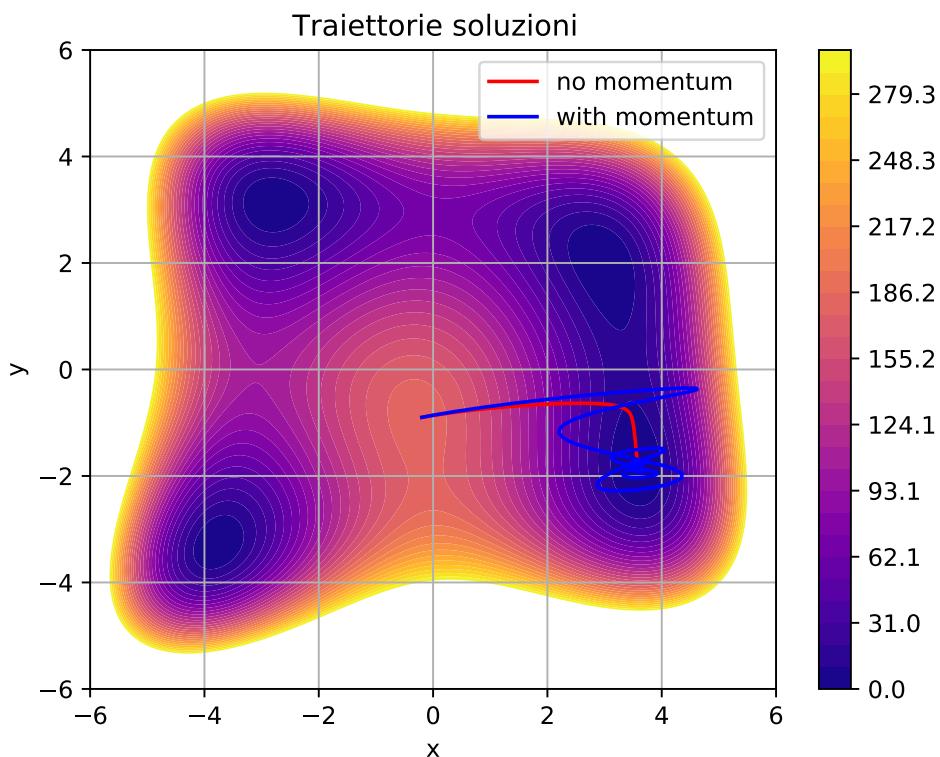
1 def grad_disc_m(f, x0, tol, alpha, beta):
2     """
3         implementation of gradient descent with momentum
4         you have to be careful about the values
5         you pass in x0 if the function has more minima
6         and also the value of alpha an beta is a
7         delicate choice to be made wisely
8
9     Parameters
10    -----
11     f : callable
12         function to find the minimum,
13         can be f(x), f(x,y) and so on
14     x0 : ndarray
15         initial guess, to choose carefully
16     tol : float
17         required tollerance
18         the function stops when all components
19         of the gradient have smaller than tol
20     alpha : float
21         size of step to do, to choose carefully
22     beta : float
23         size of step to do for velocity,
24         to choose carefully, if beta = 0
25         we get the method of gradient
26         descent without momentum
27
28     Returns
29    -----
30     X : ndarray
31         array with all steps of solution
32     iter : int
33         number of iteration
34
35     iter = 0           #initialize iteration counter
36     h = 1e-7          #increment for derivatives
37     X = []            #to store solution
38     M = len(x0)       #number of variable
39     s = np.zeros(M)   #auxiliary array for derivatives
40     grad = np.zeros(M) #gradient
41     w = np.zeros(M)   #velocity, momentum
42
43     while True:
44         #gradient computation
45         for i in range(M):
46             s[i] = 1           #loop over variables
47             dz1 = x0 + s*h   #we select one variable at a time
48             dz2 = x0 - s*h   #step forward
49             grad[i] = (f(*dz1) - f(*dz2))/(2*h) #step backward
50             s[:] = 0          #derivative along z's direction
51             #reset to select the other variables
52
53         if all(abs(grad) < tol):
54             break
55
56         w = beta*w + grad  #update velocity
57         x0 = x0 - alpha*w #update position move towards the minimum
58         X.append(x0)       #store iteration
59         iter += 1          #update counter
60
61     X = np.array(X)
62     return X, iter

```

Vediamo ora due grafici per capire il risultato, non mostriamo il codice in quanto si tratta semplicemente di chiamare le funzioni e fare i plot.



Le funzioni sono state chiamate con i parametri `grad_disc(G, x0, 1e - 8, 1e - 3)` e `grad_disc_m(G, x0, 1e - 8, 1e - 3, 0.953)` la funzione da minimizzare è $F(x) = (x^2 - 1)^2 + x$ vediamo che il primo data una infelice scelta del punto di partenza si incarta in un minimo locale. Il secondo invece arriva al minimo locale con un valore della velocità non nullo e quindi riesce a scavalcare il massimo locale se β fosse stato 0.9 anche lui si sarebbe bloccato lì. Le curve sono state traslate per maggiore leggibilità. Con gli stessi parametri vediamo un esempio bidimensionale (il codice è lo stesso la funzione è implementata in modo generico). $F(x, y) = (x^2 + y - 11)^2 + (x + y^2 - 7)^2$.



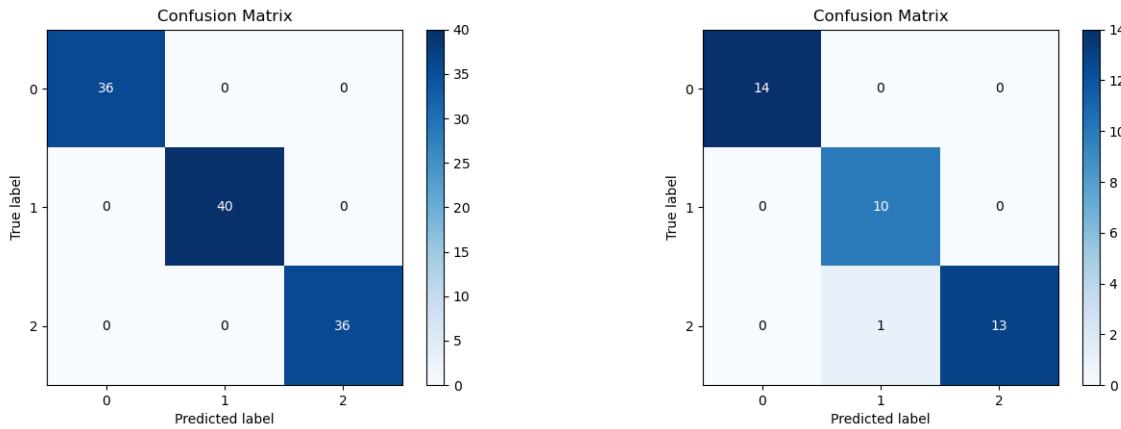
N Machine Learning

Nell'ultima lezione del corso avanzato abbiamo visto una breve introduzioni alle rete neurali. Ora vogliamo sempre parlare di machine learning ma usando la libreria 'sklearn'. Vediamo quindi un esempio che possa essere il corrispettivo di un "Hello World". Ci limiteremo, come sopra, al machine learning supervisionato ovvero sappiamo sia input che output. Mostreremo un esempio di classificatore e uno di regressore.

N.1 Classificatore

Un algoritmo classificatore fondamentalmente prende dei dati e restituisce una categoria, quindi classifica i dati in input. Vediamo un esempio:

```
1 import scikitplot as skplt
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from sklearn import datasets
4 from sklearn.model_selection import train_test_split
5 from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
6 from sklearn.metrics import accuracy_score
7
8 #dati che verrano utilizzati
9 iris_dataset = datasets.load_iris()
10 #print(iris_dataset["DESCR"])
11
12 #caratteristiche, dati in input
13 x = iris_dataset.data
14
15 #output, cioe' quello che il modello dovrebbe predire
16 y = iris_dataset.target
17
18 #divido i dati, un parte li uso per addestrare, l'altra per
19 #testare se il modello ha imparato bene
20 x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y)
21
22 #modello non addestrato, classificatore
23 #un classificatore prende i dati e restituisce un categoria
24 modello = DecisionTreeClassifier()
25
26 #addestro il modello
27 modello.fit(x_train, y_train)
28
29 #predizioni sui dati su cui ha imparato
30 predizione_train = modello.predict(x_train)
31
32 #predizioni su nuovi dati
33 predizione_test = modello.predict(x_test)
34
35 #misuro l'accuratezza sia dell'addestramento che del test
36 #questo puo' dare informazioni su over fitting o meno
37 #sinceramente non so come
38 print("accuratezza train")
39 print(accuracy_score(y_train, predizione_train))
40
41 print("accuratezza test")
42 print(accuracy_score(y_test, predizione_test))
43
44 #Rappresentazione grafica dei quanto e' stato bravo il modello
45 #sulle y c'e' la risposta che il modello doveva dare e
46 #sulle x ci sta la predizione che il modello ha dato, quindi gli
47 #elementi fuori diagonali sono le risposte sbagliate
48 skplt.metrics.plot_confusion_matrix(y_train,predizione_train)
49 skplt.metrics.plot_confusion_matrix(y_test,predizione_test)
50
51 plt.show()
52
53 [Output]
54 accuratezza train
55 1.0
56 accuratezza test
57 0.9736842105263158
```



La matrice di sinistra ci fa vedere come la predizione sui dati che abbiamo usato per addestrarla sia andata bene, infatti avevamo accuratezza uno; a sinistra vediamo che il modello ha dato una sola risposta sbagliata sui dati di test.

N.2 Regressori

Un regressore prende dei dati e restituisce un numero; è un po' come quando si fa un fit, circa...

```

1 import numpy as np
2 from sklearn.datasets import load_boston
3 from sklearn.linear_model import LinearRegression
4 from sklearn.metrics import mean_absolute_error
5 from sklearn.model_selection import train_test_split
6
7 """
8 utilizzo di un regressore lineare per predirre
9 Il prezzo di una casa dati certe informazioni
10 """
11 dataset = load_boston()
12
13 #print(dataset["DESCR"])
14 #primi 13 elemnti della prima riga
15 #print(dataset["data"][0])
16 #ultimo elemnto della prima riga
17 #print(dataset["target"][0])
18
19 #caratteristiche
20 X = dataset["data"]
21
22 #output, cioe' quello che il modello dovrebbe predire
23 y = dataset["target"]
24
25 #divido i dati, un parte li uso per addestrare, l'altra per
26 #testare se il modello ha imparato bene
27 X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y)
28
29 #modello non addestrato e' un regressore
30 #un regressore prende i dati e restituisce un numero, una stima di qualcosa
31 modello = LinearRegression()
32
33 #addestro il modello
34 modello.fit(X_train, y_train)
35
36 #predizioni
37 p_train = modello.predict(X_train)
38 p_test = modello.predict(X_test)
39
40 #errori sulla predizione
41 dp_train = mean_absolute_error(y_train, p_train)
42 dp_test = mean_absolute_error(y_test, p_test)
43
44 print("train", np.mean(y_train), "+-", dp_train)
45 print("test ", np.mean(y_test), "+-", dp_test)
46
47 [Output]
train 22.59815303430079 +- 3.1207001914064647

```

```
49 test 22.337795275590548 +- 3.806645940024761
```

N.3 Salvare il modello

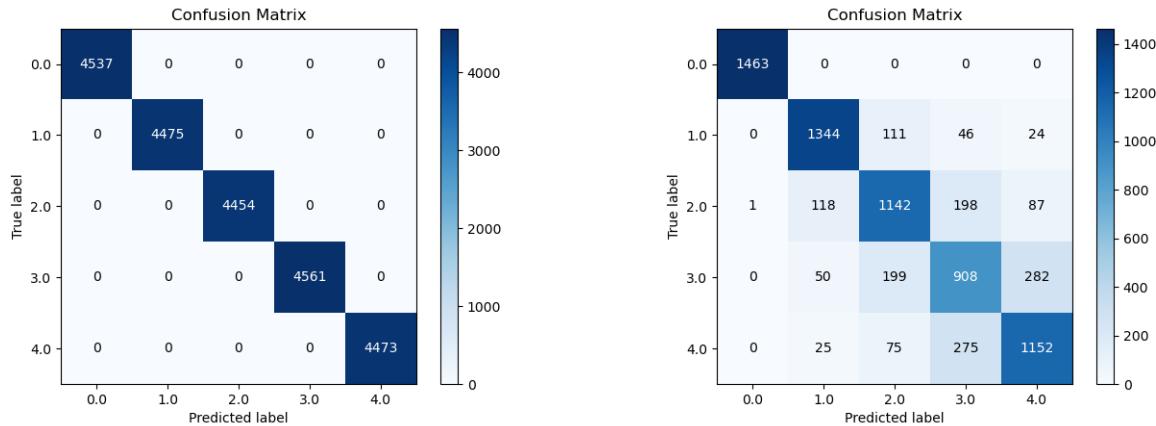
Ora giustamente voi mi potreste obiettare: Sì tutto molto bello, ma se spengo il computer il modello muore e devo riaddestrarlo. Effettivamente avete ragione ma chiaramente ci sta una soluzione a tutto ciò, nessuno vuole perdere tempo a riaddestrare il modello ogni volta che accende il pc. Vedremo due comandi della libreria 'joblib' che ci permetteranno di salvare il modello e di caricarlo poi su un altro codice. Per fare un semplice esempio che possa scalare bene con i parametri, consideriamo un classificatore a cui diamo in input una matrice $N \times M$ contenente delle curve del tipo $y(x) = x^k$ dove $k \in [0, 1]$. Prendiamo per k ad esempio 5 valori, e calcoliamo M curve in totale ognuna lunga N . Per rendere le cose un po' più complicate per la macchina il range in cui calcolare le curve è scelto a caso. Vediamo ora il codice:

```
1 ''
2 code that trains a model and saves it
3 ''
4 import joblib
5 import numpy as np
6 import scikitplot as skplt
7 import matplotlib.pyplot as plt
8 from sklearn.metrics import accuracy_score
9 from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
10 from sklearn.model_selection import train_test_split
11
12 path = r'C:\Users\franc\Desktop\mod.sav'
13
14 =====
15 # Creation of data set
16 =====
17
18 M = 30000 # numer data
19 N = 200 # len of each curve
20
21 X = np.zeros((N, M)) # matrix of features
22 d = np.linspace(0, 1, 5) # parameter of curves
23 t = np.zeros(M) # target index of d
24
25 for i in range(M):
26
27     # random interval
28     x1, x2 = np.random.random(2)*5
29     # each features is nothing but a curve y=x**k with k element of d
30     k = d[i%len(d)]
31     X[:, i] = np.linspace(x1, x2, N)**k
32     # the target must be integer so we use the corrispective indices
33     t[i] = i%len(d)
34
35 =====
36 # Creation and training of model
37 =====
38
39 x = X.T
40 y = t
41 # split fro train ad test
42 x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(x, y)
43
44 # define the model
45 modello = DecisionTreeClassifier()
46 # I train the model
47 modello.fit(x_train, y_train)
48 # predictions about the data on which it has learned
49 prediction_train = modello.predict(x_train)
50 # prediction on new data
51 prediction_test = modello.predict(x_test)
52
53 # accuracy
54 print("accuracy train")
55 print(accuracy_score(y_train, prediction_train))
56
57 print("accuracy test")
58 print(accuracy_score(y_test, prediction_test))
59
60 =====
61 # Plot confusion matrix
```

```

62 =====
63
64 skplt.metrics.plot_confusion_matrix(y_train, prediction_train)
65 skplt.metrics.plot_confusion_matrix(y_test, prediction_test)
66
67 plt.show()
68 =====
69 # Save model
70 #
71 =====
72
73 joblib.dump(modello, path)
74
75 [Output]
76 accuracy train
77 1.0
78 accuracy test
79 0.8012

```



Per rendere fattibile la cosa il target non è il valore dell'esponente ma l'indice dell'array in cui il valore è contenuto. Ora che abbiamo salvato il modello, possiamo spegnere il computer e se ci capita per strada un set di dati per cui la nostra macchina è stata addestrata possiamo riusarla. Vediamo come si fa:

```

1 '''
2 code that takes a model saved on your computer and uses it to make predictions
3 '''
4 import joblib
5 import numpy as np
6 import scikitplot as skplt
7 import matplotlib.pyplot as plt
8 from sklearn.metrics import accuracy_score
9
10 modello = joblib.load(r'C:\users\franc\Desktop\mod.sav')
11
12 =====
13 # Creation of data set with same features
14 =====
15
16 M = 1000 # numer data
17 N = 200 # len of each curve
18
19 X = np.zeros((N, M)) # matrix of featurrs
20 d = np.linspace(0, 1, 5) # parameter of curves
21 t = np.zeros(M) # target index of d
22
23 for i in range(M):
24
25     # random interval
26     x1, x2 = np.random.random(2)*5
27     # each features is nothing but a curve y=x**k with k element of d
28     k = np.random.choice(d)
29     X[:, i] = np.linspace(x1, x2, N)**k
30     # the target must be integer so we use the corrispective indices
31     t[i] = np.where(k==d)[0][0]
32
33 =====

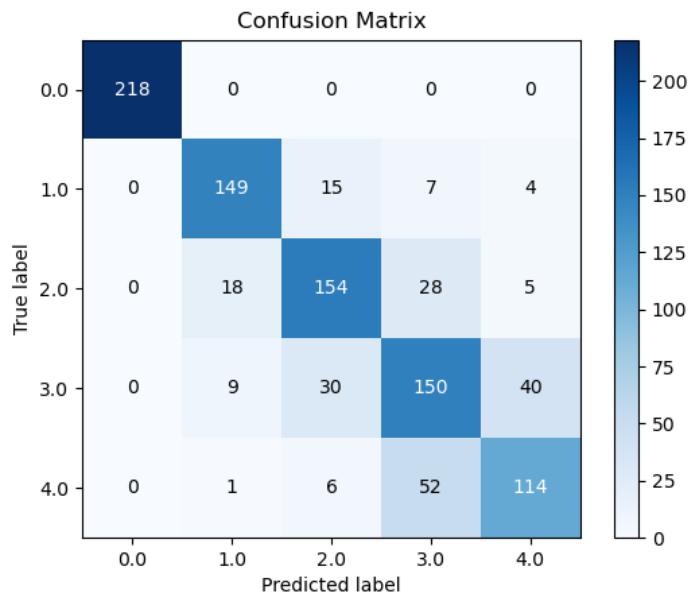
```

```

34 # Prediction on new data
35 =====
36
37 prediction = modello.predict(X.T)
38
39 print(f'Accuracy score = {accuracy_score(t, prediction)}')
40
41 skplt.metrics.plot_confusion_matrix(t, prediction)
42
43 plt.show()
44
45 [Output]
46 Accuracy score = 0.785

```

Vediamo che l'accuratezza è abbastanza buona, parente di quella sui dati di test del precedente codice. Qui il parametro che possiamo settare in maniera diversa è M , se proviamo a cambiare N otterremmo un errore, perché chiaramente la macchina sa fare solo quello per cui è stata addestrata.



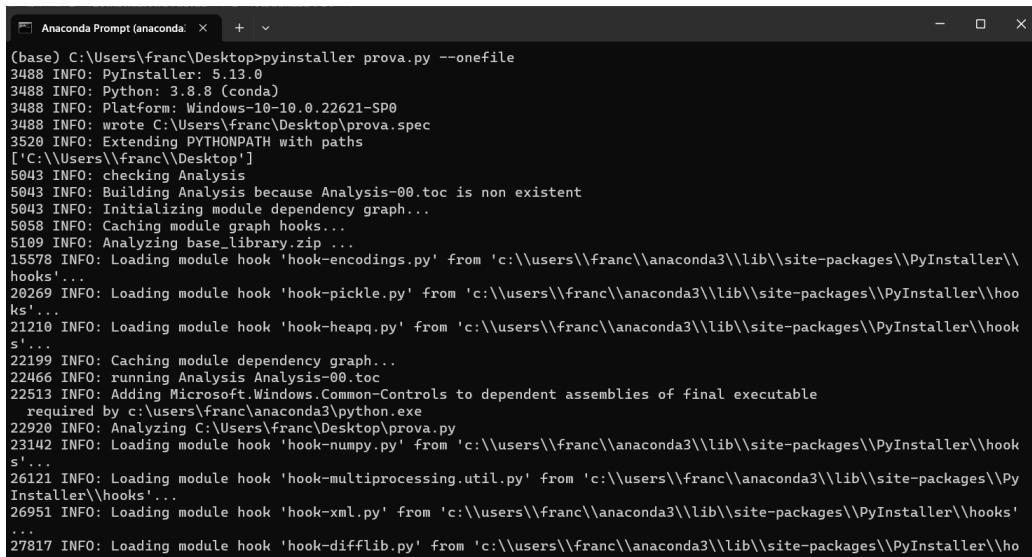
O Creare un eseguibile

Abbiamo visto che Python è un linguaggio interpretato e non compilato quindi non viene creato un eseguibile. Supponiamo però vi venga in mente di creare un eseguibile, come facciamo? Ci serve un pacchetto: pyinstaller, che ci permette di creare un eseguibile, con il caveat che se l'eseguibile lo creo su un certo sistema, esso potrà essere eseguito solo sullo stesso sistema; detto semplice se create un eseguibile su windows non potete eseguirlo su linux e viceversa. Come prima cosa creiamo quindi un piccolo file python di prova, che chiameremo prova.py (poca fantasia).

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 x = np.linspace(0, 1, 100)
5
6 for i in np.logspace(-1, 1, 50):
7     plt.plot(x, x**i)
8
9 plt.grid()
10 plt.show()
```

O.1 Esegibile windows

Dopo aver salvato il file dobbiamo installare pyinstaller e lo si può fare comodamente dalla shell di pyzo con pip install. Fatto ciò chiudiamo pyzo ed apriamo un prompt di comandi di anaconda/python, basta cercare sulla barra di ricerca windows: anaconda prompt ed eseguire (cioè scrivere e premere invio) la seguente linea: pyinstaller prova.py --onefile. Na cosa tipo questa:



```
(base) C:\Users\franc\Desktop>pyinstaller prova.py --onefile
3488 INFO: PyInstaller: 5.13.0
3488 INFO: Python: 3.8.8 (conda)
3488 INFO: Platform: Windows-10-10.0.22621-SP0
3488 INFO: wrote C:\Users\franc\Desktop\prova.spec
3520 INFO: Extending PYTHONPATH with paths
['C:\\\\Users\\\\franc\\\\Desktop']
5043 INFO: checking Analysis
5043 INFO: Building Analysis because Analysis-00.toc is non existent
5043 INFO: Initializing module dependency graph...
5058 INFO: Caching module graph hooks...
5109 INFO: Analyzing base_library.zip ...
15578 INFO: Loading module hook 'hook-encodings.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
20269 INFO: Loading module hook 'hook-pickle.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
21210 INFO: Loading module hook 'hook-heappq.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
22199 INFO: Caching module dependency graph...
22466 INFO: running Analysis Analysis-00.toc
22513 INFO: Adding Microsoft.Windows.Common-Controls to dependent assemblies of final executable
    required by c:\\users\\franc\\anaconda3\\python.exe
22920 INFO: Analyzing C:\\Users\\franc\\Desktop\\prova.py
23142 INFO: Loading module hook 'hook-numpy.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
26121 INFO: Loading module hook 'hook-multiprocessing.util.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
26951 INFO: Loading module hook 'hook-xml.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'...
27817 INFO: Loading module hook 'hook-difflib.py' from 'c:\\users\\franc\\anaconda3\\lib\\site-packages\\PyInstaller\\hooks'
```

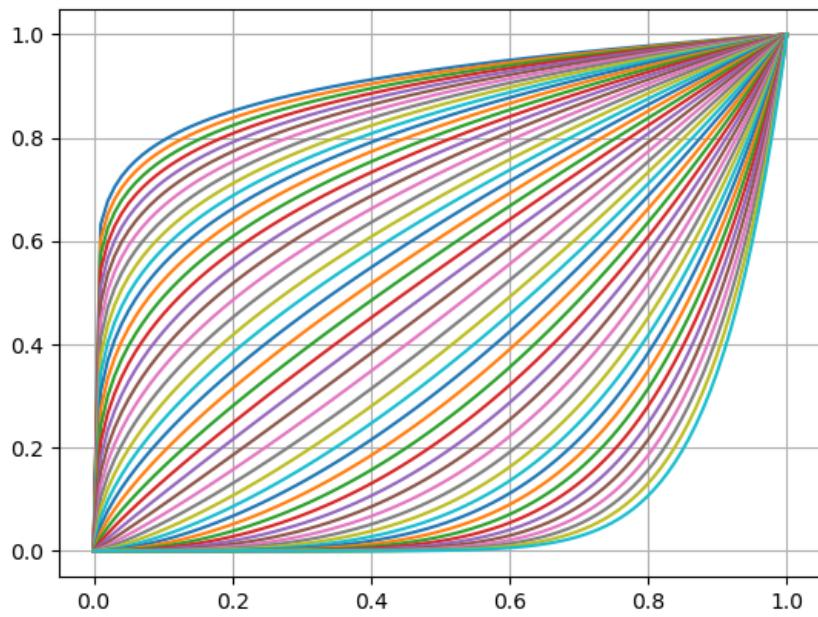
Verranno stampate tante cose sulla shell e l'operazione potrebbe richiedere un po'. Quando avrà finito, cioè quando riappaere la scritta che termina con > l'eseguibile sarà creato. Verrà creato nella cartella dove è salvato il file tre cose: un file. spec, una cartella nominata build e un'altra cartella nominata dist, che è quella che contiene l'eseguibile vero e proprio. Per eseguirlo bisogna aprire ora il prompt dei comandi di windows, andare nella cartella dove è l'eseguibile ed eseguirlo:



```
Microsoft Windows [Versione 10.0.22621.1848]
(c) Microsoft Corporation. Tutti i diritti riservati.

C:\Users\franc>cd Desktop
C:\Users\franc\Desktop>cd dist
C:\Users\franc\Desktop\dist>.\prova.exe
```

e si avrà l'output desiderato, (per la serie grafici carini):



O.2 Esegibile linux

Per linux il discorso è analogo, i comandi da usare sono gli stessi, solo che ora la shell è sempre la stessa. I nomi delle cartelle e dei file saranno uguali. Non so perché dovrebbe venire in mente di creare un eseguibile, da quali arcani motivi possiate essere spinti, ma comunque questo è un modo, sinceramente mai fatto roba del genere se non per scriverlo qui.

P Bibliografia e Conclusioni

Leggetevi il cazzo di manga.

Leggetevi la documentazione.

A parte gli scherzi, in questa sezione dovrebbe come giusto che sia esserci una bibliografia, delle referenze giustamente. Di certo devo ringraziare gli autori originali delle 4 brevi lezioni di cui questa versione è una rivotazione e ampliamento (al di là delle appendici è del corso avanzato): Antonio D'Abbruzzo, Maria Domenica Galati, Francesco Maio, Damiano Lucarelli, Giulio Carotta. Inoltre ringrazio anche Alice D'autilio per il logo che vedete nella prima pagina. Per il resto la sua assenza è dovuta al fatto che, tutto il resto è una raccolta di argomenti che ho appreso nel corso di 4 anni, cercando su internet come farle e studiando da lì. Quindi andare a rintracciare tutto sarebbe un po' difficile. Di certo però wikipedia è stata utile per non parlare di stackoverflow. Inoltre molti esempi si possono trovare sulla documentazione dei pacchetti. Quindi ecco, diciamo che la bibliografia di queste note è un po' tutto internet. Le vignette sono prese da <https://xkcd.com>

Come conclusione vorrei solo dirvi che ok potrei essermi lasciato andare con le appendici, ma è giusto per dare, a chi voglia leggerle, un'idea, una breve introduzione, un impatto non brusco con la programmazione e il calcolo scientifico. Proprio per questo poi da alcune appendici si è tratto il corso avanzato. Ho inserito in queste appendici delle introduzioni a tutto quello che penso che uno stendete di fisica possa trovarsi ad affrontare nel corso degli anni. Per chi segue il corso base di Python dell'aisf non mi aspetto minimamente che vengano lette tutte, spero che le lezioni vere e proprie risultino utili, e che magari, a distanza, essendosi impraticato con l'uso di python, qualcuno si ricordi che esistono queste appendici e che magari torni a vederle e leggerle. Ho un po' più di speranza per chi segue il corso avanzato ma in ogni caso nessun problema. Se mai qualcuno leggendo queste note avesse dei suggerimenti, o notasse degli errori, o analoghi, scrivetemi pure: zenofrancesco99@gmail.com.

See you Space Cowboy ...