

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

Laboratorio di Metodi Computazionali e Statistici (2022/2023)

Fabrizio Parodi e Roberta Cardinale

Dipartimento di Fisica - Università di Genova

Equazioni differenziali

$$y^{(n)}(x) = f(y^{(n-1)}(x), \dots, y(x), x)$$

dove f è nota e $y(x)$ è incognita.

La soluzione appropriata per un dato problema è quella che rispetta le condizioni al contorno.

Nel caso si stia studiando una evoluzione temporale, le condizioni al contorno sono date dai valori della funzione e delle sue derivate fino alla (n-1)-esima all'istante iniziale (ad esempio per $t=0$).

Equazioni differenziali

- Siamo interessati a risolvere problemi di dinamica (equazioni al second'ordine)
- Due approcci
 - Metodi generali, sviluppati al prim'ordine, adattati a problemi dinamici (second'ordine).
 - Metodi specializzati nella soluzione di problemi dinamici.

Metodo di Eulero

L'equazione differenziale medesima ci fornisce il valore della **derivata prima (la velocità) al tempo t_n** :

$$x'(t_n) = f(x(t_n), t_n)$$

Se assumiamo che in un breve **intervallo h la velocità resti costante** potremo scrivere (sviluppando secondo Taylor al prim'ordine):

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n)$$

Sostituendo $x'(t_n) = f(x(t_n), t_n)$ ottengo $x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n), t_n)$
Ridefinendo $x_{n+1} \equiv x(t_n + h)$ e $x_n \equiv x(t_n)$

Meccanismo iterativo:

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n, t_n)h + \mathcal{O}(h^2)$$

Questa relazione, nota la posizione iniziale $x(t_0) = x_0$, ci fornisce iterativamente $x(t_n)$ al primo ordine. Precisione modesta, instabile.

Il metodo di Runge-Kutta (1)

Per ottenere precisione maggiore occorre eseguire uno sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

$$x''(t_n) = ?$$

Espando $x'(t_n + h/2)$:

$$x'(t_n + h/2) = x'(t_n) + \frac{h}{2}x''(t_n)$$

Sostituisco x'' nello sviluppo di $x(t_n + h)$

Otengo

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
Sostituisco utilizzando l'ODE:

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
Sostituisco utilizzando l'ODE:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
Sostituisco utilizzando l'ODE:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Come calcolo $x(t_n + h/2)$ =?

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
Sostituisco utilizzando l'ODE:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Come calcolo $x(t_n + h/2)$ =? con Eulero!

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
 Sostituisco utilizzando l'ODE:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Come calcolo $x(t_n + h/2)$ =? con Eulero!

$$x(t_n + \frac{h}{2}) = x(t_n) + \frac{h}{2} x'(t_n) = x(t_n) + \frac{h}{2} f(x(t_n), t_n)$$

Il metodo di Runge-Kutta (2)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Notare che $x'(t_n + h/2)$ = derivata nel punto intermedio dell'intervallo!
 Sostituisco utilizzando l'ODE:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Come calcolo $x(t_n + h/2)$ =? con Eulero!

$$x(t_n + \frac{h}{2}) = x(t_n) + \frac{h}{2} x'(t_n) = x(t_n) + \frac{h}{2} f(x(t_n), t_n)$$

Definisco $k_1 = hf(x(t_n), t_n)$ (incremento centro intervallo h)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n) + \frac{k_1}{2}, t_n + h/2)$$

Runge-Kutta: Riassunto

Siamo partiti dallo sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Runge-Kutta: Riassunto

Siamo partiti dallo sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Abbiamo ricavato la formula di iterazione

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Runge-Kutta: Riassunto

Siamo partiti dallo sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Abbiamo ricavato la formula di iterazione

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Non conosco $x'(t_n + h/2)$, ci siamo ricondotti all'ODE

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Runge-Kutta: Riassunto

Siamo partiti dallo sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Abbiamo ricavato la formula di iterazione

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Non conosco $x'(t_n + h/2)$, ci siamo ricondotti all'ODE

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

Per trovare $x(t_n + h/2)$ abbiamo estrapolato con Eulero

$$x(t_n + h/2) = x(t_n) + \frac{h}{2}f(x(t_n), t_n)$$

Runge-Kutta: Riassunto

Siamo partiti dallo sviluppo al secondo ordine

$$x(t_n + h) = x(t_n) + x'(t_n)h + \frac{1}{2}x''(t_n)h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Abbiamo ricavato la formula di iterazione

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n + h/2)$$

Non conosco $x'(t_n + h/2)$, ci siamo ricondotti all'ODE

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n + h/2), t_n + h/2)$$

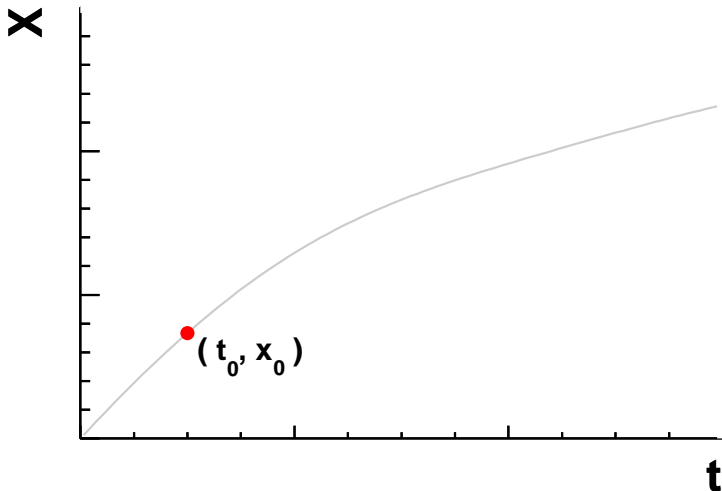
Per trovare $x(t_n + h/2)$ abbiamo estrapolato con Eulero

$$x(t_n + h/2) = x(t_n) + \frac{h}{2}f(x(t_n), t_n)$$

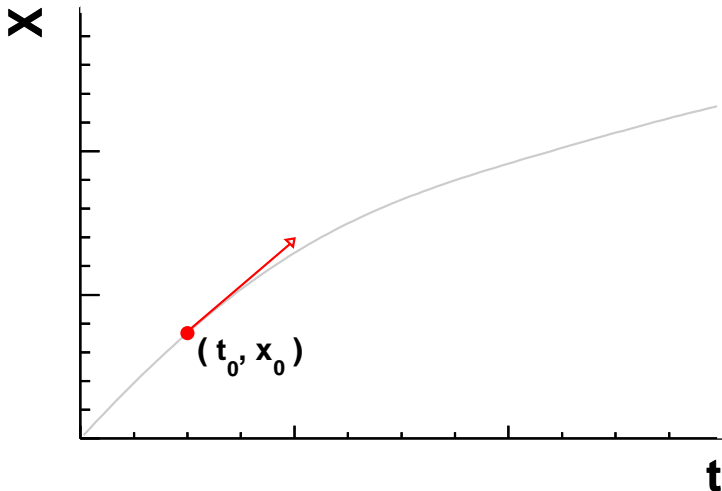
E definendo $k_1 = hf(x(t_n), t_n)$ (incremento intervallo h)

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hf(x(t_n) + \frac{k_1}{2}, t_n + h/2)$$

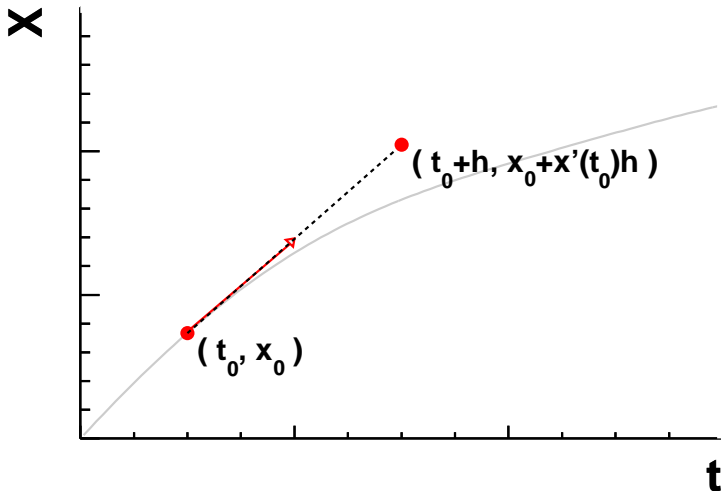
Metodo di Eulero (interpretazione grafica)



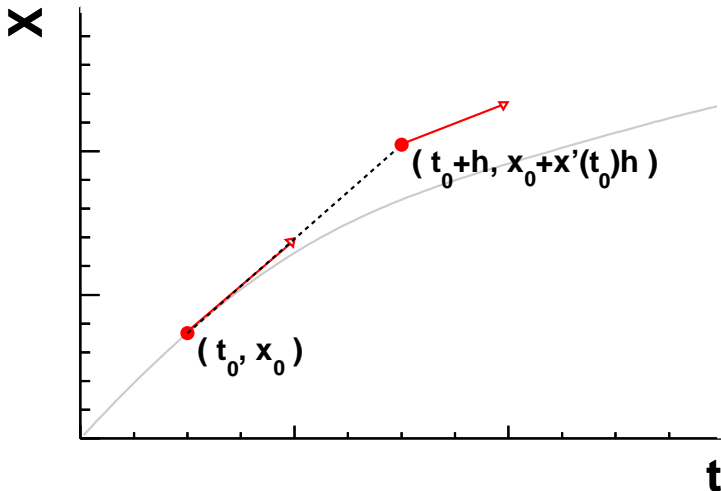
Metodo di Eulero (interpretazione grafica)



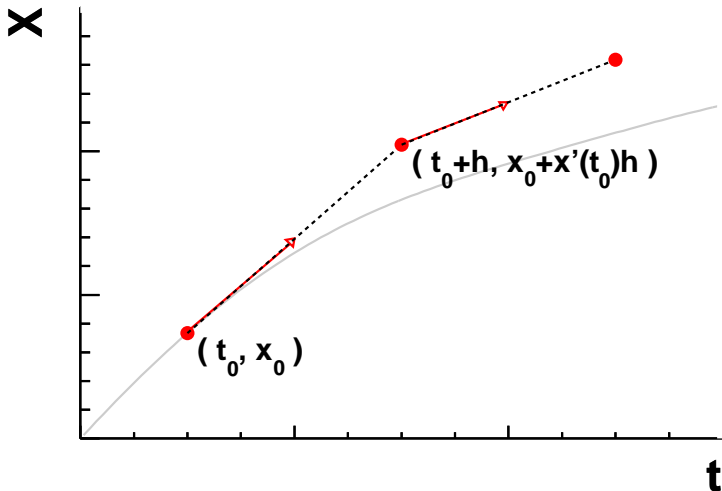
Metodo di Eulero (interpretazione grafica)



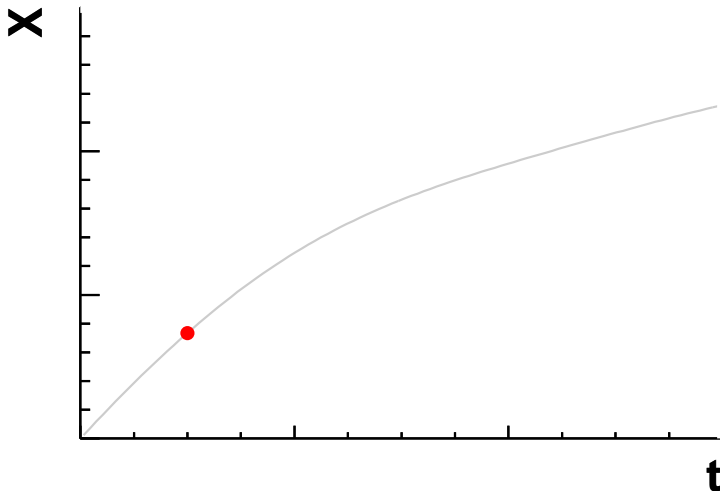
Metodo di Eulero (interpretazione grafica)



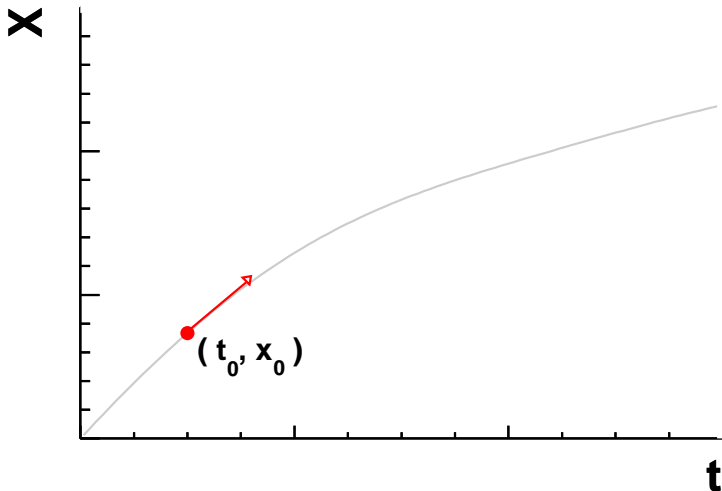
Metodo di Eulero (interpretazione grafica)



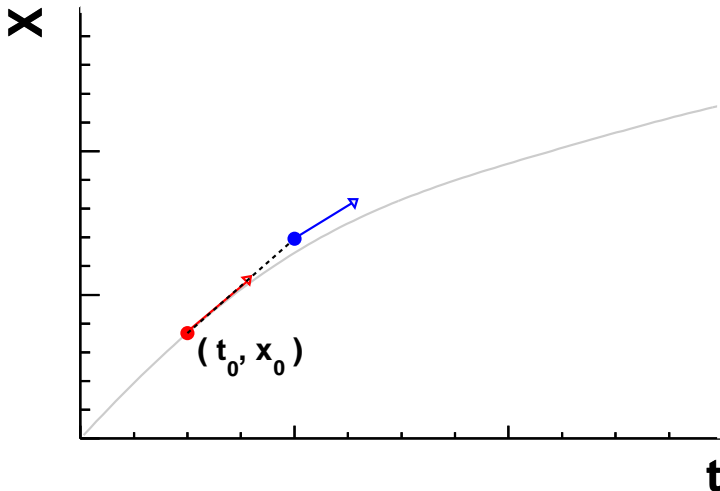
Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



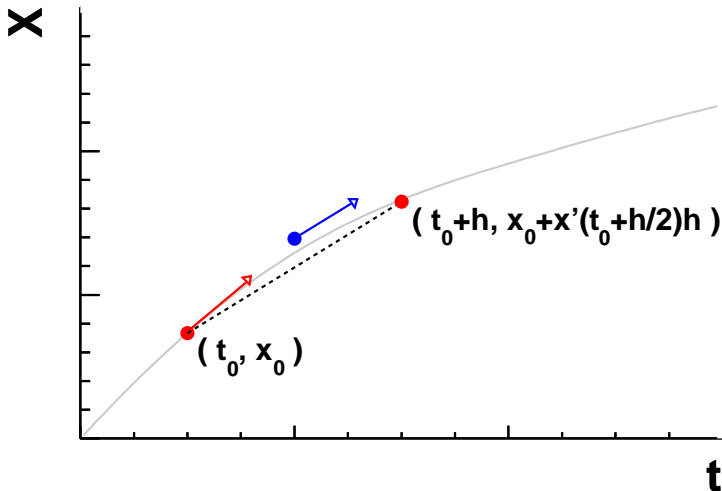
Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



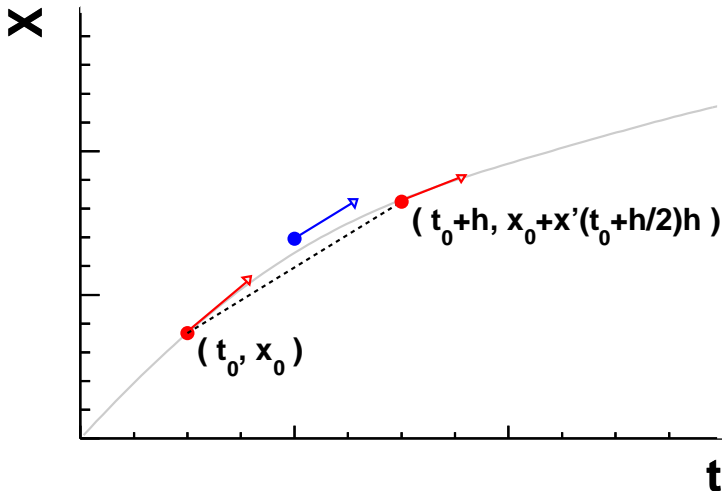
Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



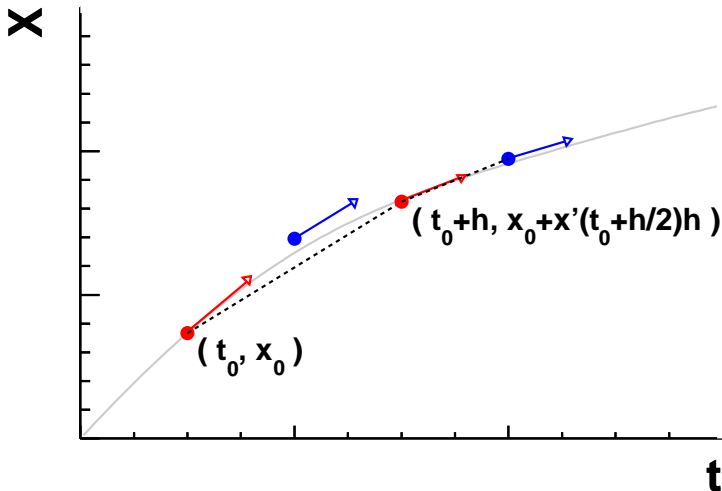
Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



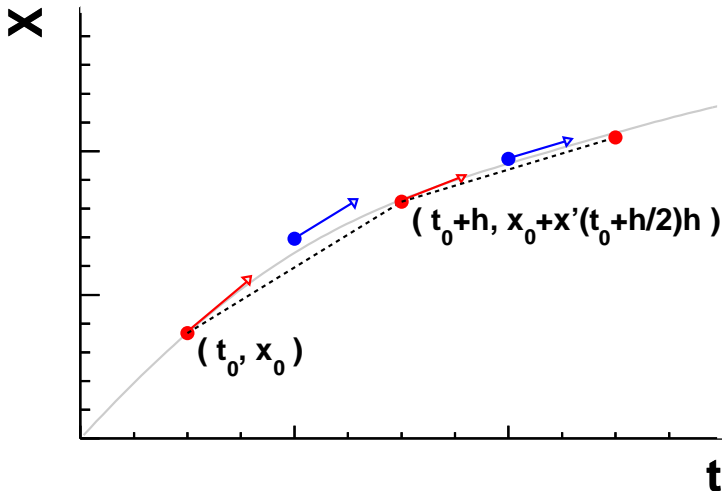
Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



Metodo di Runge-Kutta (interpretazione grafica)



Il metodo di Runge-Kutta (III)

Riassumendo possiamo dire che il metodo di Runge-Kutta di ordine due consiste nell'eseguire una estrapolazione del primo ordine da $x(t_n)$ a $x(t_n + h/2)$, nel valutare la derivata $x'(t_n + h/2)$ e nell'utilizzarla per ottenere una stima di $x(t_n + h)$ esatta al secondo ordine.

Vediamo la sequenza di calcolo:

Il metodo di Runge-Kutta (III)

Riassumendo possiamo dire che il metodo di Runge-Kutta di ordine due consiste nell'eseguire una estrapolazione del primo ordine da $x(t_n)$ a $x(t_n + h/2)$, nel valutare la derivata $x'(t_n + h/2)$ e nell'utilizzarla per ottenere una stima di $x(t_n + h)$ esatta al secondo ordine.

Vediamo la sequenza di calcolo:

derivata nel punto iniziale $k_1 = hf(x(t_n), t_n)$

Il metodo di Runge-Kutta (III)

Riassumendo possiamo dire che il metodo di Runge-Kutta di ordine due consiste nell'eseguire una estrapolazione del primo ordine da $x(t_n)$ a $x(t_n + h/2)$, nel valutare la derivata $x'(t_n + h/2)$ e nell'utilizzarla per ottenere una stima di $x(t_n + h)$ esatta al secondo ordine.

Vediamo la sequenza di calcolo:

derivata nel punto iniziale $k_1 = hf(x(t_n), t_n)$

estrapolazione al punto intermedio e derivata $k_2 = hf\left(x(t_n) + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right)$

Il metodo di Runge-Kutta (III)

Riassumendo possiamo dire che il metodo di Runge-Kutta di ordine due consiste nell'eseguire una estrapolazione del primo ordine da $x(t_n)$ a $x(t_n + h/2)$, nel valutare la derivata $x'(t_n + h/2)$ e nell'utilizzarla per ottenere una stima di $x(t_n + h)$ esatta al secondo ordine.

Vediamo la sequenza di calcolo:

derivata nel punto iniziale
$$k_1 = hf(x(t_n), t_n)$$

estrapolazione al punto intermedio e derivata
$$k_2 = hf\left(x(t_n) + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right)$$

estrapolazione a $t_n + h$
$$x(t_n + h) = x(t_n) + k_2 + \mathcal{O}(h^3)$$

Runge-Kutta di ordine quattro

Esistono metodi di Runge-Kutta ad ordini superiori al secondo. Occorre però raggiungere un compromesso tra precisione e numero di chiamate alla funzione (efficienza di calcolo).

Il metodo di Runge-Kutta al quarto ordine, del quale riportiamo solo la sequenza di calcolo, è in genere il più utilizzato.

$$k_1 = hf(x(t_n), t_n)$$

$$k_2 = hf\left(x(t_n) + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right)$$

$$k_3 = hf\left(x(t_n) + \frac{k_2}{2}, t_n + \frac{h}{2}\right)$$

$$k_4 = hf(x(t_n) + k_3, t_n + h)$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + \mathcal{O}(h^5)$$

Equazioni del secondo ordine

$F = ma$ è al secondo ordine !

Equazioni del secondo ordine

$F = ma$ è al secondo ordine !

Una generica equazione differenziale del secondo ordine è del tipo

$$x''(t) = f(x'(t), x(t), t)$$

Si può trasformare in un sistema di due equazioni del primo ordine ponendo

$$x'(t) = v(t)$$

si ottiene

$$\begin{cases} x'(t) = v(t) & = g(v(t), x(t), t) \\ v'(t) = f(v(t), x(t), t) & = f(v(t), x(t), t) \end{cases}$$

che è un sistema del primo ordine nelle variabili $x(t)$ e $v(t)$. Naturalmente, siccome ci sono due equazioni saranno necessarie due condizioni iniziali: $x(t_0)$ e $v(t_0)$.

Ovviamente lo stesso “trucco” funziona per tutti gli ordini.

Sistemi di equazioni differenziali

Nel caso si sia interessati alla soluzione dell'interazione di n corpi (si ricordi che non c'è soluzione analitica al sistema a tre corpi) il problema da risolvere è

$$\mathbf{x}_i''(t) = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}(\mathbf{x}_1', \dots, \mathbf{x}_N', \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t)$$

che deve essere riscritta come

$$\begin{cases} \mathbf{x}_i'(t) = \mathbf{v}_i(t) \\ \mathbf{v}_i'(t) = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, t) \end{cases}$$

Se abbiamo N corpi ($i = 1, \dots, N$) e risolviamo il problema in tre dimensioni si tratta di un sistema di $2 \times 3 \times N$ equazioni di primo grado.

Dobbiamo osservare che la quasi totalità dell'interdipendenza tra le equazioni del sistema risiede nel termine di forza.

Soluzioni di sistemi

Nota la soluzione di una singola equazione differenziale la soluzione di un sistema non presenta particolari problemi.

Lo sviluppo riportato di seguito (per RK al secondo ordine) richiede che le operazioni siano rigidamente sequenziali: si deve quindi fare attenzione ad eseguire ogni passo del calcolo (I, II, III) su tutte le equazioni prima di passare al passo successivo.

Soluzioni di sistemi

Nota la soluzione di una singola equazione differenziale la soluzione di un sistema non presenta particolari problemi.

Lo sviluppo riportato di seguito (per RK al secondo ordine) richiede che le operazioni siano rigidamente sequenziali: si deve quindi fare attenzione ad eseguire ogni passo del calcolo (I, II, III) su tutte le equazioni prima di passare al passo successivo.

$$I \begin{cases} k_{1i} = h v_i(t_n) \\ w_{1i} = h f_i(v_1(t_n), \dots, x_1(t_n), \dots, t_n) \end{cases}$$

I: calcolo di $x'_i(t_n)$ (banale: $x'_i(t_n) = v(t_n)$)
 calcolo di $v'_i(t_n)$ usando l'equazione differenziale

Soluzioni di sistemi

Nota la soluzione di una singola equazione differenziale la soluzione di un sistema non presenta particolari problemi.

Lo sviluppo riportato di seguito (per RK al secondo ordine) richiede che le operazioni siano rigidamente sequenziali: si deve quindi fare attenzione ad eseguire ogni passo del calcolo (I, II, III) su tutte le equazioni prima di passare al passo successivo.

$$\begin{aligned}
 \text{I} & \begin{cases} k_{1i} = h v_i(t_n) \\ w_{1i} = h f_i(v_1(t_n), \dots, x_1(t_n), \dots, t_n) \end{cases} \\
 \text{II} & \begin{cases} k_{2i} = h \left(v_i(t_n) + \frac{w_{1i}}{2} \right) \\ w_{2i} = h f_i \left(v_1(t_n) + \frac{w_{11}}{2}, \dots, x_1(t_n) + \frac{w_{11}}{2}, \dots, t_n + \frac{h}{2} \right) \end{cases}
 \end{aligned}$$

II: si estrapolano x_i e v_i al primo ordine a $t_n + h/2$
e si calcolano $x'_i(t_n + h/2)$ e $v'_i(t_n + h/2)$.

Soluzioni di sistemi

Nota la soluzione di una singola equazione differenziale la soluzione di un sistema non presenta particolari problemi.

Lo sviluppo riportato di seguito (per RK al secondo ordine) richiede che le operazioni siano rigidamente sequenziali: si deve quindi fare attenzione ad eseguire ogni passo del calcolo (I, II, III) su tutte le equazioni prima di passare al passo successivo.

$$\begin{aligned}
 \text{I} & \begin{cases} k_{1i} = h v_i(t_n) \\ w_{1i} = h f_i(v_1(t_n), \dots, x_1(t_n), \dots, t_n) \end{cases} \\
 \text{II} & \begin{cases} k_{2i} = h \left(v_i(t_n) + \frac{w_{1i}}{2} \right) \\ w_{2i} = h f_i(v_1(t_n) + \frac{w_{11}}{2}, \dots, x_1(t_n) + \frac{w_{11}}{2}, \dots, t_n + \frac{h}{2}) \end{cases} \\
 \text{III} & \begin{cases} x_i(t_n + h) = x_i(t_n) + k_{2i} + \mathcal{O}(h^3) \\ v_i(t_n + h) = v_i(t_n) + w_{2i} + \mathcal{O}(h^3) \end{cases}
 \end{aligned}$$

III: si calcolano $x_i(t_n + h)$ e $v_i(t_n + h)$

Valutazione dell'errore

In generale la precisione nei metodi Runge-Kutta aumenta diminuendo il passo; al tempo stesso però aumenta il numero di valutazioni della funzione. Il compromesso tra precisione e tempo di esecuzione è particolarmente rilevante nella soluzione numerica di equazioni differenziali.

In generale vorremmo che quando le posizioni e le velocità variano poco il passo aumenti mentre vorremmo che quando queste variano velocemente il passo diminuisca.

In altri termini vorremmo poter variare il passo in funzione dell'errore che stiamo per commettere.

Valutazione dell'errore

Immaginiamo di conoscere l'errore che stiamo per commettere nel passo i -esimo Δ sulla quantità A passando da t_i a $t_i + h$.

Definisco il massimo errore relativo (ε_{rel}) ed il massimo errore assoluto (ε_{abs}) che intendo accettare. L'errore massimo che accetto è $\Delta_{max} = \max(A \cdot \varepsilon_{rel}, \varepsilon_{abs})$.

Il passo può essere adattato seguendo questo schema:

- $\Delta < \Delta_{max}$ aumento l'ampiezza del passo;
- $\Delta > \Delta_{max}$ diminuisco l'ampiezza del passo (ritornando all'inizio del passo).

Come calcolo Δ ?

Passo variabile

- **Conservazione dell'energia**

Una tecnica possibile consiste nell'utilizzare come estimatore la variazione di energia di un sistema dove questa dovrebbe essere conservata.

Svantaggio: l'energia va riscritta a seconda della dinamica del sistema.

- **Raddoppio del passo**

Il passo da t_i a $t_i + 2h$ si fa prima in un colpo solo, poi in due passi e si prende la differenza tra le posizioni calcolate nei due casi come stima dell'errore.

Raddoppio del passo

Metodo generale (vale per sistemi conservativi e non).

Assumiamo di utilizzare un metodo di Runge-Kutta di ordine n . Per ogni passo dell'iterazione si fa un passo $2h$ e, indipendentemente, due passi di lunghezza h .

Denotiamo con $y(t + 2h)$ la soluzione esatta e con y_1 e y_2 le soluzioni approssimate ottenute rispettivamente con un solo passo pari a $2h$ o con due passi pari ciascuno a h .

$$y(t + 2h) = y_1 + (2h)^{n+1}\alpha + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

$$y(t + h + h) = y_2 + 2(h)^{n+1}\alpha + \mathcal{O}(h^{n+2})$$

(dove α è un numero dell'ordine di $y^{(n+1)}/(n+1)!$)

Calcolando $\Delta = |y_2 - y_1| = 2(2^n - 1)h^{n+1}|\alpha|$ si ottiene una valutazione dell'errore.

Posso quindi calcolare il valore ottimale h_{ideale} a partire dal passo "attuale":

$$\Delta \propto h^{n+1} \longrightarrow \Delta_{max} \propto h_{ideale}^{n+1}$$

$$h_{ideale} = \left(\frac{\Delta_{max}}{\Delta} \right)^{\frac{1}{n+1}} h$$

Metodi specifici per $F = ma$

- Vantaggio: conservano delle quantità
 - Eulero-Cromer: momento angolare
 - Verlet: simplettico
- Svantaggio: Specifici per $F = ma$

Eulero-Cromer

$$v_{n+1} = v_n + ha(x_n, v_n, t_n)$$

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1}$$

- Prima aggiorna la velocità con $a(x_n, v_n, t_n)$ (passo di Eulero)
- Aggiorna la posizione con la velocità alla fine dell'intervallo (v_{n+1}): in questo modo il momento angolare \vec{L} è conservato

Eulero Cromer conserva \vec{L} : in 2D $L_n^z = L_{n+1}^z$

$$\begin{aligned}
 L_{n+1}^z &= x_{n+1}v_{y(n+1)} - y_{n+1}v_{x(n+1)} = \\
 &= (x_n + \underline{v_{x(n+1)}h})v_{y(n+1)} - (y_n + \underline{v_{y(n+1)}h})v_{x(n+1)} = \\
 &= x_nv_{y(n+1)} - y_nv_{x(n+1)} = \\
 &= x_n(v_{y(n)} + a_{y(n)}h) - y_n(v_{x(n)} + a_{x(n)}h) = \\
 &= \underbrace{x_nv_{y(n)} - y_nv_{x(n)}}_{L_n^z} + \underbrace{x_na_{y(n)} - y_na_{x(n)}}_{(\vec{r} \wedge \vec{a})_n h = 0 \text{ se forza centrale}}h
 \end{aligned}$$

Verlet position

Scriviamo l'espansione di Taylor della posizione all'ordine 2 di $x(t_n + h)$ e $x(t_n - h)$

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

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

$$x(t_n + h) + x(t_n - h) = 2x(t_n) + h^2x''(t_n) + \mathcal{O}(h^4)$$

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2a_n + \mathcal{O}(h^4)$$

Verlet position

Svantaggi

- Formula implicita
 - x_{n+1} : è necessario conoscere non solo x_n ma anche x_{n-1} (mi servono due punti di partenza, x_n con Eulero)
 - Solo forma iterativa per la posizione, non per la velocità (Verlet Position)

Velocity Verlet

Scriviamo l'espansione di Taylor al secondo ordine di $x(t_n + h)$ e $v(t_n + h)$

$$x(t_n + h) = x(t_n) + hx'(t_n) + \frac{h^2}{2}x''(t_n)$$

$$v(t_n + h) = v(t_n) + hv'(t_n) + \frac{h^2}{2}v''(t_n)$$

$v''(t_n) = ?$ Non c'è modo di conoscerlo! Sviluppiamo $v'(t_n + h)$ al primo ordine:

$$v'(t_n + h) = v'(t_n) + hv''(t_n)$$

Ricaviamo $hv''(t_n)$ e sostituiamo in $v(t_n + h)$ e otteniamo:

$$hv''(t_n) = v'(t_n + h) - v'(t_n)$$

$$v(t_n + h) = v(t_n) + hv'(t_n) + \frac{h}{2}(v'(t_n + h) - v'(t_n)) = v(t_n) + \frac{h}{2}(v'(t_n + h) + v'(t_n))$$

$$x_{n+1} = x_n + hv_n + \frac{h^2}{2}a_n$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{2}(a_n + a_{n+1})$$

Velocity Verlet

$$x_{n+1} = x_n + hv_n + \frac{h^2}{2} a_n$$
$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{2} (a_n + a_{n+1})$$

- x_{n+1} è lo sviluppo al secondo ordine in h
- Abbiamo sviluppato v_{n+1} al secondo ordine, utilizzando l'espansione di $v'(t_n + h)$ abbiamo espresso v_{n+1} fino al secondo ordine solo con derivate prime
- Ma l'espansione di $v'(t_n + h)$ solo al primo ordine
- Da notare l'incremento di v è calcolato come $(a_n + a_{n+1})$ cioè come media nel punto iniziale e finale dell'intervallo

Verlet da minima azione

- Verlet deriva direttamente dal principio di minima azione
- Minimizzando l'azione rispetto a tutte le possibili traiettorie ottengo Verlet
- Le traiettorie generate da Verlet soddisfano le condizioni temporali al contorno della traiettoria reale.
- Ne risulta che Verlet è
 - mantiene, con buona approssimazione, le grandezze conservate dal sistema
 - temporalmente reversibile
 - conserva il volume dello spazio delle fasi (cioè è simplettico)
- Dimostriamo che Verlet position deriva dal principio di minima azione (si potrebbe fare anche con Verlet velocity ma è più complicato)

Verlet da minima azione

$$S = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L} dt \qquad \frac{\delta S}{\delta x(t)} = 0$$

$$S = \sum_n \mathcal{L}_n h = h \sum_n \mathcal{L}_n = h \sum_n \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{x_{n+1} - x_n}{h} \right)^2 - U(x_n) \right)$$

$$\frac{\delta S}{\delta x(t)} = \frac{1}{2} \frac{m}{h} (-2(x_{n+1} - x_n) + 2(x_n - x_{n-1})) - \frac{\delta}{\delta x_n} \frac{2h^2}{m} U(x_n) = 0$$

$$= \frac{m}{h} (-x_{n+1} + x_n + x_n - x_{n-1}) + \frac{h^2}{m} F_n = 0$$

$$= 2x_n - x_{n-1} - x_{n+1} + h^2 a_n = 0$$

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + h^2 a_n$$

Verlet da minima azione

- Verlet mantiene con buona approssimazione le grandezze conservate (energia e momento angolare)
- È un risolutore al secondo ordine
- Conserva meglio le grandezze conservate rispetto a RK2 (a parità di passo)
- RK4 è più preciso perchè di ordine 4
- Verlet solitamente viene utilizzato per sistemi a molti corpi (numero limitato di valutazioni di funzioni rispetto a RK4)
- Verlet e Eulero-Cromer sono limitati ad un problema specifico: problema della dinamica (classica)

Integratore relativistico

Come si possono estendere i nostri integratori ODE per trattare il caso relativistico ?

Basta riscrivere il sistema di equazioni sostituendo \mathbf{v} con \mathbf{p} (tenendo conto delle relazioni della relatività ristretta):

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m}$$

Integratore relativistico

Come si possono estendere i nostri integratori ODE per trattare il caso relativistico ?

Basta riscrivere il sistema di equazioni sostituendo \mathbf{v} con \mathbf{p} (tenendo conto delle relazioni della relatività ristretta):

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{a} = \frac{\mathbf{F}}{m}$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m\gamma}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$$

Integratore relativistico

$$E = \gamma mc^2$$

$$\gamma = \frac{E}{mc^2}$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m\gamma} = \frac{\mathbf{p}c^2}{E} = \frac{\mathbf{p}c^2}{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}}$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}$$

Creazione della classe OdeSolver

Classe che risolve l'ODE: eredita da altre classi? (Vettore, Punto Materiale, Particella...)

- Contenuto
 - Punti Materiali
 - Equazione differenziale in forma generica

$$a_i = \frac{F_i^{\text{ext}}}{m_i} + \frac{\sum_{i \neq j} F_{ij}^{\text{int}}}{m_i} = a_i^{\text{ext}} + \sum_{i \neq j} a_{ij}^{\text{int}}$$

- Altre “caratteristiche” dell'integratore: passo, tempo, metodo
- Interfaccia:
 - Setters e Getters per tutti i membri privati
 - Funzioni generiche (template) per forze (o accelerazioni) interne ed esterne
 - Metodo che, implementando il solutore, fa un singolo passo (dipendente dal metodo)

$$\mathbf{r}_i(t_n) \rightarrow \mathbf{r}_i(t_n + h)$$