

Compito finale Progetti

2021-2022

APPROSSIMAZIONE NUMERICA DI ODES

1 Guida generale per il compito finale

Ci sono almeno tre possibilità:

1. Fare un compendio con argomenti di tutti i compiti (prendendo i punti più rilevanti). Scegliere un metodo (a parte eulero esplicito e implicito) e scrivere in modo dettagliato lo studio di convergenza. Scegliere uno o due problemi test e fare uno studio comparativo dei metodi implementati. Detto studio, comporta anche uno studio del problema scelto e tutte le considerazioni opportune riguardo l' stabilità.
2. Scegliere un progetto tra quelli proposti, e/o concordare col docente un progetto che loro vorrebbero proporre in alternativa (che non sia tra quelli descritti in queste pagine).
3. Scegliere un argomento non visto a lezione tra cui:
 - Integratori esponenziali (eulero e RK)
 - Metodi RK Diagonalmente impliciti : metodi di Rosenbrock
 - Un'altro argomento proposto dagli studenti (che abbia relazione col corso) e concordato col docente.

Ed studiare convergenza, stabilità e ulteriori proprietà. In questo punto verrà fornito del materiale.

In ogni caso

- Ogni gruppo deve scegliere una delle opzioni precedente.
 - Ogni gruppo consegna **un** elaborato sul progetto e i programmi matlab usati per sviluppare il progetto.
 - Ogni membro dei gruppi, dovrà esporre a tutti gli altri studenti, qualche aspetto in relazione al progetto scelto oppure qualche parte teorica che non è stata coperta in dettaglio dalle lezioni. (Qua sempre, andrà concordato col docente).
- Le esposizioni degli studenti, idealmente si faranno durante Gennaio-Febbraio.

- Idealmente, ogni gruppo fa progetti diversi e ogni studente sceglie un argomento diverso..

2 Alcuni problemi Hamiltoniani proposti

Le seguenti sono alcune possibili proposte di progetti.

2.1 Sistemi con un grado di libertà. Problema del pendolo.

Si considera un pendolo nel piano \mathbb{R}^2 . Il Hamiltoniano viene descritto come:

$$(2.1) \quad H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 - \frac{g}{L}\cos q$$

dove L denota la lunghezza del pendolo, g la costante di gravitazione. In questo caso, la variabile q descrive l'angolo del pendolo col asse verticale e p rappresenta la velocità angolare.

Le orbite sono le curve di livello della superficie $H(p, q) = \text{costante}$. In particolare, gli equilibri del sistema corrispondono ai punti critici sulla superficie (minimi corrispondono a equilibri stabili; punti sella a equilibri instabili). Scrivere il sistema Hamiltoniano risultante ed studiare le sue proprietà.

- (a) Come condizioni iniziali si possono prendere $q(0) = 7/(6\pi)$, $p(0) = 0$. Approssimare la soluzione per tempo $T = 5000$, per un pendolo con $\frac{g}{L} = 1$ con i diversi schemi, misurando la variazione dell'energia totale. Discutere confrontando sempre con la teoria.
- (b) Per un pendolo senza frizione (tipicamente chiamato *spring pendulum*), il Hamiltoniano $H : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ si scrive come:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{p}\|^2 + \frac{1}{2}(\|\mathbf{q}\| - 1)^2 + q_2,$$

dove \mathbf{q} denota la posizione e \mathbf{p} l'impulso. Considerare l'approssimazione numerica con i diversi metodi: Studiare le traiettorie, anche per tempi lunghi ($T \geq 1000$ oltre alla variazione nell'energia totale. Considerare, se possibile, un metodo di splitting (volendo anche di ordine alto).

- (c) **pendolo matematico; Forze costringenti:** Considerare ora la configurazione del pendolo matematico, dove la gravità agisce verticalmente e la forza di tensione della corda agisce nella direzione del vettore direttore che unisce la pallina con l'origine; costringendo la pallina appesa a muoversi in una traiettoria circolare perché la risultante delle forze è nella direzione del vettore tangente a questa traiettoria circolare:

$$F_t(\mathbf{x}) - mg(0, 1)^T \perp \mathbf{x}.$$

Le equazioni quindi che descrivono il movimento per una pallina di massa $m = 1$, sono:

$$(2.2) \quad \ddot{\mathbf{x}} = -\lambda \mathbf{x} - g(0, 1)^T, \quad x_1^2 + x_2^2 = L^2,$$

dove λ indica un moltiplicatore di Lagrange (che deve anche essere calcolato!). (La forza di tensione responsabile di costringere il movimento della pallina si rappresenta come: $F_t(\mathbf{x}) = -\lambda \mathbf{x}$). Riscrivere il sistema (2.2) come un sistema di primo ordine (che deve anche soddisfare la costrizione $\|\mathbf{x}\|^2 = L^2$). Derivando due volte la costrizione (e usando le equazioni del movimento) si può risolvere esplicitamente per λ . Considerare l'approssimazione del sistema che risulta con la costrizione (per $L = 1$) e studiare qualitativamente le capacità dei diversi metodi. Considerare anche almeno un metodo di Radau (L -stabile). Come condizioni iniziali si possono prendere $x_1(0) = -x_2(0) = \sqrt{2}/2$, $p_1(0) = p_2(0) = 0$. Considerare l'approssimazione nell'intervallo di tempo $[0, 50]$.

Usare anche le funzioni di matlab `ode15s/ode23t`. (Si deve prima leggere attentamente il help, perché si devono introdurre i dati in forma particolare).

- (d) Per i metodi non-simplettici, considerare l'approssimazione con i corrispondenti metodi proiettati.

2.2 Meccanica di Newton: Problema di N corpi, Movimento Gravitazionale

Siano $p_i, q_i \in \mathbb{R}^3$ e consideriamo il Hamiltoniano (energia totale)

$$(2.3) \quad H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \mathbf{p}_i^T \mathbf{p}_i + \sum_{1 \leq i < j \leq N} U_{ij}(\|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|),$$

che rappresenta l'energia cinetica e l'energia potenziale da cui deriva la forza gravitazionale. Più precisamente, abbiamo:

$$(2.4) \quad U_{ij}(r) := -\mathcal{G} \frac{m_i \cdot m_j}{r_{ij}} \quad r_{ij} := \|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|,$$

dove \mathcal{G} denota la costante di gravitazione universale.

Lungo le soluzioni esatte (i.e., le soluzioni continue) del sistema Hamiltoniano (??) associato a (2.5) vengono preservate le seguenti quantità, cioè le seguenti funzioni sono *primi integrali* del sistema (vedere (??)):

- Hamiltoniano (total energy) $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$
- linear momentum $P(\mathbf{q}, \mathbf{p}) := \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i$

- angular momentum $L(\mathbf{q}, \mathbf{p}) := \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i = \sum_{i=1}^N (\mathbf{q}_i \times \mathbf{p}_i)$.
- Ogni componente di $\mathbf{m} = (\mathbf{q} \times \mathbf{p})$ é una integrale prima.
- Vettore di Runge-Lenz $\mathbf{e}_i = \mathbf{p}_i \wedge \mathbf{m}_i - \frac{\mathbf{q}_i}{\|\mathbf{q}\|}$

Si deve osservare che questo sistema ha $d = 3$ gradi di libertà. A seconda della definizione del potenziale e le forze di interazione abbiamo diversi problemi.

2.3 Problema di N corpi per il movimento planetario: Problema di Keplero

Prendiamo $N = 1$ e consideriamo il movimento di un pianeta. Tenendo conto che ogni componente del momento angolare $(\mathbf{q} \times \mathbf{p})$ é una integrale prima, e le proprietà del prodotto vettoriale

$$\mathbf{q} \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{p}) = 0; \quad \mathbf{p} \cdot (\mathbf{q} \times \mathbf{p}) = 0,$$

segue che \mathbf{q} e \mathbf{p} sono sempre ortogonali al vettore del momento angolare $(\mathbf{q} \times \mathbf{p})$. Assumendo che $(\mathbf{q} \times \mathbf{p})$ é nella direzione di q_3 , si deduce che $p_3 = 0$ e quindi q_3 é costante lungo le traiettorie. Possiamo quindi ridurci alla versione due (a)dimensionale del problema di Keplero con Hamiltoniano

$$(2.5) \quad H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}),$$

Il sistema risultante ha due gradi di libertà e due integrali prime; H e la terza componente del momento angolare $(\mathbf{q} \times \mathbf{p})$. Il sistema preserva anche il Vettore di Runge-Lenz, e le traiettorie delle soluzioni sono chiuse e periodiche (per valori di $H < 0$ sono ellissi). Studiare i metodi per diversi passi di tempo e per evoluzioni in tempi lunghi (per esempio $[0, 1000]$). Osservare che il sistema che risulta, sarà localmente Hamiltoniano, ma non globalmente (H non é definito in $\mathbf{0}$).

- (a) Il sistema é separabile per cui, é consigliato considerare un metodo tipo splitting, considerando energia cinetica ($T(\mathbf{p})$) e potenziale ($V(\mathbf{q})$) separatamente. Studiare le integrali prime che preserva il metodo di splitting (osservare che non potrà preservare il Vettore di Runge-Lenz \mathbf{e} , perché é una integrale prima per H ma non per T o V separatamente).
- (b) Prendiamo ora $N = 2$ e consideriamo Due pianeti attorno a una stella (oppure il sole). Prendiamo $N = 2$ e consideriamo il movimento di due pianeti attorno a una stella oppure al sole (che si considera fissa e centro del sistema, nell'origine di coordinate). Otteniamo:

$$(2.6) \quad H(p, q) = \frac{1}{2m_1} \|\mathbf{p}_1\|^2 + \frac{1}{2m_2} \|\mathbf{p}_2\|^2 - \mathcal{G} \frac{m_1 \cdot m_0}{\|\mathbf{q}_1\|} - \mathcal{G} \frac{m_2 \cdot m_0}{\|\mathbf{q}_2\|} - \mathcal{G} \frac{m_2 \cdot m_1}{\|\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2\|}$$

Il sistema é separabile. Considerare uno splitting in tre sistemi (due risolvono sistemi di Keplero indipendenti, il terzo risolve l'accoppiamento). Studiare le integrali prime che vengono preservate dal metodo di splitting. Considerare un'ulteriore splitting dato da $H_1 + H_2$ e H_3 , dove H_3 si riferisce al potenziale di interazione.

- (c) Considerare la costruzione di un metodo di ordine alto (usando l'idea dei metodi compositi, e passi di tempo anche negativi) partendo da un metodo di collocazione di Gauss di ordine basso. Studiare se le prime integrali vengono preservate.
- (d) Per almeno uno dei metodi non symplettici, considerare l'approssimazione con il corrispondente metodo proiettato.

2.4 Meccanica Newtoniana: Movimento dovuto a un campo magnetico (un problema di fisica di plasma)

Si considera un sistema di particelle in movimento dovuto a un campo elettro-magnetico. Rappresenta anche il modello classico della dinamica di un (o vari) elettrone nel campo (forza) creato da un protone o di un nucleo con carica positiva. Per ora, si assume che non ci sono collisioni nel sistema. Si può considerare la generalizzazione in cui il elettrone si muove non solo per la azione del potenziale di Culomb ma anche per la azione creata da un campo magnetico esterno \mathbf{b} . Sia $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ il vettore che rappresenta tale campo (magnetico), le equazione del movimento di una particella (elettrone) sono:

$$(2.7) \quad m\ddot{\mathbf{q}} = -\gamma \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3} + \mathbf{b} \wedge \dot{\mathbf{q}}$$

dove m é la masa dell'elettrone e $\gamma > 0$ é costante. Definendo il momento nel modo usuale, si arriva al sistema di primo ordine:

$$(2.8) \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \frac{1}{m}\mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\gamma \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3} - \frac{1}{m}\mathbf{p} \wedge \mathbf{b} \end{cases}$$

Si può verificare che detto sistema non é un sistema Hamiltoniano canonico; cioè non può scriversi come (??) (le derivate seconde miste non sarebbero uguali). Nonostante definendo

$$(2.9) \quad \hat{J} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & \hat{B} \end{bmatrix} \quad \hat{B} := \begin{bmatrix} 0 & -b_3 & b_2 \\ b_3 & 0 & -b_1 \\ -b_2 & b_1 & 0 \end{bmatrix}$$

ed il Hamiltoniano:

$$(2.10) \quad H(q, p) = \frac{1}{2m} \|\mathbf{p}\|^2 - \frac{\gamma}{\|\mathbf{q}\|} = \frac{1}{2m} \|\mathbf{p}\|^2 + V(\mathbf{q})$$

si ottiene una descrizione Hamiltoniana *non canonica* che verifica $\dot{z} = \hat{J} \nabla_z H(z)$ (scrivere le equazioni!!).

Questo sistema preserva il momento magnetico; che nella forma del sistema (3.1) si scrive come:

$$\nu = \mathbf{b} \cdot \left(\mathbf{q} \wedge \left(\mathbf{p} - \frac{1}{2} \mathbf{b} \wedge \mathbf{q} \right) \right)$$

Inoltre il sistema corrispondente a (2.10) ($\dot{z} = \hat{J} \nabla_z H(z)$) ha un hamiltoniano separabile, e quindi, in principio, ammette la costruzione di un metodo di tipo splitting: $H_2 = V(\mathbf{q})$ a cui corrispondono le equazioni

$$(2.11) \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = 0 \\ \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \end{cases}$$

mentre che per l'energia cinetica $H_1 = \frac{1}{2m} \|\mathbf{p}\|^2$ con equazioni ($\dot{z} = \hat{J} \nabla_z H_1(z)$)

$$(2.12) \quad \begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p}/m, \\ \dot{\mathbf{p}} = \frac{1}{m} \mathbf{b} \wedge \mathbf{p} = \frac{1}{m} \hat{B} \mathbf{p}, \end{cases}$$

dove \hat{B} é la matrice definita in (2.9). Usando questo splitting il metodo di Scovel é stato proposto (si descrive sotto). Notare che per il calcolo del flusso esatto del sistema (2.12), si dovrebbe usare l'esponenziale della matrice \hat{B} (si può usare la funzione `expm` di matlab). Siccome \hat{B} é antisimmetrica, ci sono delle opzioni per approssimare l'esponenziale della matrice abbastanza economiche; In particolare la tranformata di Caley:

$$(2.13) \quad e^{\hat{B}t} \approx Q_{caley} = (I - \hat{B}) \cdot (I + \hat{B})^{-1} \quad Q_{caley} = (I + \hat{B})^{-1} \cdot (I - \hat{B}).$$

La funzione `expm` di MATLAB usa in realtà un algoritmo che usa approssimanti di Padé. In realtà, in questo caso (siamo in dimension tre, $d = 3$) si può riconoscere la matrice \hat{B} come una matrice di *rotazione*. Definendo $\beta := \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2}$ e usando la formula di Rodrigues':

$$(2.14) \quad e^{\hat{B}t} = I + \frac{\sin(\beta t)}{\beta} \hat{B} + \frac{(1 - \cos(\beta t))}{\beta^2} \hat{B}^2 = G(t),$$

e quindi l'espressione esplicita non richiede la risoluzione di nessun sistema. In questo modo, per il calcolo dei flussi *esatti*, una volta calcolata \mathbf{p} usando la seconda equazione in (2.12), si

più risolvere per \mathbf{q} integrando direttamente:

$$(2.15) \quad \mathbf{q}(t) = \mathbf{q}(0) + \frac{1}{m} \int_0^t e^{\hat{B}s} ds = \mathbf{q}(0) + \frac{1}{m} \int_0^t G(s) ds = \mathbf{q}(0) + \frac{1}{m} F(t) \mathbf{q}(0)$$

dove $F(t) \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ è la (matrice) primitiva della matrice $G(t)$ definita in (2.14). Il metodo di Scovel consiste in usare la idea di splitting simetrico (Strang), usando i flussi esatti di H_1 e H_2 , considerando:

$$\Psi_{dt} = \Phi_{dt/2, H_2} \circ \Phi_{dt, H_1} \circ \Phi_{dt/2, H_2}$$

dove Φ_{dt, H_i} corrisponde al flusso esatto dal sistema scisso per H_i ; (intendendo che per il calcolo del flusso esatto per H_1 si usa la formula di Rodrigues'). Basta considerare un metodo tipo Störmer-Verlet in velocità, usando questi flussi esatti.

- (a) Fare un primo studio teorico del problema, per convincersi che avendo definito la matrice \hat{J} di struttura non canonica, i risultati visti a lezione, possono essere generalizzati senza problemi. Considerare l'approssimazione numerica del problema, nel caso $m = 1$, e come primo esperimento $\mathbf{b} = (0, 0, 1)^T$, e condizioni iniziali

$$\mathbf{q} = (1, 1, 1)^T \quad \mathbf{p} = (0, 0, 0)^T;$$

e anche

$$\mathbf{q} = (0, -1, 0)^T \quad \mathbf{p} = (0.1, 0.01, 0)^T;$$

In questo ultimo caso, con un metodo di passo fisso, usando $h = \pi/10$ calcolare l'approssimazione dopo almeno $n_{passo} = 10^5$ e disegnare le prime due componenti della soluzione approssimata per $n_{passo} < 2300$ e per $10^5 - 2300 < n_{passo} < 10^5$. Studiare la conservazione dell'energia e del momento magnetico.

- (b) **Campo magnetico non costante:** Consideriamo ora il caso di un campo magnetico non costante $\mathbf{b}(\mathbf{q})$, $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^3$. Assumiamo il campo é a divergenza nulla $\nabla_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{q}) = 0$. (Saprebbe dire se questa condizione é necessaria?). Siccome assumiamo \mathbf{b} solenoidale, possiamo introdurre un potenziale vettoriale $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ tale che $\nabla_{\mathbf{q}} \wedge \mathbf{A}(\mathbf{q}) = \mathbf{b}(\mathbf{q})$. Si definisce il corrispondente Hamiltoniano

$$H_c(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \|\mathbf{p} + \mathbf{A}(\mathbf{q})\|^2 - \frac{\gamma}{\|\mathbf{q}\|}.$$

Scrivere il sistema Hamiltoniano che risulta. Può essere scritto in forma canonica? Fare uno studio numerico (simile al caso (a)) in questo caso.

- (c) Per almeno uno dei metodi non-simplettici considerati (uno che si pensi dia un'approssimazione accettabile), considerare l'approssimazione con il corrispondente metodo proiettato (almeno per la descrizione del caso (a).!)

2.5 Meccanica Newtoniana: Problema di N corpi in Dinamica Molecolare

Siano $q_i, p_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$ le coordinate generalizzate corrispondenti a un sistema di N particelle che possono essere molecole oppure atomi (ognuna con la sua posizione q_i e momento p_i). Ogni particella esercita una forza d'attrazione e repulsione su tutte le altre particelle, chiamata anche forza d'interazione interatomica o intermolecolare che dipende in modo inverso della distanza tra le particelle; e di repulsione con le particelle più vicine (detta interazione a corto raggio) e d'attrazione con quelle più lontane (grosse distanze). Questa forza deriva tipicamente di un potenziale. Uno dei potenziali più frequentemente utilizzati per descrivere l'interazione tra particelle prive di carica è il potenziale di *Lennard-Jones* (chiamato così in onore dello scienziato che l'ha introdotto):

$$(2.16) \quad U(r_{ij}) := 4\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_i}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_i}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad r_{ij} := \|q_i - q_j\|_2 \quad i \neq j \quad i, j = 1, \dots, N.$$

dove ϵ_{ij} viene soprannominata buca di potenziale ed non è altro che il potenziale massimo per l'interazione delle particelle i e j . La costante $\sigma_i > 0$ denota il raggio della particella i -esima; queste vengono considerate come sfere rigide. La forza d'interazione viene quindi ricavata come

$$(2.17) \quad F(r_{ij}) := -\nabla U(r_{ij}) := 4\epsilon_{ij} \left(\frac{12\sigma_i^{12}}{r_{ij}^{13}} - \frac{6\sigma_i^6}{r_{ij}^7} \right) \frac{(q_i - q_j)}{r_{ij}}.$$

Considerare $d = 2$ ed il caso di $N = 3$ particelle, tutte con $\sigma_i = 1$. Considerare l'approssimazione del sistema fino a tempo $T = 100$ e $T = 200$, quando inizialmente le particelle hanno impulso zero e hanno coordinate (dati iniziali):

$$\mathbf{q}_1(0) = \frac{\sqrt{2}}{2}(-1, -1)^T, \quad \mathbf{q}_2(0) = \frac{\sqrt{2}}{2}(1, 1)^T, \quad \mathbf{q}_3(0) = \frac{\sqrt{2}}{2}(-1, 1)^T, \quad \mathbf{p}_i(0) = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

- (a) Considerare l'approssimazione numerica, e considerare la possibilità di usare metodi di tipo Splitting.
- (b) Considerare ora una configurazione con $N = 100$ particelle, distribuite uniformemente sul quadrato $[0, 10]^2$, e usando dei metodi symplettici partizionati (per esempio Störmer-Verlet) studiare se *l'energia totale media* e *l'energia cinetica media* (quest'ultima rappresenterebbe la *temperatura* del sistema) viene “*preservata*” in media per diversi valori di h . Ripetere lo studio con un'altra distribuzione iniziale delle particelle. Cosa si può dedurre?
- (c) Per i metodi non-symplettici considerati (almeno uno!), considerare l'approssimazione con il corrispondente metodo proiettato.

2.6 Oscillatore Armonico

Si considera lo studio di un problema con prototipo:

$$(2.18) \quad \ddot{y} = -\omega^2 y + g(y), \quad y(0) = y_0, \quad \dot{y}(0) = v_0$$

dove $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é una funzione Lipschitz-continua (che può essere vista come una perturbazione del sistema, oppure come la forzante che può anche derivare da un potenziale). La generalizzazione vettoriale risulta:

$$\ddot{\mathbf{y}} = -A\mathbf{y} + \mathbf{g}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad \dot{\mathbf{y}}(0) = \mathbf{v}_0$$

con $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ e $\mathbf{g} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. Partendo dal problema modello, si può riscrivere come un sistema del primo ordine, che può essere risolto esplicitamente (o quasi!) usando il metodo della variazione delle costanti. Definendo G come una specie di primitiva di g , con $G' = g$, si definisce l'energia totale del sistema:

$$H(q, p) = \frac{1}{2}|p|^2 + \frac{\omega^2}{2}|q|^2 - G(q(t)) ,$$

dove $y \rightarrow q$ e $p \rightarrow \dot{y}$.

Se $\omega \gg 1$ il sistema associato corrisponde al movimento di una particella di massa unitaria appesa ad una molla con costante di rigidità ω^2 . Le soluzioni sono periodiche con frequenza $\omega/(2\pi)$ (frequenza angolare ω) crescente con ω . Considerare l'approssimazione numerica del sistema Hamiltoniano associato per diversi valori di ω , considerando i valori $\omega \gg 1$, $\omega \simeq 1$ e anche $\omega \ll 1$. Studiare come i diversi valori di ω affettano la stabilità dei metodi.

Osservare che quando i valori di ω crescono, le oscillazioni della soluzione sono maggiori e la corretta approssimazione richiede un maggior numero di passi (o un passo di tempo h molto più piccolo). Uno vorrebbe avere un metodo numerico robusto (e cioè che approssima bene alle alte frequenze..) che riesce ad approssimare la soluzione per i diversi ω anche per $\omega \gg 1$. Osservare che nel caso generale vettoriale, $\omega \gg 1$ equivale a $\lambda_{max}(A) \gg 1$.

Una possibile idea, per costruire dei metodi robusti, é usare dei metodi che sfruttano la rappresentazione analitica del problema (2.18):

$$(2.19) \quad y(t \pm h) = \cos(h\omega)y(t) + \frac{\sin(\omega h)}{\omega}\dot{y}(t) + \int_0^{\pm h} \frac{\sin(\omega(\pm h - s))}{\omega} g(y(t+s)) ds .$$

Nel caso che g sia costante, si ottiene una espressione esplicita

$$(2.20) \quad y(t+h) - 2\cos(h\omega)y(t) + y(t-h) = h^2 g \cdot \left(\frac{\sin(\frac{h\omega}{2})}{\frac{h\omega}{2}} \right)^2 .$$

Questo suggerisce in modo naturale un metodo (a due passi!) numerico per approssimare la soluzione di (2.18) usando $y_h(t+h)$, $y_h(t)$, $y_h(t-h)$, ottenendo:

$$(2.21) \quad y_h(t+h) - 2\cos(h\omega)y_h(t) + y_h(t-h) = h^2 \cdot \left(\frac{\sin(\frac{h\omega}{2})}{\frac{h\omega}{2}} \right)^2 g(y_h(t)) .$$

Considerando il sistema del primo ordine (che deve essere già scritto) e la soluzione analitica di essi, si può derivare il metodo corrispondente per il sistema del primo ordine; per il primo passo si usa la soluzione analitica:

$$(2.22) \quad y_h(h) = \cos(h\omega)y_0 + \frac{\sin(h\omega)}{\omega}v_0 + \frac{1}{2}h^2 \cdot \left(\frac{\sin(\frac{h\omega}{2})}{\frac{h\omega}{2}} \right)^2 g(y_0) .$$

e l'approssimazione del sistema del primo ordine (per g costante) si ottiene definendo:

$$(2.23) \quad y_h(t+h) - y_h(t-h) = 2h \frac{\sin(h\omega)}{h\omega} \dot{y}_h(t) \implies p_h(t) = \frac{h\omega}{\sin(h\omega)} \frac{y_h(t+h) - y_h(t-h)}{2h}$$

Considerare l'approssimazione al problema modello con il metodo di Störmer-Verlet classico (descritto nella sezione 2) e il metodo qua descritto (chiamato metodo Gautschis). Considerare come risulta la scrittura del metodo di Störmer-Verlet per l'approssimazione del problema del secondo ordine.

- (a) Studiare l'approssimazione numerica per tempo finale $t_f = 1$, $g(y) = \sin(y)$ e dati iniziale $y_0 = 1, v_0 = 0$. Studiare le approssimazioni per $\omega = 25$ e diversi valori di h , studiando le variazioni nell'energia. Per $h \approx \frac{2\pi}{n\omega}$ con $n = 1, 2$ disegnare le soluzioni ottenute con i diversi metodi e comparare. Disegnare $y_h(t)$ e $v_h(t)/\omega$. Studiare le soluzioni qualitativamente, osservando gli errori nell'ampiezza e nella fase. Studiare la convergenza dei metodi per diversi valori di $\omega \approx 25, 50, 100, 125, 200$ (per ogni valore h varia). Osservare che ci sono delle frequenze critiche dove l'errore nell'approssimazione è molto più grande.

Considerare la convergenza dei metodi in funzione di $h\omega$ e studiare la variazione dell'energia, per diversi valori di $h\omega$.

- (b) Considerare ora il caso $g(y) = \alpha y$ con $\alpha \ll \omega^2$. Considerando la funzione analitica in \mathbb{R} definita come:

$$\text{sinc}(x) := \frac{\sin(x)}{x}, \quad \|\text{sinc}(x)\| \leq 1 \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

che ha punto di massimo globale in $x = 0$, scrivere come risulta il metodo (o ricorsività di tre termini) di Gautschis (2.21) per questa funzione g . Scrivere anche il metodo relativo per il sistema del primo ordine, seguendo i passi di (2.23). Approssimare il problema

con i metodi risultanti per diversi valori di α e studiare il comportamento delle soluzioni approssimate per valori di $h\omega$ multipli di 2π (cioé; $h\omega \approx 2k\pi$, $k \in \mathbb{N}$).

Cosa osserva nella soluzione? Migliora al raffinare di h ?

- (c) Un possibile rimedio é introdurre un *filtro* per *filtrare le frequenze* corrispondenti a $h\omega \approx 2k\pi$, $k \in \mathbb{N}$ e riuscire ad assorbire α nella pulsazione ω . L'idea é di rimpiazzare $g(y_h(t))$ nella definizione di ricorsività (2.21) per $g(\psi(h\omega)y_h(t))$ con un opportuno filtro $\psi(\chi)$:

$$(2.24) \quad g(y_h(t)) \longrightarrow g(\psi(h\omega)y_h(t)) \quad \psi(\chi) := \text{sinc}^2 \left(\chi \left(1 + \frac{1}{2}(1 - \cos(\chi)) \right) \right).$$

Ci sono altre possibili definizioni per la funzione di filtraggio (si può consultare il libro di Hairer). Usando questa modifica per i metodi, studiare l'approssimazione ottenuta e studiare la convergenza dei metodi per diversi valori di ω e di $h\omega$. Studiare anche la variazione nell'energia, per diversi valori di $h\omega$.

- (d) Una situazione molto diversa, si ha quando si considera la forzante come $g(y) = -1/y$. (Il problema é simile al problema del pendolo). Le orbite del corrispondente sistema sono orbite chiuse. Il momento del sistema cambia velocemente e l'uso di un metodo adattativo é consigliato.

3 Altri potenziali....

1.- Un potenziale particolare

$$(3.1) \quad \begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -U'(q) \end{cases} \quad U(q) = e^{-q^2/2}$$

Per q abbastanza grande (per esmpio $|q| > 20$) la Forza $F(q) = -U'(q)$ é più piccola della precisione di macchina (in doppia precisione). Per tanto qualunque metodo numerico sarà essenzialmente esatto nell'integrazione. Approssimare numericamente la soluzione con dati iniziali $q(0) = -20, p(0) = 1$ fino a che la soluzione abbia $|q(t)| > 20$. Misurare il cambio in $H(q, p)$ rispetto al valore per $t = 0$, ed l'errore commesso nell'approssimazione di H , per diversi passi di tempo. Fare uno studio per diversi metodi, includendo simplettici e non simplettici.

2- Potenziale doppio pozzo (double well potential)

Sia $U(q) = (q^2 - 1)^2$ il potenziale chiamato potenziale doppio pozzo.

4 Altri possibili problemi, non legati ai sistemi hamiltoniani

La *Matematica dell'Epidemiologia* viene fondata alla fine degli anni 20 con la formalizzazione del modello **SIR- Suscettibili, Infetti, Rimossi**-di W.O. Cormack e A.G. McKendrick, che riprende la teoria dinamica delle specie in competizione di A.J. Lotka e V. Volterra proposta pochi anni prima. Il modello SIR è costituito da tre diverse classi di individui: la classe **S** dei suscettibili, gli individui che possono contrarre la malattia, la classe **I** degli infetti, cioè dei malati, e la classe **R** degli individui rimossi (guariti e quindi immunizzati, o deceduti) Le tre classi interagiscono secondo lo schema descritto dal sistema di equazioni differenziali ordinarie:

$$(4.1) \quad \begin{cases} \dot{S} = -\beta S I \\ \dot{I} = \beta S I - \gamma I \\ \dot{R} = \gamma I \end{cases}$$

che si interpretano nel seguente modo: in ogni istante di tempo il tasso di variazione dei suscettibili S è proporzionale al loro prodotto con la popolazione I , tramite il parametro β , che misura sia la *infettività del virus* che la probabilità degli incontri tra S ed I . Ovviamente, il numero dei suscettibili decresce quando un incontro dà luogo ad una infezione, da cui il segno meno nel termine a destra dell'uguale. Il tasso di variazione degli infetti presenta lo stesso termine, con il segno opposto, ed il termine $-\gamma I$ che tiene conto delle guarigioni e dei decessi. $1/\gamma$ è il tempo medio di durata della malattia in assenza di suscettibili. Il termine γI dà quindi il tasso di variazione degli Infetti, che abbandonano la loro popolazione per andare in quella dei Rimossi. Si noti che la somma $S + I + R$ è costante nel tempo, e uguaglia la popolazione totale. Il modello SIR, nella sua semplicità, fornisce un punto di partenza per generare modelli più sofisticati, potenzialmente in grado di descrivere la complessità della situazione reale della pandemia COVID-19. Ovviamente tali generalizzazioni implicano l'introduzione di un più ampio set di parametri, che riduce la capacità predittiva del modello dato che se i parametri sono troppi può succedere che più scelte descrivano ugualmente bene il passato ma portino a risultati diversi per il futuro. Non ostante, uno potrebbe considerare anche altri modelli che hanno conto degli individui infetti diagnosticati, non diagnosticati, sottoposti a tamponi, in quarantena... etc.

Alcune considerazioni infine sul significato dei parametri e, in particolare, sulla loro connessione con le misure adottate per contenere l'epidemia. Un distanziamento sociale generale produrrà una diminuzione della frequenza di incontri e quindi avrà come effetto una diminuzione del parametro β . Per esempio, l'effetto delle politiche di lock-down e successiva parziale riapertura si può simulare tramite una dipendenza temporale a *gradini* del parametro β .

In questo progetto, partendo del modello SIR, si pretende fare lo studio numerico degli integratori studiati nel corso. Si possono considerare anche altri modelli più complessi (Chiedere

al docente).

Se si vuole, si possono studiare anche le possibili capacità predittive del modello. In particolare usando i dati forniti dalla protezione civile si può considerare il problema di *fitting dei parametri* (*data assimilation per il modello*). Questo coinvolge la risoluzione di problemi di tipo minimi quadrati per determinare almeno uno dei parametri. Si deve comunque consultare col docente per avere del materiale al riguardo.

5 Commenti per lo studio

Una volta selezionato il problema, e dopo aver fatto un piccolo studio preliminare del problema, dove si descrivono gli invarianti (se ci fossero) e altre proprietà che abbia il sistema o che possono essere utili per caratterizzare la soluzione, si consiglia:

1. Approssimare il problema con Eulero esplicito, Eulero implicito, un RK esplicito e un metodo RK embedded (a passo variabile); un metodo di Gauss e almeno le due versioni di un metodo symplettico di ordine basso (sia Eulero symplettico (??) e (??); oppure Störmer -Verlet).
2. Implementare (almeno) una delle seguenti opzioni (a seconda del problema sarà possibile una o'altra):
 - un metodo composito; si può pensare a cercar di ottenere un metodo di ordine alto facendo delle combinazioni particolari dei passi in tempo, come visto a lezione, tipo Triple jump oppure Suzuki. Si può cercar di costruire anche un metodo simmetrico combinando un metodo col suo aggiunto (facendo la combinazione in modo particolare si può anche ottenere metodi symplettici e anche metodi di ordine alto...)
 - un metodo RK partizionato basato su Lobatto IIIA e LobattoIIIB, che permetta di ottenere un metodo symplettico (per alcuni problemi!)
 - un metodo tipo Splitting. Nel caso che il Hamiltoniano sia separabile si vorrebbe fare uno splitting come indicato prima e a lezione, e cercar di verificare se le prime integrali (??) vengono conservate o meno. Si può anche paragonare lo splitting di Lie-Trotter (primo ordine) con lo splitting di Strang. Se si considerano metodi symplettici per fare lo splitting, il metodo ottenuto dovrebbe essere ancora symplettico? Nel caso che il sistema non sia completamente integrabile (e cioè che non si abbia una espressione analitica di uno dei flussi), si deve usare un metodo (preferibilmente symplettico) che risulti accurato.
 - Nei metodi di splitting si deve assolutamente considerare la possibilità di usare h variabile all'avanzare nel tempo. A lezione, abbiamo detto (senza dimostrare...) che in

principio non dovrebbe funzionare (l'approssimazione non sarebbe migliore). L'idea é verificare numericamente cosa succede.

- (opzionale) Per almeno uno o due dei metodi non symplettici considerati, Implementare i corrispondenti metodi proiettati sulla varietà dell'energia, come spiegato in (??). Considerare l'approssimazione con questa variante e studiare di nuovo le variazioni di energia e le traiettorie delle soluzioni. Può concludersi che questo sia un rimedio *universale*...??
3. Fare uno studio comparativo dei diversi metodi, confrontando le approssimazioni ottenute con i diversi metodi si deve studiare l'accuratezza e l'efficienza dei metodi ma anche i seguenti aspetti che possono aiutare a fare un confronto più fair:
- Fare uno studio comparativo dei metodi, esaminando in modo particolare la capacità dei metodi numerici di riprodurre le diverse proprietà qualitative del sistema e della soluzione. In modo particolare, studiare quali metodi riescono a preservare qualche (o tutte semmai) delle prime integrali che il sistema abbia. Detto studio deve farsi anche per diversi tempi, includendo il caso più rilevante di lunghi tempi, e diversi passi di tempo.
 - Studiare le approssimazioni numeriche ottenute con diversi metodi (studiare anche le curve soluzione e le traiettorie delle soluzioni nei piani di fasi (q, p) ed esaminare le capacità dei diversi metodi di preservare l'energia. Nel caso di eulero symplettico studiare se ci sono differenze nel considerare le diverse versioni. Fare anche uno studio dell'errore (nell'energia) per tutti i metodi.
 - studiare e comparare la accuratezza e efficienza dei metodi. La stabilità dei metodi anche deve essere studiata (come sempre facciamo).
 - É conveniente (come preparazione all'esame) che qualora un metodo sia impiegato, il suo studio teorico sia anche fatto (almeno dovrebbe essere delineato; descritto sommariamente)