

Relazioni di Laboratorio di Fisica Computazionale

Luca Cassia - [MAT. 728341]

Spring 2012

Indice

1	Integrazione Numerica	2
1.1	Newton-Cotes	2
1.2	Quadrature Gaussianhe	3
1.2.1	Integrazione Composta	5
1.3	Monte Carlo	5
1.3.1	Campionamento di Importanza	5
1.4	Esempi	6
2	Algoritmo Metropolis	8
2.1	L'Oscillatore Armonico Quantistico	8
2.2	Azione e Termalizzazione	8
2.3	Autocorrelazione	10
2.4	Correlazione	10
2.5	Calcolo di ΔE	10
2.6	Calcolo dell'Elemento di Matrice	10
3	Metodo Runge-Kutta	13
3.1	Il Pendolo Caotico	14
3.2	Oscillatore di Van Der Pol	14
3.3	Attrattore di Lorenz	16
4	Metodo implicito	17
4.1	Equazione di Schrödinger	18
	Bibliografia	20

Capitolo 1

Integrazione Numerica

In analisi numerica, l'integrazione numerica consiste in una serie di metodi che stimano il valore di un integrale definito, senza dover calcolare la primitiva della funzione integranda. In questa sezione si illustrano alcuni dei principali metodi deterministici e non.

1.1 Newton-Cotes

Le regole di quadratura di Newton-Cotes sono formule che consistono nel valutare l'integrando in punti equispaziati dell'intervallo di integrazione.

Si assume che il valore di una funzione $f : [a, b] \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sia noto nei punti x_i , per $i = 0, \dots, n$ tali che

$$x_i = a + \left(\frac{b-a}{n} \right) i$$

La formula di Newton-Cotes di grado n si ottiene interpolando f nei punti x_i con i polinomi della base di Lagrange, e integrando la polinomiale risultante, $L(x)$, nell'intervallo $[a, b]$.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L(x) dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \right) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i(x) dx}_{w_i}$$

dove gli $\ell_i(x)$ sono i polinomi di Lagrange così definiti

$$\ell_i(x) := \prod_{\substack{0 \leq j \leq n \\ j \neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$$\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$$

La formula di Newton-Cotes assume così la semplice forma di media dei valori $f(x_i)$ pesati sui coefficienti w_i (indipendenti da f)

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

Si dimostra che l'errore dell'interpolazione di f con un polinomio è

$$E(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

per un certo $\xi \in [a, b]$ dipendente da x . Non avendo tuttavia alcuna informazione su come individuare il punto ξ in genere si effettua solo una stima del limite superiore sull'errore $E(x)$ per ξ tale che $f(\xi) = \max_{x \in [a, b]} f(x)$.

Al primo ordine dell'approssimazione Newton-Cotes la formula si riduce al cosiddetto metodo dei "trapezi":

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + \underbrace{\frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b)}_{E_1}$$

mentre al secondo ordine non è altro che la regola di Simpson:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] + \underbrace{\frac{1}{6} \int_a^b f'''(\xi(x))(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)}_{E_2}$$

1.2 Quadrature Gaussian

La regola di quadratura Gaussiana a n -punti è un metodo di integrazione numerica costruito in modo tale da fornire un risultato esatto per polinomi di grado inferiore a $2n$, attraverso una scelta appropriata di punti x_i e pesi w_i , per $i = 1, \dots, n$. Sul dominio di integrazione convenzionale $[-1, 1]$ la regola è così formulata

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

L'accuratezza del risultato è tanto più grande quanto meglio f è approssimata da un polinomio. Se tuttavia la funzione integranda può essere scritta come $f(x) = W(x)g(x)$, dove $g(x)$ è approssimativamente polinomiale e $W(x)$ è nota, allora esistono w'_i tali che

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 W(x)g(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w'_i g(x_i)$$

$W(x)$ viene detta funzione peso, mentre i punti x_i sono le radici di un polinomio appartenente alla classe dei polinomi ortogonali.

Nel caso considerato $W(x) = 1$ ed i polinomi associati sono i polinomi ortogonali di Legendre $P_n(x)$. Il peso i -esimo associato al nodo Gaussiano x_i è dato da

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2) [P'_n(x_i)]^2}$$

Analogamente alle regole di Newton-Cotes, l'errore teorico del metodo della quadratura Gaussiana è

$$E(x) = \frac{1}{n!} f^{(n)}(\xi(x)) \prod_{i=1}^n (x - x_i)$$

che può tuttavia essere ridotto a

$$E(x) = \frac{1}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi(x)) \prod_{i=1}^n (x - x_i)^2$$

semplicemente considerando due volte ogni punto di interpolazione x_i .

Infine, se si vuole calcolare l'integrale su $[a, b]$ invece che sull'intervallo $[-1, 1]$, si deve effettuare il cambio di variabile

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{a+b}{2}\right) dx$$

ed applicando il metodo di Gauss si ottiene

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right)$$

I nodi ed i pesi per il polinomio di Legendre di quinto grado sono riportati in tabella:

x_i	w_i
0	$\frac{128}{255}$
$\pm \frac{1}{3} \sqrt{5 - 2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}$
$\pm \frac{1}{3} \sqrt{5 + 2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}$

1.2.1 Integrazione Composta

Una tecnica utile a migliorare la precisione del calcolo dell'integrale numerico consiste nello spezzare l'intervallo d'integrazione in n sottointervalli

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{\frac{b-a}{n}i}^{\frac{b-a}{n}(i+1)} f(x)dx$$

Dopodiché si applica uno dei metodi di quadratura numerica descritto ad ogni intervallino ed infine si somma ad ottenere il risultato voluto.

1.3 Monte Carlo

L'integrazione Monte Carlo, a differenza dei metodi di quadratura precedentemente descritti, fa uso di sampling casuali e per questo motivo rientra nella categoria dei metodi non deterministici.

Nella sua versione più semplice l'algoritmo consiste nell'estrarre uniformemente punti dalla regione di integrazione per stimare l'integrale ed il relativo errore. Si supponga che il sample sia costituito da N punti x_1, \dots, x_N appartenenti alla regione di integrazione di misura V , allora la stima dell'integrale è data da

$$I \approx E_N \equiv V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = V \langle f \rangle$$

Poiché $\{x_i\}$ è una sequenza di punti equidistribuiti in V , si può dimostrare che $I = \lim_{N \rightarrow \infty} E_N$. Tenendo presente che la varianza della funzione integranda è

$$\text{Var}(f) \equiv \sigma_N^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (f(x_i) - \langle f \rangle)^2$$

la varianza di E_N è quindi

$$\text{Var}(E_N) = \frac{V^2}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var}(f) = V^2 \frac{\text{Var}(f)}{N} = V^2 \frac{\sigma_N^2}{N}$$

Dal momento che le considerazioni appena fatte rimangono vere anche nel caso multidimensionale, quello che si deduce è che l'errore sulla stima dell'integrale scala come $1/\sqrt{N}$, indipendentemente dal numero di dimensioni.

1.3.1 Campionamento di Importanza

Dal punto di vista matematico, il campionamento di importanza corrisponde al cambio di variabile

$$\int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx = \int \frac{f(x)}{p(x)} dP(x)$$

con

$$p(x) = \frac{\partial^d}{\partial x_1 \dots \partial x_d} P(x)$$

Se si restringe $p(x)$ ad essere una funzione a valori non negativi normalizzata all'unità, allora si può interpretare $p(x)$ come una densità di probabilità. Se poi si ha a disposizione un generatore di numeri casuali corrispondente alla distribuzione $P(x)$ si può anche stimare l'integrale da un sample x_1, \dots, x_N di numeri casuali distribuiti secondo $P(x)$

$$E_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{f(x_n)}{p(x_n)}$$

L'errore statistico dell'integrazione Monte Carlo è dato da $\sigma(f/p)/\sqrt{N}$.

Il campionamento di importanza è efficace se si sceglie $p(x)$ tale che approssimi bene $|f(x)|$ e tale che si sia capaci di generare numeri casuali con distribuzione di probabilità $P(x)$.

1.4 Esempi

Si dimostrano i metodi descritti nei paragrafi precedenti applicandoli al calcolo dell'integrale

$$\int_1^2 \log(1+x) dx$$

In figura sono rappresentati gli errori rispetto al risultato analitico dei quattro metodi analizzati in funzione del numero di sottointervalli utilizzati per i metodi di quadratura numerica o del numero di iterazioni per il metodo Monte Carlo.

Come previsto, il metodo Monte Carlo risulta il più impreciso. con un errore che oscilla anche di due ordini di grandezza. Il Monte Carlo è infatti impiegato prevalentemente in quei casi in cui la mole di calcoli da svolgere è troppo grande per poter impiegare algoritmi di tipo deterministico. Dei metodi di quadratura invece l'algoritmo di Gauss-Legendre di grado 5 è il più preciso, con errori dell'ordine di 10^{-16} anche per n piccolo. Infine la precisione delle formule di Newton Cotes è bassa per n piccolo ma aumenta all'aumentare di n e del grado dell'approssimazione.

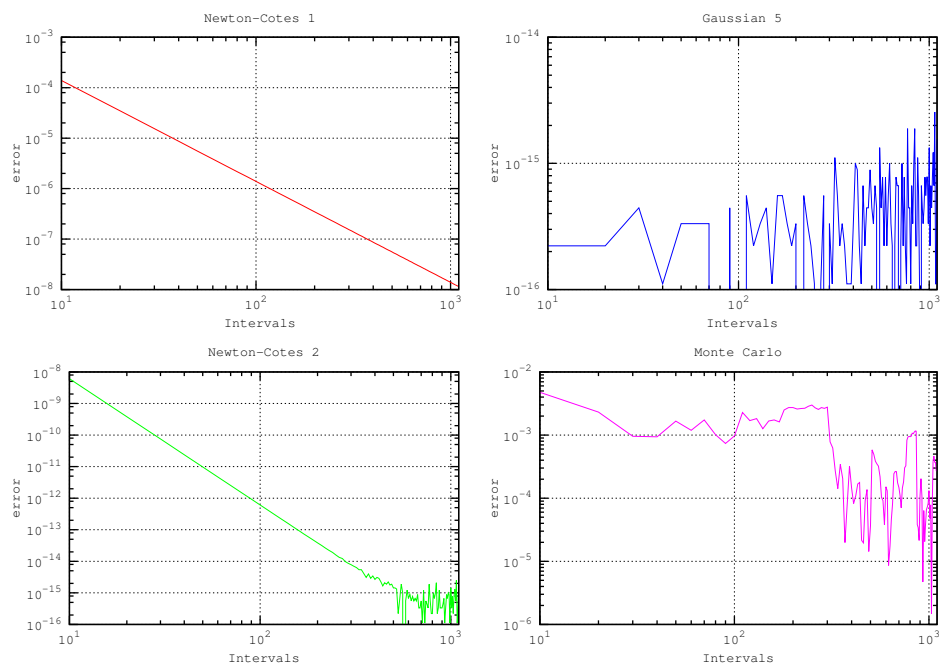


Figura 1.1: Errore calcolato

Capitolo 2

Algoritmo Metropolis

Il Metropolis è l'algoritmo più influente fra quelli appartenenti alla classe dei metodi Monte Carlo. Supportato da una profonda teoria, questo algoritmo costituisce uno strumento fondamentale per la scienza della computazione.

In questa sezione si propone di sviluppare un algoritmo Metropolis per simulare un oscillatore armonico quantistico e confrontare i risultati numerici con la teoria.

2.1 L'Oscillatore Armonico Quantistico

Il sistema è costituito da una particella che si muove in uno spazio unidimensionale e in un reticolo temporale finito di passo a e lunghezza N con condizioni di periodicità al contorno. La particella inoltre interagisce con un potenziale armonico della forma $V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$.

La relazione che si vuole verificare è quella per il correlatore delle variabili l -esima e k -esima

$$\langle X_l X_k \rangle = 2|\langle \tilde{E}_0 | \hat{x} | \tilde{E}_1 \rangle|^2 \exp \left\{ -\frac{Na}{2} (\tilde{E}_1 - \tilde{E}_0) \cosh \left[a \left(\frac{N}{2} - |l - k| \right) (\tilde{E}_0 - \tilde{E}_1) \right] \right\}.$$

Nel caso in esame l'insieme delle variabili x_t del sistema viene rappresentato da un array monodimensionale `x[i]` di `double`, dove l'indice `i` indica la posizione nel reticolo temporale, e dove si è posto $x_N \equiv x_0$.

2.2 Azione e Termalizzazione

Inizializzando il vettore della configurazione con numeri casuali è necessario lasciare del tempo al sistema per portarsi allo stato di equilibrio, dove, per l'ipotesi di ergodicità, tutte le configurazioni possibili sono equiprobabili. Tale processo, denominato termalizzazione, richiede di norma non più di 500 cicli di metropolis, eseguiti i quali sarà possibile estrarre le configurazioni con la giusta distribuzione di probabilità. Vi sono due modi di porre le condizioni iniziali:

- Azione “fredda” : le variabili sono inizializzate a zero.
- Azione “calda” : le variabili sono inizializzate a valori diversi da zero.

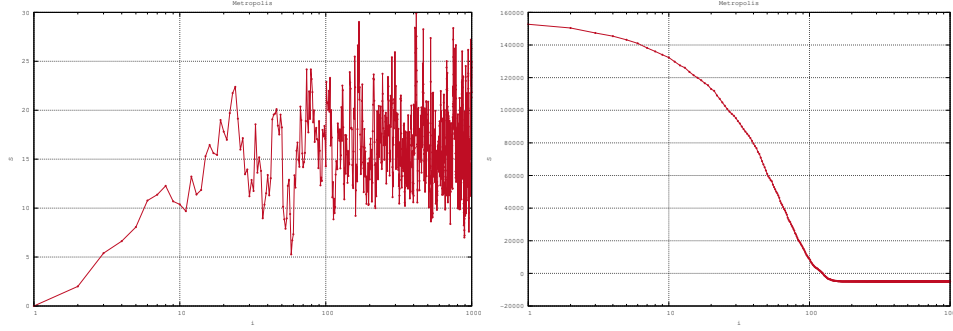


Figura 2.1: Azione Fredda e Calda

Per il calcolo dell'azione euclidea si usa la formula

$$S = a \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{L}(x_i, x_{i+1})$$

dove

$$\mathcal{L}(x_i, x_{i+1}) = \frac{m}{2} \left(\frac{x_i - x_{i+1}}{a} \right)^2 - \frac{1}{2} V(x_i) - \frac{1}{2} V(x_{i+1})$$

Per calcolare il $\Delta S = S' - S$ si può tenere presente il fatto che ad ogni estrazione solo una variabile di sistema viene modificata e quindi tutti i termini delle due sommatorie che non contengono quella variabile si elidono nella differenza. Pertanto si utilizza la formula ridotta

$$\begin{aligned} \Delta S_i &= a[\mathcal{L}(x_{i-1}, x'_i) + \mathcal{L}(x'_i, x_{i+1}) - \mathcal{L}(x_{i-1}, x_i) - \mathcal{L}(x_i, x_{i+1})] \\ &= M[(x_i - x'_i)(x_{i+1} + x_{i-1}) + (x_i'^2 - x_i^2)] + V(x'_i) - V(x_i) \end{aligned}$$

Il codice corrispondente è dove le variabili **M** e **W** corrispondono alla massa e alla pulsazione riscalate del fattore a mentre la y argomento della funzione `ds()` corrisponde alla nuova variabile estratta x'_i . Si noti che le condizioni di periodicità al contorno del reticolo sono implementate attraverso l'algebra modulo N sugli indici del vettore **x**.

Il ciclo di termalizzazione viene eseguito all'interno del `main()`: La funzione `metropolis()` esegue uno sweep sul vettore **x** delle variabili di sistema aggiornandole una alla volta con probabilità $\min(1, e^{-\Delta S_i})$, e restituendo infine la variazione di azione totale $\Delta S = \sum \Delta S_i = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i$. La variabile x'_i è estratta con una distribuzione piatta in un'intorno sferico di x_i di raggio D .

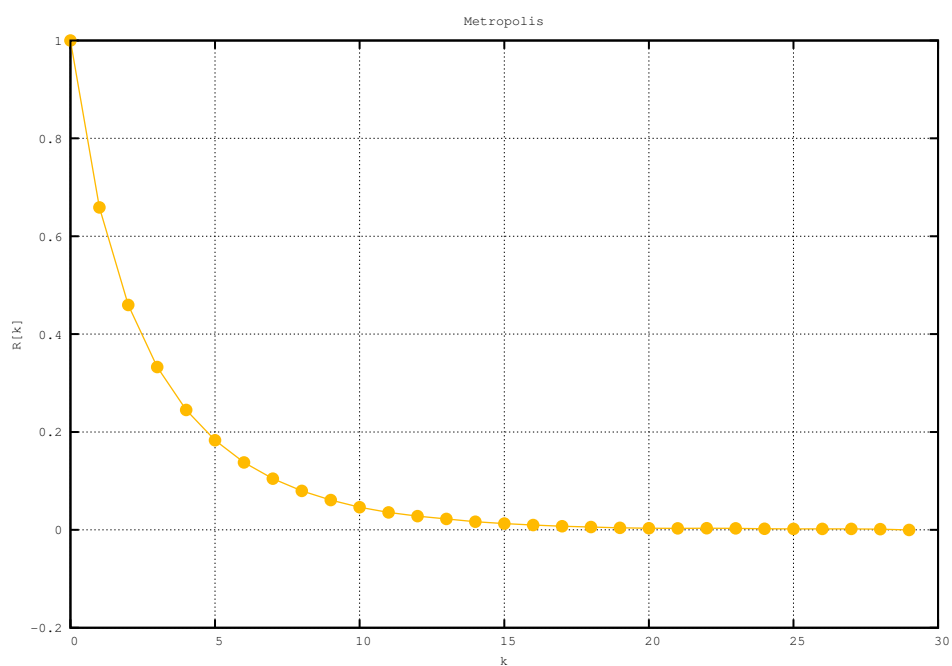


Figura 2.2: Autocorrelazione

2.3 Autocorrelazione

2.4 Correlazione

2.5 Calcolo di ΔE

2.6 Calcolo dell'Elemento di Matrice

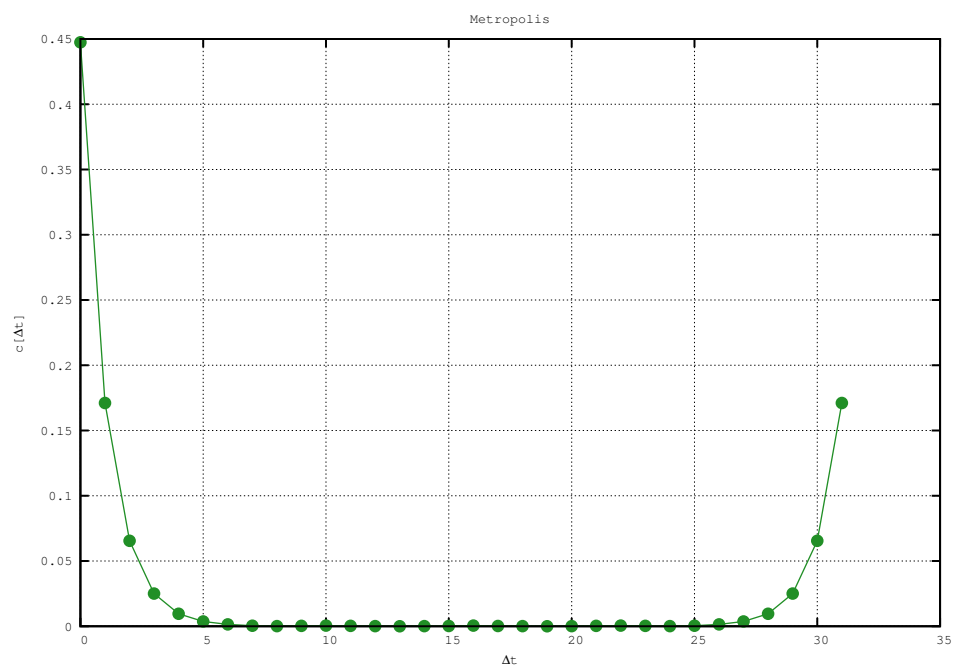


Figura 2.3: Correlazione

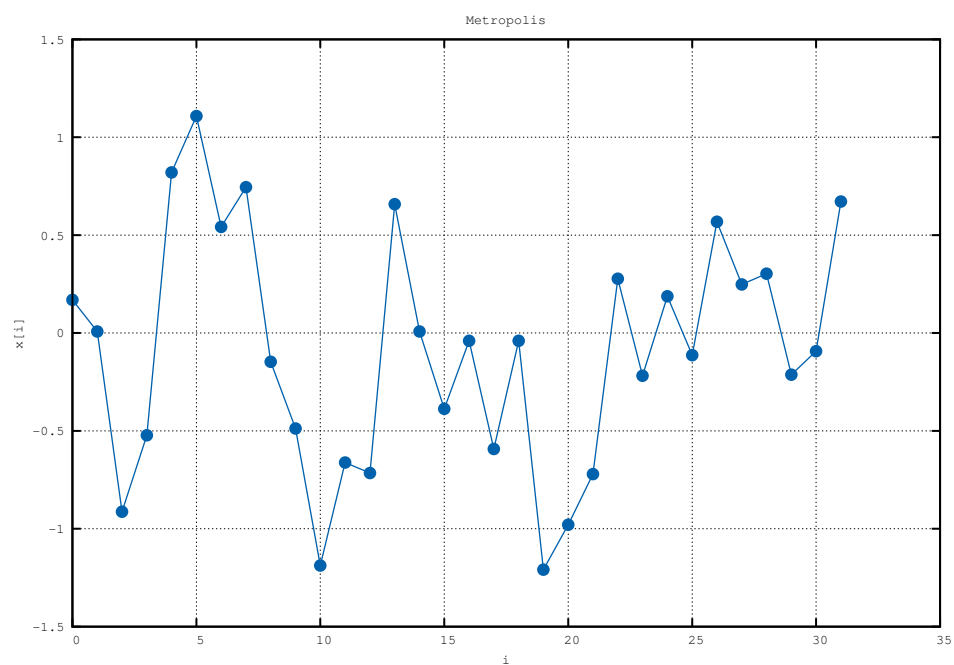


Figura 2.4: Configurazione

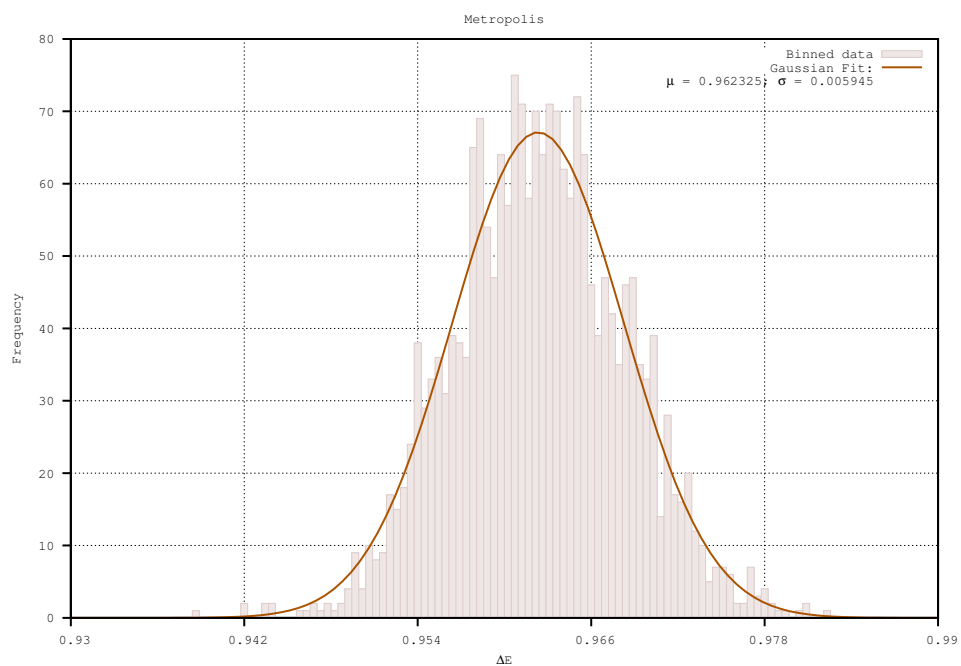
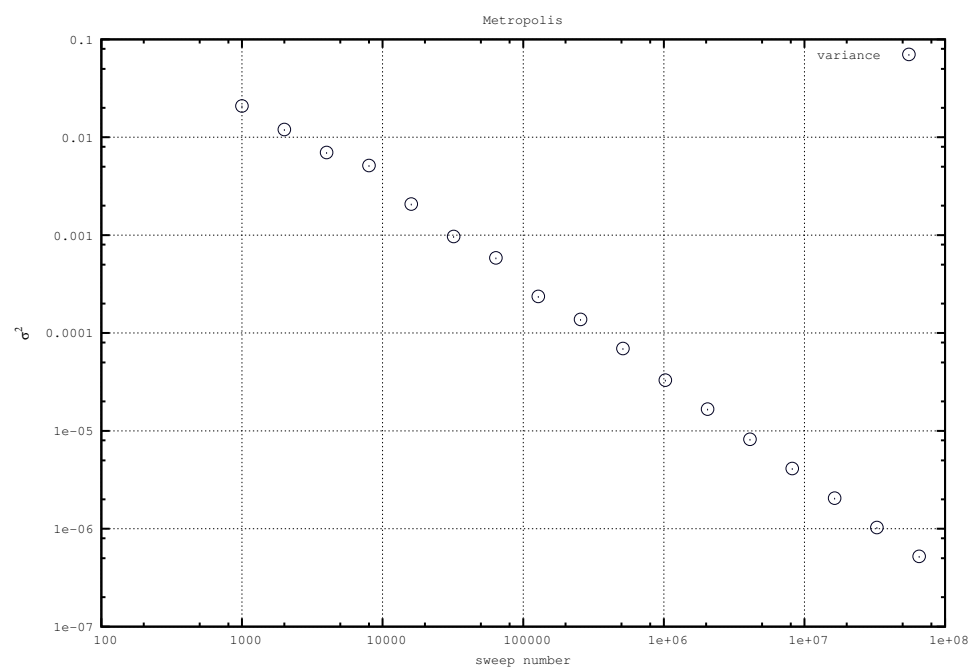


Figura 2.5: Istogramma

Figura 2.6: Varianza di ΔE

Capitolo 3

Metodo Runge-Kutta

In analisi numerica i metodi Runge-Kutta sono una famiglia di metodi iterativi impliciti ed espliciti per la risoluzione approssimata di equazioni differenziali ordinarie (ODE). Il più comune di questi metodi è il cosiddetto “RK4” o anche Runge-Kutta del quarto ordine.

Sia dato il problema di Cauchy

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0.$$

Si assume che il tempo sia discretizzato in istanti t_n equidistanziati di un intervallo h .

Il metodo RK4 per questo problema è allora dato dalle seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{aligned}$$

dove y_{n+1} è l'approssimazione RK4 di $y(t_{n+1})$, e

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

Il valore della funzione y all'istante t_{n+1} è uguale quindi al suo valore all'istante t_n incrementato della media ponderata di quattro incrementi k , dove ogni incremento è il prodotto della dimensione dell'intervallo h ed una stimata pendenza specificata dalla funzione f .

- k_1 è l'incremento basato sulla pendenza di f all'estremo sinistro dell'intervallo, calcolato in y_n (metodo di Eulero);
- k_2 è l'incremento basato sulla pendenza nel punto medio dell'intervallo, calcolato in $y_n + \frac{1}{2}k_1$;

- k_3 è ancora l'incremento basato sulla pendenza nel punto medio, calcolato però in $y_n + \frac{1}{2}k_2$;
- k_4 è l'incremento basato sulla pendenza all'estremo destro dell'intervallo, calcolato in $y_n + k_3$.

Si nota dalla formula per y_{n+1} che peso maggiore viene assegnato all'incremento al centro dell'intervallo. Inoltre, se $f = f(t)$ cioè non dipende da y , il metodo RK4 si riduce alla regola di integrazione di Simpson.

RK4 è un metodo del quarto ordine e quindi l'errore ad ogni step è dell'ordine di h^5 , mentre l'errore totale accumulato è dell'ordine di h^4 .

3.1 Il Pendolo Caotico

Il sistema che si intende simulare è quello dell'oscillatore caotico forzato di equazione

$$\ddot{\theta} = \underbrace{\frac{g}{R}}_1 \sin(\theta) - \underbrace{\frac{k}{m}}_q \dot{\theta} + \underbrace{\frac{f}{mR}}_b \cos(\omega t).$$

È possibile rielaborare l'equazione precedente in un sistema di equazioni differenziali del primo ordine come di seguito

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \phi \\ \dot{\phi} = \sin(\theta) - q\phi + b\cos(\omega t) \end{cases}$$

ed applicare ora la formula del metodo RK4 ad entrambe le equazioni.

Rappresentando la traiettoria del sistema nello spazio delle fasi si ottiene

3.2 Oscillatore di Van Der Pol

Analogamente al caso dell'oscillatore caotico, si applica il metodo RK4 all'equazione del pendolo di Van Der Pol, che in questo caso è

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0$$

dove μ rappresenta l'intensità dello smorzamento. Il sistema associato è

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} - x \end{cases}$$

Anche in questo caso si può osservare un ciclo limite nello spazio delle fasi del sistema, ovvero una traiettoria chiusa verso la quale il sistema è portato ad evolvere.

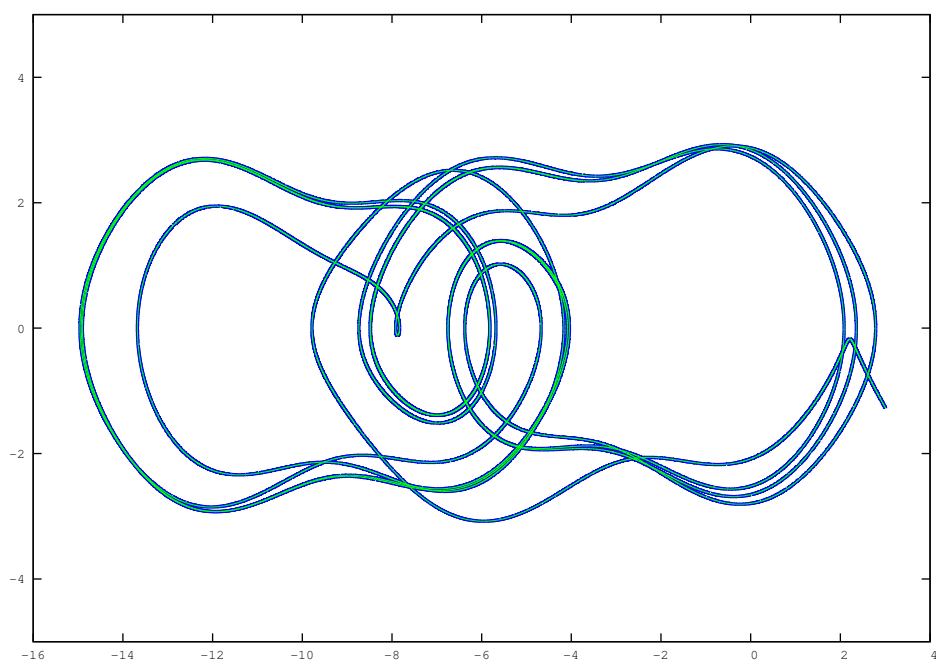


Figura 3.1: Traiettoria dell'oscillatore per $q = 0.3$, $b = 1.4$, $\omega = 0.6667$

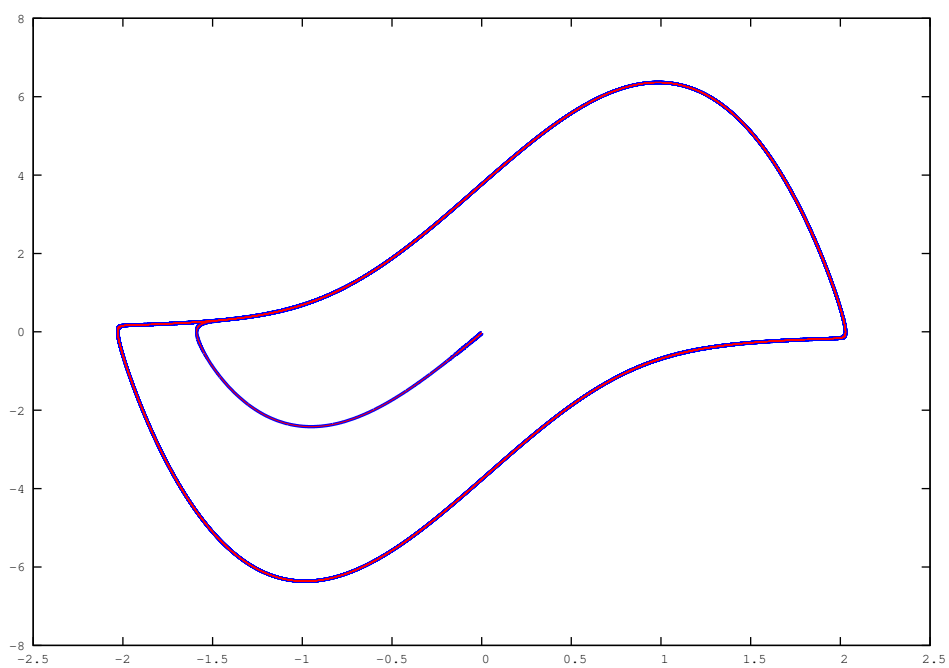


Figura 3.2: Traiettoria dell'oscillatore per $\mu = 4$

3.3 Attrattore di Lorenz

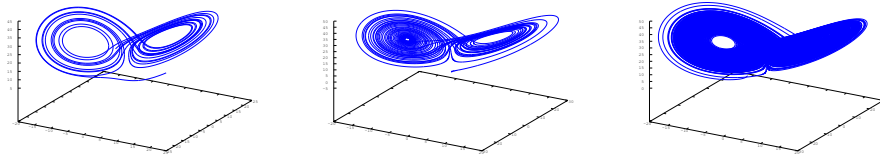


Figura 3.3: Sistema di Lorenz in tre dimensioni

Capitolo 4

Metodo implicito

Per sistemi di equazioni alle derivate parziali (PDE) esistono altri metodi oltre a quelli RK. In questa sezione si illustra e implementa il cosiddetto metodo implicito per risolvere equazioni agli operatori lineari.

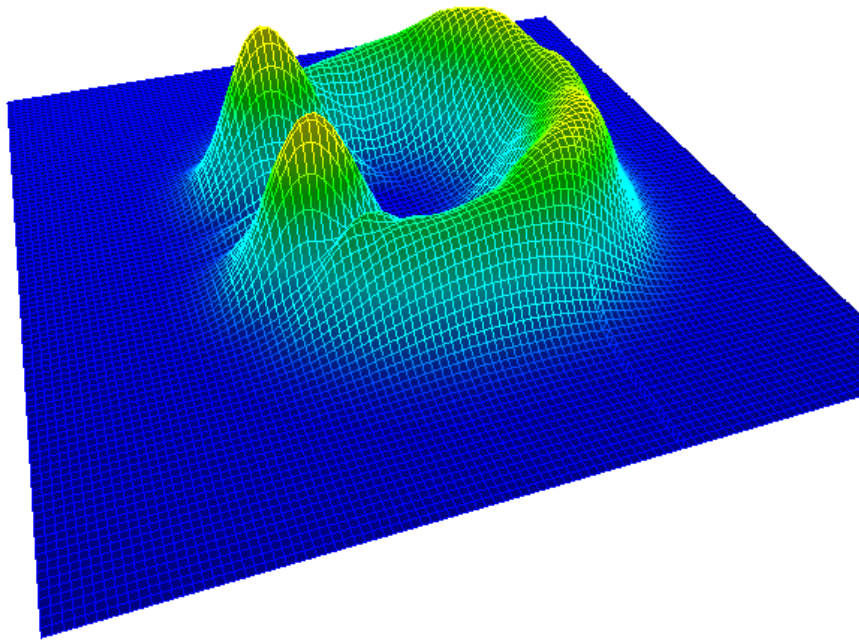


Figura 4.1: Scattering di un pacchetto gaussiano con una buca di potenziale

4.1 Equazione di Schrödinger

L'equazione che si intende risolvere è l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t)$$

A tal fine si discretizza lo spazio in modo tale che $x = na$ con $n = 0, \dots, N-1$ ed a passo del reticolo spaziale. $\psi(x, t)$ diventa quindi un vettore di valori complessi $\psi_n(t)$. Si pongono inoltre condizioni di periodicità al contorno di modo che $\psi_N \equiv \psi_0$.

Con questa discretizzazione si sostituisce

$$\nabla^2 \psi(x) \rightarrow \frac{\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n}{a^2}$$

pertanto l'equazione diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n}{a^2} + V_n \psi_n = \sum_m A_{n,m} \psi_m$$

La soluzione dell'equazione è la funzione esponenziale

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t\right) \psi(0)$$

dove $U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t\right)$ rappresenta l'evolutore temporale del sistema. Sviluppando ora $U(t)$ intorno all'unità per $t \rightarrow 0$ e trascurando gli ordini superiori in t si ottiene la formula approssimata

$$\psi(t_0 + t) = \psi(t_0) - \frac{i}{\hbar} A t \psi(t_0)$$

Questa prima approssimazione tuttavia porta all'insorgere di numerosi problemi dovuti al fatto che l'iterazione del precedente passaggio non rispetta la condizione di unitarietà dell'operatore evolutore temporale. Bisogna quindi ricorrere ad una strategia più astuta.

Il **metodo implicito** consiste nell'approssimare l'operatore esatto $U(t)$ attraverso la formula

$$\psi(t + dt) = \left(1 + \frac{i}{2\hbar} A dt\right)^{-1} \left(1 - \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t)$$

Utilizzando il fatto che A è Hermitiano, è facile dimostrare che l'operatore della precedente formula è unitario proprio come $U(t)$. Per implementare questo algoritmo iterativo è necessario risolvere ad ogni step il sistema lineare

$$\left(1 + \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t + dt) = \left(1 - \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t)$$

Infine si moltiplicano entrambi i membri dell'equazione per l'aggiunto dell'operatore a primo membro, in modo tale da ottenere

$$(1 + \frac{1}{4\hbar^2} A^2 dt^2) \psi(t + dt) = (1 - \frac{i}{2\hbar} A dt)^2 \psi(t)$$

dove ora $(1 + \frac{1}{4\hbar^2} A^2 dt^2)$ è Hermitiano e si può quindi risolvere rispetto a $\psi(t + dt)$ utilizzando il *Conjugate Residual Method*.

L'idea che sta alla base di questo metodo è che se in un intervallo di tempo dt la funzione $\psi(t)$ evolve in $\psi(t + dt)$, allora facendo evolvere $\psi(t)$ in avanti nel tempo per $\frac{dt}{2}$ e $\psi(t + dt)$ indietro nel tempo sempre di $\frac{dt}{2}$ le due funzioni dovranno coincidere.

Bibliografia

- [1] M. Abramowitz, I. A. Stegun. “§25.4, Integration”, *Handbook of Mathematical Functions (with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables)*, 1972
- [2] I. Beichl, F. Sullivan. *Computing in Science and Engineering*, 2000
- [3] M. Hjorth-Jensen. “§9, Random walks and the Metropolis algorithm”, *Computational Physics*, 2009
- [4] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2003
- [5] C. Rebbi. *Lecture Notes on Advanced Computing in Physics*, 1996
- [6] S. Weinzierl. *Introduction to Monte Carlo methods*, 2000