Note lezione 2

Integrali numerici e ODE

Mauro Oi

1 Integrali numerici

Consideriamo una funzione $f(x)$ generica e supponiamo di voler calcolare l'integrale

$$\mathcal{I}(a,b) = \int_a^b f(x)\,dx. \tag{1}$$

Dal teorema fondamentale del calcolo integrale, sappiamo che, se f è integrabile,

$$\mathcal{I}(a,b) = F(b) - F(a), \tag{2}$$

dove $F(x)$ è la primitiva di f, ossia quella funzione definita a meno di una costante tale per cui $F'(x) = f(x)$. Nonostante (2) dica che possiamo svolgere l'integrale, essa non spiega *come* svolgerlo e, in particolare, come calcolare $F(x)$. Si può facilmente mostrare che alcune funzioni non ammettono una primitiva in termini di funzioni elementari: un esempio piuttosto noto è quello della curva di Gauss $f(x) = e^{-\alpha x^2}$, per cui non è possibile trovare una funzione tale che $F'(x) = e^{-\alpha x^2}$. Per alcune di queste funzioni è possibile calcolare l'integrale in alcuni limiti (ad esempio per la gaussiana si può calcolare $\mathcal{I}(-\infty,\infty)$), tuttavia è impossibile calcolare esattamente $\mathcal{I}(a,b)$ per generici valori di a e b. Risulta quindi necessario ricorrere a delle approssimazioni.

La prima possibilità è quella di calcolare l'area di figure geometriche note che approssimano bene la curva $f(x)$ in un dato intervallo. Per fare questo, si può pensare di suddividere il dominio $X = [a,b]$ in N intervalli $I_n = [x_n, x_{n+1}]$, tali che $\cup_{n=0}^N I_n = X$, e di approssimare la funzione f con una curva g sufficientemente semplice da poterne calcolare l'integrale in I_n.

1.1 Metodo dei trapezi

Il metodo dei trapezi consiste con l'approssimare la curva $f(x)$ con una retta nell'intevallo I_n. Infatti, se l'intervallo è sufficientemente piccolo, allora

$$f(x) \simeq f(x_n) + \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_n} (x - x_n), \quad \text{per } x \in I_n. \tag{3}$$

Per calcolare l'integrale numerico si può quindi procedere col calcolare l'integrale approssimato nell'intervallo I_n, che sarà dato da

$$\mathcal{I}(x_n, x_{n+1}) \equiv \mathcal{I}_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\,dx \simeq \frac{[f(x_n) + f(x_{n+1})]\,h}{2}, \tag{4}$$

dove $h = x_{n+1} - x_n$. L'integrale da a a b sarà dato da

$$\mathcal{I}(a,b) \simeq \sum_{n=0}^N \mathcal{I}_n = \frac{h}{2}\sum_{n=0}^N [f(x_n) + f(x_{n+1})]\,. \tag{5}$$

Questa formula può essere riarrangiata in modo da scrivere un'unica sommatoria:

$$\sum_{n=0}^{N} f(x_n) = f(x_0) + \sum_{n=1}^{N} f(x_n), \tag{6a}$$

$$\sum_{n=0}^{N} f(x_{n+1}) = \sum_{n=1}^{N} f(x_n) + f(x_{N+1}). \tag{6b}$$

Quindi

$$\mathcal{I}(a,b) \simeq \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_{N+1})\right] + h\sum_{n=1}^{N} f(x_n). \tag{7}$$

1.2 Metodo di Simpson

Il metodo di Simpson è concettualmente simile a quello dei trapezi, ma migliora l'approssimazione dell'integrale in quanto approssima la funzione f con una parabola. Questo è sempre possibile se f è continua e derivabile in tutto il dominio X in quanto esiste lo sviluppo in serie di Taylor (che possiamo troncare al second'ordine).

Supponiamo di individuare in X $2N+2$ punti e N intervalli (di tre punti ciascuno). In questo caso, l'intervallo $I_n = [x_{2n}, x_{2n+2}]$, la cui larghezza è $2h \equiv x_{2n+1} - x_{2n}$, conterrà tre punti: x_{2n}, x_{2n+1} e x_{2n+2}. Se la larghezza dell'intervallo h è sufficientemente piccola, possiamo approssimare $f(x)$ come una parabola.

$$\begin{aligned} f(x_{2n}) &= ax_{2n}^2 + bx_{2n} + c, \\ f(x_{2n+1}) &= ax_{2n+1}^2 + bx_{2n+1} + c, \\ f(x_{2n+2}) &= ax_{2n+2}^2 + b_{2n+2} + c. \end{aligned} \tag{8}$$

Le equazioni di cui sopra costituiscono un sistema di tre equazioni nelle tre incognite (a, b, c) la cui soluzione è univocamente determinata e può essere espressa in termini di x_{2n}, x_{2n+1}, x_{2n+2}, $f(x_{2n})$, $f(x_{2n+1})$ e $f(x_{2n+2})$. Avendo approssimato la funzione $f(x)$ con una parabola nell'intervallo I_n, possiamo calcolare l'area A_n come

$$A_n = \int_{x_{2n}}^{x_{2n+2}} (ax^2 + bx + c)dx = \left(\frac{a}{3}x^3 + \frac{b}{2}x^2 + cx\right)_{x_{2n}}^{x_{2n+2}}. \tag{9}$$

Sostituendo a, b e c e dopo un po' di algebra, si ottiene

$$A_n = \frac{h}{3}f(x_{2n}) + \frac{4h}{3}f(x_{2n+1}) + \frac{h}{3}f(x_{2n+2}). \tag{10}$$

Per calcolare l'area sottesa dalla curva $f(x)$ in tutto il dominio X, dobbiamo sommare le aree in ciascun intervallo

$$\mathcal{I}(x_0, x_{2N+2}) = \sum_{n=0}^{N} A_n = \frac{h}{3}\left[\sum_{n=0}^{N} f(x_{2n}) + 4\sum_{n=0}^{N} f(x_{2n+1}) + \sum_{n=0}^{N} f(x_{2n+2})\right]. \tag{11}$$

Possiamo riscrivere meglio le somme in modo da far comparire solo i punti con indice pari e quelli con indice dispari

$$\sum_{n=0}^{N} f(x_{2n}) = f(x_0) + \sum_{n=1}^{N} f(x_{2n}), \tag{12}$$

$$\sum_{n=0}^{N} f(x_{2n+2}) = \sum_{n=0}^{N-1} f(x_{2n+2}) + f(x_{2N+2}) = \sum_{n=1}^{N} f(x_{2n}) + f(x_{2N+2}), \tag{13}$$

quindi

$$\mathcal{I}(x_0, x_{2N+2}) = \frac{h}{3}\left[f(x_0) + f(x_{2N+2}) + 2\sum_{n=1}^{N} f(x_{2n}) + 4\sum_{n=0}^{N} f(x_{2n+1})\right]. \tag{14}$$

2 Equazioni differenziali ordinarie (ODE)

Un'equazione differenziale ordinaria (ODE) è un'equazione con una funzione incognita in una variabile e, se l'equazione è lineare, può essere scritta come

$$\sum_{n=0}^{N} a_n f^{(n)}(x) = g(x), \tag{15}$$

dove N è il grado dell'equazione. Esistono vari metodi per trovare soluzioni di un'ODE, ma non sempre è possibile trovare una forma per f in termini di funzioni elementari. Inoltre, se l'ODE non è lineare, non è banale trovare una soluzione analitica.

Un esempio di ODE è l'equazione per il moto del pendolo. Scrivendo, infatti, l'equazione del moto nella coordinata angolare θ (angolo tra il raggio vettore che individua la posizione di equilibrio e quella al tempo t) per un pendolo di massa m e lunghezza l (trascurando la massa della corda), abbiamo

$$\ddot{\theta} = -\frac{g}{l}\sin\theta. \tag{16}$$

Questa equazione può essere risolta esattamente nel caso armonico (piccole oscillazioni), in cui possiamo approssimare $\sin\theta \simeq \theta$

$$\ddot{\theta} \simeq -\frac{g}{l}\theta, \tag{17}$$

la cui soluzione è data da

$$\theta(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t), \tag{18}$$

dove $\omega = \sqrt{g/l}$. Il periodo di oscillazione del pendolo è dato da $T = 2\pi/\omega = 2\pi\sqrt{l/g}$. Chiaramente, poiché questa è un'equazione del second'ordine, per trovare le costanti A e B sono necessarie angolo e velocità angolare iniziali. Il caso generale è, invece, molto più complicato e la soluzione non può essere scritta in termini di funzioni elementari.

Per problemi di questo tipo o più complicati, si rende necessario saper calcolare le soluzioni in maniera numerica. Esistono vari metodi di approssimazione delle soluzioni di un'equazione differenziale, ma noi discuteremo l'algoritmo di Eulero e di Verlet.

2.1 Eulero

Il metodo di Eulero è un semplice metodo di approssimazione delle soluzioni di ODE del prim'ordine. Ad esempio, supponiamo di considerare l'equazione

$$f'(t) = g(t). \tag{19}$$

L'equazione di cui sopra può essere risolta esattamente come

$$f(t) = \int_t^t 0dt'\, g(t'). \tag{20}$$

Supponiamo di non poter risolvere esattamente l'integrale e di voler trovare di una soluzione approssimata. Innanzitutto possiamo discretizzare la variabile t e considerare un insieme di istanti t_n in cui $t_{n+1} - t_n = \tau$. In questo modo, possiamo approssimare l'equazione come

$$\frac{f(t_{n+1}) - f(t_n)}{\tau} = g(t_n). \tag{21}$$

Esplicitando $f(t_{n+1})$ otteniamo

$$f(t_{n+1}) = f(t_n) + g(t_n)\tau + O(\tau^2). \tag{22}$$

Compiendo un numero di passi N, ovvero integrando su un tempo $T = N\tau$ accumuleremo un errore dell'ordine di $N\,O(\tau^2) = T\,O(\tau)$, dunque l'errore è lineare in τ.

Per applicare questo metodo all'equazione del moto di un dato sistema, dobbiamo cercare di riarrangiare le equazioni in modo da ottenere un sistema di equazioni del prim'ordine. L'equazione del moto sarà data da

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F[x(t), t]. \tag{23}$$

Questa equazione può essere riscritta come

$$\begin{cases} \dot{x} = v(t), \\ \dot{v} = \mathcal{F}[x(t), t], \end{cases} \tag{24}$$

dove $\mathcal{F} = F/m$. Per integrare le equazioni del moto col metodo di Eulero, quindi, è sufficiente utilizzare l'eq. (22)

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + v_n, \tau \\ v_{n+1} = v_n + \mathcal{F}(x_n, t_n)\tau. \end{cases} \tag{25}$$

Chiaramente, per trovare una soluzione alla 24 è necessario fornire due condizioni al contorno: la posizione iniziale x_0 e la velocità iniziale v_0, che saranno le condizioni iniziali con cui far partire l'algoritmo di Eulero.

2.2 Verlet

L'algoritmo di Verlet è un algoritmo per integrare equazioni differenziali del second'ordine del tipo

$$\frac{d^2f}{dt^2} = g(t). \tag{26}$$

L'idea è quella di discretizzare direttamente la derivata seconda invece che utilizzare direttamente il metodo di Eulero. In questo modo, i pezzi trascurati sono di $O(\tau^4)$ localmente e $O(\tau^3)$ sulla traiettoria globale. L'algoritmo che si otterrebbe non è però auto-avviante, nel senso che non bastano le condizioni al contorno su posizione e velocità bensì è necessario compiere un primo step con un altro algoritmo, ad esempio con il metodo di Eulero. Esiste, tuttavia, una forma equivalente del metodo di Verlet chiamato Velocity-Verlet, in cui calcoliamo contemporaneamente posizioni e velocità. Discretizzando la variabile temporale, otteniamo

$$\begin{cases} f_{n+1} = f_n + f'_n\tau + \frac{\tau^2}{2}g(t_n), \\ f'_{n+1} = f'_n + \frac{\tau}{2}\left[g(t_n) + g(t_{n+1})\right]. \end{cases} \tag{27}$$

Possiamo applicare questo risultato all'equazione del moto di una particella come segue

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + v_n\tau + \frac{\tau^2}{2}\mathcal{F}(x_n), \\ v_{n+1} = v_n + \frac{\tau}{2}\left[\mathcal{F}(x_n) + \mathcal{F}(x_{n+1})\right]. \end{cases} \tag{28}$$