

Parte II

Derivare ed integrare

Per introdurre dei metodi numerici per risolvere le equazioni della fisica che sono di natura differenziale, cominciamo con analizzare dei metodi per derivare ed integrare numericamente delle funzioni matematiche. Per semplicità la nostra trattazione sarà limitata a funzioni reali di numeri reali. Consideriamo la funzione $f(x)$ con $x \in \mathbb{R}$ e $f(x) \in \mathbb{R}$. Supponiamo di conoscere $f(x)$ su una griglia di valori discreti di x che indichiamo con $\{x_i\}$. Per semplicità consideriamo anche che tale griglia sia equispaziata:

$$x_i = hi + x_{\text{offset}} \quad (7)$$

con $i \in \mathbb{Z}$ e $h, x_{\text{offset}} \in \mathbb{R}$. Indichiamo anche con f_i :

$$f_i = f(x_i) \quad (8)$$

e per $\epsilon \in [0, 1]$:

$$f_{i+\epsilon} = f(x_i + h\epsilon) \quad (9)$$

3 Derivare

L'esigenza di derivare numericamente una funzione non sorge solo dalla eventuale difficoltà per calcolare analiticamente la derivata di una formula nota ma anche dalla possibilità che possiamo conoscere la funzione derivanda $f(x)$ solo su di un insieme di punti. Cominciamo con l'introdurre la notazione:

$$f_i^n = \left. \frac{d^n f(x)}{dx^n} \right|_{x=x_i} \quad (10)$$

Dalla definizione stessa di derivata come limite del rapporto incrementale:

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \quad (11)$$

saremmo tentati di calcolare semplicemente $f_i^1 \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$ per poi scegliere un h sufficientemente piccolo da garantire l'accuratezza di f^1 cercata ma ci accorgiamo che a causa del *roundoff error* tale formula numericamente diviene mal definita per h piccoli. Per ovviare a questo problema dobbiamo analizzare l'errore nel calcolo della derivata rispetto al *grid-spacing* h . Sfruttando lo sviluppo in serie di Taylor fino all'ordine n , possiamo scrivere:

$$f_{i+1} = f_i + \sum_{m=1, n} \frac{1}{m!} f_i^m h^m + O(h^{m+1}) \quad (12)$$

allora per il nostro metodo naif:

$$f_i^{1, \text{naif}} = f_i^1 + \frac{O(h^2)}{h} = f_i^1 + O(h) \quad (13)$$

che preferiamo scrivere come:

$$f_i^1 = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h) \quad (14)$$

analogamente possiamo scegliere il limite sinistro al posto del limite destro e scrivere:

$$f_i^1 = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + O(h) \quad (15)$$

Per ottenere una stima migliore dobbiamo ricorrere allo sviluppo in serie di Taylor fino al terzo ordine:

$$\begin{cases} f_{i+1} &= f_i + f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 + O(h^3) \\ f_{i-1} &= f_i - f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 + O(h^3) \end{cases} \quad (16)$$

sottraendo membro a membro possiamo trovare:

$$f_i^1 = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2) \quad (17)$$

quindi abbiamo ottenuto un errore di un ordine di h minore.

Proviamo ora a ricavare una formula per f^2 . Usiamo lo sviluppo in serie di Taylor fino al terzo ordine:

$$\begin{cases} f_{i+1} &= f_i + f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 + \frac{1}{3!} f_i^3 h^3 + O(h^4) \\ f_{i-1} &= f_i - f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 - \frac{1}{3!} f_i^3 h^3 + O(h^4) \end{cases} \quad (18)$$

sommando membro a membro troviamo:

$$f_i^2 = \frac{f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i}{h^2} + O(h^2) \quad (19)$$

Ci poniamo ora il problema di come ottenere f^1 con accuratezza ancora maggiore e di come ottenere le derivate di ordine successivo. Consideriamo lo sviluppo in serie di Taylor fino all'ordine n con n pari. Possiamo costruire il seguente sistema di equazioni lineari a $n + 1$ variabili:

$$\begin{cases} f_{i+\frac{n}{2}} &= f_i + f_i^1 \left(\frac{n}{2}h\right) + \frac{1}{2} f_i^2 \left(\frac{n}{2}h\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} \left(\frac{n}{2}h\right)^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n \left(\frac{n}{2}h\right)^n + O(h^{n+1}) \\ f_{i+\frac{n}{2}-1} &= f_i + f_i^1 \left(\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right) + \frac{1}{2} f_i^2 \left(\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} \left(\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n \left(\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^n + O(h^{n+1}) \\ \dots & \\ f_{i+1} &= f_i + f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} h^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n h^n + O(h^{n+1}) \\ f_i &= f_i \\ f_{i-1} &= f_i - f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} (-h)^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n (-h)^n + O(h^{n+1}) \\ \dots & \\ f_{i-\frac{n}{2}+1} &= f_i + f_i^1 \left(-\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right) + \frac{1}{2} f_i^2 \left(-\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} \left(-\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n \left(-\left(\frac{n}{2}-1\right)h\right)^n + O(h^{n+1}) \\ f_{i-\frac{n}{2}} &= f_i + f_i^1 \left(-\frac{n}{2}h\right) + \frac{1}{2} f_i^2 \left(-\frac{n}{2}h\right)^2 + \dots + \frac{1}{(n-1)!} f_i^{n-1} \left(-\frac{n}{2}h\right)^{n-1} + \frac{1}{(n)!} f_i^n \left(-\frac{n}{2}h\right)^n + O(h^{n+1}) \end{cases} \quad (20)$$

che possiamo facilmente risolvere nelle incognite $f_i^1, f_i^2, \dots, f_i^{n-1}, f_i^n$. Le soluzioni avranno accuratezze $O(h^n), O(h^{n-1}), O(h^2), O(h)$ rispettivamente. A guisa d'esempio vediamo il caso $n = 2$, che fornisce il sistema:

$$\begin{cases} f_{i+1} &= f_i + f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 \\ f_i &= f_i \\ f_{i-1} &= f_i + f_i^1 h + \frac{1}{2} f_i^2 h^2 \end{cases} \quad (21)$$

che possiamo scrivere il forma matriciale come:

$$\begin{pmatrix} f_{i+1} \\ f_i \\ f_{i-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & h & \frac{1}{2}h^2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -h & \frac{1}{2}h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_i \\ f_i^1 \\ f_i^2 \end{pmatrix} \quad (22)$$

che possiamo risolvere come:

$$\begin{pmatrix} f_i \\ f_i^1 \\ f_i^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & h & \frac{1}{2}h^2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & -h & \frac{1}{2}h^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f_{i+1} \\ f_i \\ f_{i-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2h} & 0 & -\frac{1}{2h} \\ \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{i+1} \\ f_i \\ f_{i-1} \end{pmatrix} \quad (23)$$

da cui (ri-)troviamo le formule:

$$\begin{cases} f_i^1 &= \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2) \\ f_i^2 &= \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \end{cases} \quad (24)$$

Dove l'errore in $O(h^2)$ per f_i^2 è dovuto alla simmetria del problema come visto prima. L'inversione matriciale può essere anche fatta numericamente usando le routine BLAS/LAPACK. Applichiamo ora al caso $n = 4$:

$$\begin{pmatrix} f_{i+2} \\ f_{i+1} \\ f_i \\ f_{i-1} \\ f_{i-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2h & \frac{1}{2}(2h)^2 & \frac{1}{3!}(2h)^3 & \frac{1}{4!}(2h)^4 \\ 1 & h & \frac{1}{2}h^2 & \frac{1}{3!}h^3 & \frac{1}{4!}h^4 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -h & \frac{1}{2}h^2 & -\frac{1}{3!}h^3 & \frac{1}{4!}h^4 \\ 1 & -2h & \frac{1}{2}(2h)^2 & -\frac{1}{3!}(2h)^3 & \frac{1}{4!}(2h)^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_i \\ f_i^1 \\ f_i^2 \\ f_i^3 \\ f_i^4 \end{pmatrix} = \quad (25)$$

da cui invertendo:

$$\begin{pmatrix} f_i \\ f_i^1 \\ f_i^2 \\ f_i^3 \\ f_i^4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{12h} & \frac{2}{3h} & 0 & -\frac{2}{3h} & \frac{1}{12h} \\ -\frac{1}{12h^2} & \frac{3h^2}{4} & -\frac{5}{2h^2} & \frac{3h^2}{4} & -\frac{1}{12h^2} \\ \frac{2h^3}{1} & -\frac{h^3}{4} & 0 & \frac{h^3}{4} & -\frac{2h^3}{1} \\ \frac{1}{h^4} & -\frac{4}{h^4} & \frac{6}{h^4} & -\frac{4}{h^4} & \frac{1}{h^4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{i+2} \\ f_{i+1} \\ f_i \\ f_{i-1} \\ f_{i-2} \end{pmatrix} \quad (26)$$

che ci permette di trovare:

$$\begin{cases} f_i^1 &= \frac{-f_{i+2}+8f_{i+1}-8f_{i-1}+f_{i-2}}{12h} + O(h^4) \\ f_i^2 &= \frac{-f_{i+2}+16f_{i+1}-30f_i+16f_{i-1}-f_{i-2}}{12h^2} + O(h^4) \\ f_i^3 &= \frac{f_{i+2}-2f_{i+1}+2f_{i-1}-f_{i-2}}{2h^3} + O(h^2) \\ f_i^4 &= \frac{f_{i+2}-4f_{i+1}+6f_i-4f_{i-1}+f_{i-2}}{h^4} + O(h^2) \end{cases} \quad (27)$$

Tale metodo può essere facilmente esteso al caso di derivate parziali.

4 Integrare

Consideriamo il problema dell'integrazione della funzione $f(x)$ di cui conosciamo solo i valori $\{f_i\}$ nei punti $\{x_i\}$. Supponiamo di voler integrare la funzione da x_0 a x_N . La stessa definizione di Riemann dell'integrale:

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{M \rightarrow +\infty} \sum_{l=0, M-1} f\left(a + \frac{(b-a)l}{M}\right) \frac{(b-a)}{M} \quad (28)$$

ci porta a scrivere:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx \approx \sum_{i=0, N-1} f_i h \quad (29)$$

che prende anche il nome di *metodo dei rettangoli naif*. Si può facilmente intuirne il motivo guardando Fig. 5 (a) l'integrale corrisponde all'area in tratteggiato. E' interessante notare che possiamo considerare il metodo dei rettangoli (e gli altri metodi che vedremo) come l'integrale analitico di una funzione $\tilde{f}(x)$ che interpola la $f(x)$. In particolare nel metodo dei rettangoli tale funzione è discontinua. Andiamo a considerare l'errore associato al metodo dei rettangoli sfruttando lo sviluppo in serie di Taylor:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f_i + O(h)) dx = f_i h + O(h^2) \quad (30)$$

quindi l'accuratezza del metodo dei triangoli sarà:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \sum_{i=0, N-1} f_i h + NO(h^2) \quad (31)$$

e ricordandoci che $h = (x_N - x_0)/N$ possiamo scrivere

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \sum_{i=0, N-1} f_i h + O\left(\frac{1}{N}\right) \quad (32)$$

Notiamo che nel metodo dei rettangoli gli estremi di integrazione x_0 e x_N sono anche punti della griglia $\{x_i\}$ tale metodo viene indicato quindi come metodo *chiuso*.

Possiamo pensare a vedere cosa succede al procedimento appena visto considerando estremi di integrazione non appartenenti alla griglia in x su cui andiamo a calcolare la funzione f . Supponiamo quindi di conoscere la funzione f nei punti $\left\{x_{i+\frac{1}{2}}\right\}$. Allora:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f_{i+\frac{1}{2}} + f_{i+\frac{1}{2}}^1 \left(x - x_{i+\frac{1}{2}}\right) + O(h^2)\right) dx = f_{i+\frac{1}{2}} h + \left[\frac{1}{2}x^2 - x_{i+\frac{1}{2}}x\right]_{x_i}^{x_{i+1}} + O(h^3) \quad (33)$$

ora possiamo sfruttare la proprietà $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_{i+1}+x_i}{2}$ quindi:

$$\left[\frac{1}{2}x^2 - x_{i+\frac{1}{2}}x\right]_{x_i}^{x_{i+1}} = \left[\frac{1}{2}x^2 - \frac{x_{i+1}+x_i}{2}x\right]_{x_i}^{x_{i+1}} = 0 \quad (34)$$

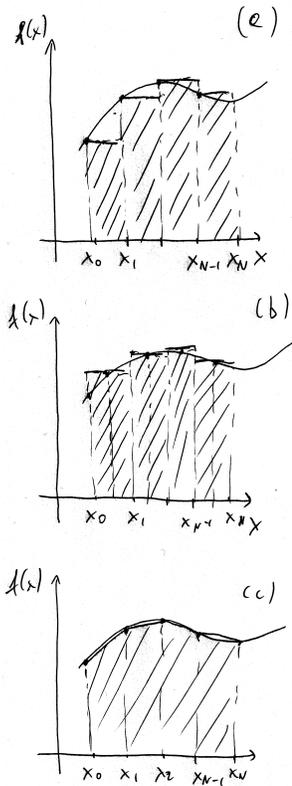


Figura 5: Integrazione con: (a) metodo dei rettangoli naif, (b) metodo dei rettangoli, (c) metodo dei trapezi

da cui:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \sum_{i=0, N-1} f_{i+\frac{1}{2}} h + NO(h^3) = \sum_{i=0, N-1} f_{i+\frac{1}{2}} h + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (35)$$

tale metodo prende il nome di *metodo dei rettangoli* e come si vede in figura 5 (b) è *aperto* rispetto agli estremi di integrazione. Anche in questo caso il metodo di integrazione può essere visto come un'interpolazione della funzione f e anche in questo caso essa è discontinua. Andiamo ora a vedere un metodo corrispondente ad un'interpolazione continua. Consideriamo l'espansione in serie di Taylor fino al secondo ordine:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f_i + f_i^1(x - x_i) + O(h^2)) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f_i + \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h) \right) (x - x_i) + O(h^2) \right) dx \quad (36)$$

dove abbiamo usato la formula *naif* per f_i^1 . Si ricava:

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx &= \left[f_i + \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right) \left(\frac{1}{2} x^2 - x_i x \right) \right]_{x_i}^{x_{i+1}} + O(h^3) \\ &= \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right) \left(\frac{x_{i+1}^2}{2} - x_i x_{i+1} - \frac{x_i^2}{2} + x_i^2 \right) + f_i (x_{i+1} - x_i) + O(h^3) \\ &= \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right) \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i)^2 + f_i (x_{i+1} - x_i) = \frac{(f_{i+1} - f_i)}{2h} h^2 + f_i h = \frac{(f_{i+1} + f_i)}{2} h + O(h^3) \end{aligned} \quad (37)$$

stando ora attenti ai punti estremi f_0 e f_1 , Troviamo:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \sum_{i=0, N-1} \frac{f_i + f_{i+1}}{2} h + NO(h^3) = \frac{1}{2} (f_0 + f_N) h + \sum_{i=1, N-1} f_i h + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (38)$$

questo metodo prende il nome di *metodo dei trapezi* ed è *chiuso* rispetto agli estremi di integrazione. La sua accuratezza è analoga al metodo dei rettangoli. Questo non ci sorprende infatti il metodo dei trapezi è equivalente al metodo dei

rettangoli ponendo $f_{i+\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2}(f_{i+1} + f_i)$, vedi Fig. 5 (c). Ad ogni modo i due metodi non danno nel caso generale lo stesso risultato.

Vogliamo ora vedere di aumentare la nostra accuratezza, possiamo ancora ricorrere allo sviluppo in serie di Taylor ed al metodo delle differenze finite per trovare le derivate. Vediamo ora lo sviluppo fino al terzo ordine e integriamo tra x_{i-1} e x_{i+1} . Sviluppiamo attorno al punto centrale x_i . Termini di ordine dispari (primo e terzo ordine) integrano a zero per simmetria.

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left(f_i + f_i^1(x-x_i) + \frac{f_i^2}{2!}(x-x_i)^2 + \frac{f_i^3}{3!}(x-x_i)^3 + O(h^4) \right) dx \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left(f_i + \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \right) (x-x_i)^2 + O(h^4) \right) dx \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left(f_i + \frac{1}{2} \left(\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \right) (x-x_i)^2 + O(h^4) \right) dx \\ &= f_i 2h + \frac{1}{6} \left(\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \right) 2h^3 + O(h^5) = \left(\frac{1}{3}f_{i+1} + \frac{4}{3}f_i + \frac{1}{3}f_{i-1} \right) h + O(h^5) \end{aligned} \quad (39)$$

ora dobbiamo sommare sugli intervalli di lunghezza $2h$, poniamo quindi N pari, stando attenti agli estremi, troviamo:

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x) dx = \frac{1}{3}hf_0 + \frac{4}{3}hf_1 + \frac{2}{3}hf_2 + \frac{4}{3}hf_3 + \frac{2}{3}hf_4 + \dots + \frac{4}{3}hf_{N-1} + \frac{1}{3}hf_N + O\left(\frac{1}{N^4}\right) \quad (40)$$

tale regola d'integrazione prende il nome di *regola di Simpson* ed è chiusa rispetto agli estremi. E' interessante vedere a quale interpolazione corrisponde l'integrazione tramite la regola di Simpson. Essa è equivalente ad integrare tra x_{i-1} e x_{i+1} la funzione:

$$\tilde{f}(x) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}(x-x_i) + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2h^2}(x-x_i)^2 \quad (41)$$

essa è un polinomio di secondo grado che passa per i punti f_{i-1}, f_i, f_{i+1} . Notiamo che di tali polinomi ne esiste uno solo. Quindi il metodo di Simpson equivale ad approssimare la funzione $f(x)$ tra x_{i-1} e x_{i+1} con un $p_2(x)$ polinomio di II grado definito dalle condizioni $p_2(x_{i-1}) = f_{i-1}, p_2(x_i) = f_i, p_2(x_{i+1}) = f_{i+1}$. Possiamo generalizzare questa idea considerando n punti da x_i a x_{i+n-1} ed andare ad integrare il polinomio di grado $n-1$ passante per i punti $(x_i, f_i), \dots, (x_{i+n-1}, f_{i+n-1})$. Tale metodo prende il nome di *regola di Newton-Cotes*. Se $n=2$ il polinomio è un segmento di retta passante per i due punti e vado a ritrovare il metodo dei trapezi. Per un n arbitrario p_{n-1} è dato dalla formula di Lagrange:

$$p_{n-1}(x) = \sum_{j=1, n} f_j \prod_{\substack{k=1, n \\ k \neq j}} \frac{x-x_k}{x_j-x_k} \quad (42)$$

Sembrerebbe allettante usare tale formula per interpolare $f(x)$ da f_0 a f_N usando tutti i punti f_i , purtroppo la formula di Lagrange non è stabile per n dell'ordine di qualche decina e per n ancora più grandi può fornire catastrofici risultati divergenti. Illustriamo questo problema studiando la funzione:

$$f(x) = x \sin(20x) \quad (43)$$

nell'intervallo $[0, 1]$. In Fig. 6 mostriamo che mentre per n piccolo l'interpolazione è soddisfacente per n grande essa diventa completamente erronea in prossimità degli estremi.

4.1 Integrazione con estremo infinito

Talvolta dobbiamo integrare su di un intervallo del tipo $\int_0^{+\infty} f(x) dx$, questo non permette l'introduzione di griglie equispaziate in x . Supponendo che f sia integrabile, andiamo a scegliere una funzione $g(y)$ monotona tale che $g(0) = 0$ e $\lim_{y \rightarrow 1^-} g(y) = +\infty$ allora possiamo porre $x = g(y)$ e scrivere:

$$\int_0^{+\infty} f(x) dx = \int_0^1 f(g(y)) \left(\frac{dg(y)}{dy} \right) dy \quad (44)$$

dunque possiamo utilizzare le tecniche apprese nella precedente sezione integrando su y nell'intervallo $[0, 1]$. Un esempio di tale funzione è $g(x) = \frac{1}{1-x} - 1 = \frac{x}{1-x}$.

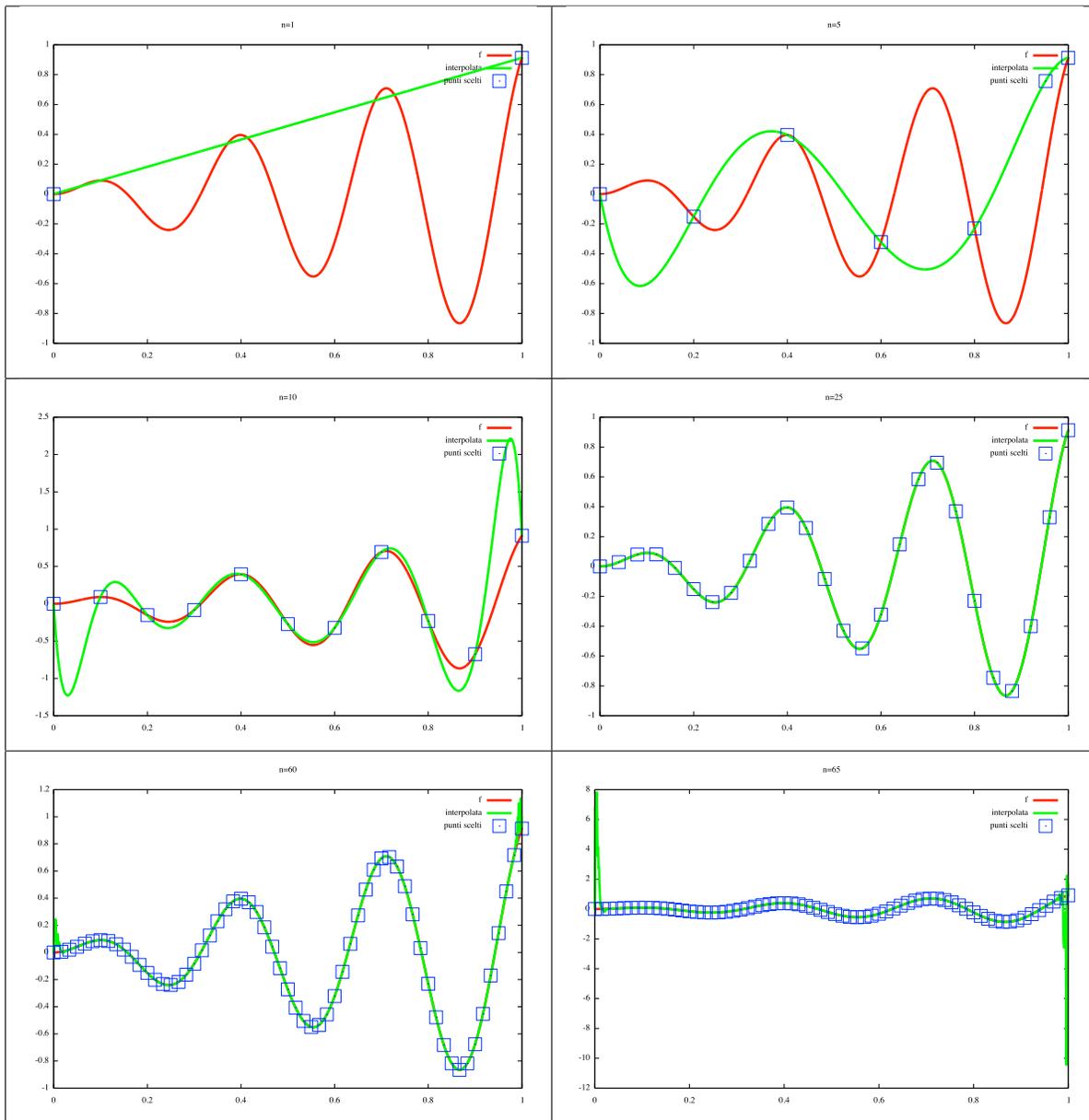


Figura 6: Funzione $x \sin(20x)$ (rosso) e interpolazione (verde) tramite formula di Lagrange con n punti. I $n + 1$ punti della funzione scelti sono visualizzati come quadrati blu.

4.2 Integrazione di funzioni a più dimensioni

Consideriamo la funzione $f(x^1, x^2, x^3, \dots, x^M)$ definita su \mathbb{R}^M , supponiamo di volere integrare sul volume

$[x_0^1, x_N^1] [x_0^2, x_N^2] \dots [x_0^M, x_N^M]$ e supponiamo di conoscerla su di una griglia equispaziata rispetto ad ogni direzione tale che per ogni direzione la valuti in N punti. Ossia la funzione è conosciuta in N^M punti. Posso facilmente integrarla con il metodo dei rettangoli o dei trapezi (scegliamo qui quello dei rettangoli per semplicità di scrittura):

$$\begin{aligned} & \int_{x_0^1}^{x_N^1} dx^1 \dots \int_{x_0^M}^{x_N^M} dx^M f(x^1, \dots, x^M) = \int_{x_0^1}^{x_N^1} dx^1 \dots \int_{x_0^{M-1}}^{x_N^{M-1}} dx^{M-1} \left(\sum_{i=0, N-1} f(x^1, \dots, f_{i+\frac{1}{2}}^M) h + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right) \\ & = \left\{ \int_{x_0^1}^{x_N^1} dx^1 \dots \int_{x_0^{M-2}}^{x_N^{M-2}} dx^{M-2} \left(\sum_{j=0, N-1} \sum_{i=0, N-1} f(x^1, \dots, f_{j+\frac{1}{2}}^{M-1}, f_{i+\frac{1}{2}}^M) h + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right) \right\} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (45) \\ & = \sum_{i^1=0, N-1} \dots \sum_{i^M=0, N-1} f(x_{i^1+\frac{1}{2}}^1, \dots, f_{i^M+\frac{1}{2}}^M) h^M + MO\left(\frac{1}{N^2}\right) \end{aligned}$$

dove M è generalmente molto più piccolo di N per cui l'accuratezza finale è dell'ordine $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ dove N è il numero di punti lungo la singola direzione. Per una dimensione M il numero totale di punti in cui devo valutare f è $N_{\text{sampling}} = N^M$ per cui l'accuratezza rispetto al numero di valutazioni della funzione è $O\left(\frac{1}{N_{\text{sampling}}^{\frac{1}{M}}}\right)$ per cui per M grande l'integrazione diventerà costosa dal punto computazionale.

5 Interpolare

Abbiamo visto come i metodo per l'integrazione corrispondono a metodi di interpolazione. Vediamo ora due metodi usati per la solo interpolazione. Supponiamo di voler interpolare la funzione $f(x)$ conosciuta nei punti x_i , $f_i = f(x_i)$ con $i = 0, \dots, N$.

5.1 Splines

In ogni intervallo $[x_i, x_{i+1}]$ interpoliamo con un polinomio di ordine m :

$$f(x) \approx p_i(x) = \sum_{k=0, m} c_{i,k} x^k \quad \text{con } x \in [x_i, x_{i+1}] \quad (46)$$

I coefficienti $c_{i,k}$ vengono trovati imponendo che la funzione interpolante passi per i punti (x_i, f_i) e che essa sia continua con derivate continue fino all'ordine $m-1$:

$$p_i(x_i) = f_i \quad i = 0, N-1 \quad (47)$$

$$p_{N-1}(x_N) = f_N \quad (48)$$

$$p_i^{(l)}(x_{i+1}) = p_{i+1}^{(l)}(x_{i+1}) \quad i = 0, N-2 \quad l = 0, m-1 \quad (49)$$

Dove *fisso* solo l'estremo sinistro per ogni intervallino; quello destro lo fissa la richiesta di continuità. Notiamo che ho un totale di $(m+1)N$ incognite ed un sistema di $N+1+(m)(N-1)$ equazioni. Il sistema per avere soluzioni richiede dunque ancora $m-1$ equazioni. Esse vanno cercate imponendo qualche relazione per $p_0^{(l)}(x_0)$ e per $p_{N-1}^{(l)}(x_N)$ con $l = m-1, m-2, \dots$

Vediamo ora il caso (molto usato) della splines cubica $m=3$ abbinata alla scelta *naturale* delle condizioni aggiuntive:

$$p_0^{(2)}(x_0) = 0 \quad (50)$$

$$p_{N-1}^{(2)}(x_N) = 0 \quad (51)$$

La derivata seconda della spline sarà una funzione lineare in ogni intervallo $[x_i, x_{i+1}]$ e continua. Pertanto possiamo trovarla andando ad interpolare in ogni intervallo, con $x \in [x_i, x_{i+1}]$:

$$p_i^{(2)}(x) = \frac{1}{h_i} ((x-x_i)p_{i+1}^{(2)} - (x-x_{i+1})p_i^{(2)}) \quad (52)$$

dove $h_i = x_{i+1} - x_i$. Ora integriamo due volte e troviamo:

$$p_i(x) = \alpha_i(x-x_i)^3 + \beta_i(x-x_{i+1})^3 + \gamma_i(x-x_i) + \eta_i(x-x_{i+1}) \quad (53)$$

con:

$$\alpha_i = \frac{p_{i+1}^{(2)}}{6h_i} \quad (54)$$

$$\beta_i = -\frac{p_i^{(2)}}{6h_i} \quad (55)$$

$$\gamma_i = -\alpha_i h_i^2 + \frac{f_{i+1}}{h_i} = -\frac{p_{i+1}^{(2)} h_i}{6} + \frac{f_{i+1}}{h_i} \quad (56)$$

$$\eta_i = -\beta_i h_i^2 - \frac{f_i}{h_i} = \frac{p_i^{(2)} h_i}{6} - \frac{f_i}{h_i} \quad (57)$$

dove le espressioni per γ_i e η_i sono state trovate imponendo $p_i(x_i) = f_i$ e $p_i(x_{i+1}) = f_{i+1}$. Quindi per determinare la spline dobbiamo trovare le $p_i^{(2)}$. Applichiamo ora la condizione:

$$p_{i-1}^{(1)}(x_i) = p_i^{(1)}(x_i) \quad (58)$$

si trova:

$$3\alpha_{i-1} h_{i-1}^2 + \gamma_{i-1} + \eta_{i-1} = 3\beta_i h_i^2 + \gamma_i + \eta_i \quad (59)$$

$$\frac{p_i^{(2)} h_{i-1}}{2} - \frac{p_i^{(2)} h_{i-1}}{6} + \frac{f_i}{h_{i-1}} + \frac{p_{i-1}^{(2)} h_{i-1}}{6} - \frac{f_{i-1}}{h_{i-1}} = -\frac{p_i^{(2)} h_i}{2} - \frac{p_{i+1}^{(2)} h_i}{6} + \frac{f_{i+1}}{h_i} + \frac{p_i^{(2)} h_i}{6} - \frac{f_i}{h_i} \quad (60)$$

che possiamo scrivere come:

$$h_{i-1} p_{i-1}^{(2)} + 2(h_{i-1} + h_i) p_i^{(2)} + h_i p_{i+1}^{(2)} = 6 \left(\frac{g_i}{h_i} - \frac{g_{i-1}}{h_{i-1}} \right) \quad (61)$$

dove abbiamo posto $g_i = f_{i+1} - f_i$. Ricordiamo che abbiamo scelto le condizioni aggiuntive $p_0^{(2)} = 0$ e $p_N^{(2)} = 0$. Il problema può essere dunque posto in forma matriciale:

$$\begin{pmatrix} d_1 & h_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ h_1 & d_2 & h_2 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & h_{N-3} & d_{N-2} & h_{N-2} \\ 0 & \vdots & \vdots & 0 & h_{N-2} & d_{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1^{(2)} \\ p_2^{(2)} \\ \vdots \\ p_{N-2}^{(2)} \\ p_{N-1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-2} \\ b_{N-1} \end{pmatrix} \quad (62)$$

con $d_i = 2(h_{i-1} + h_i)$ e

$$b_i = 6 \left(\frac{g_i}{h_i} - \frac{g_{i-1}}{h_{i-1}} \right) \quad (63)$$

Quindi abbiamo riformulato il problema in:

$$\mathbf{A} \mathbf{p}^{(2)} = \mathbf{b} \quad (64)$$

Dove la matrice \mathbf{A} è tridiagonale:

$$A_{ij} = \begin{cases} d_i & \text{se } i = j \\ h_{i-1} & \text{se } j = i - 1 \\ h_i & \text{se } j = i + 1 \\ \text{altrimenti} & \end{cases} \quad (65)$$

Illustriamo ora un metodo iterativo per risolvere il problema $\mathbf{A} \mathbf{z} = \mathbf{b}$ con \mathbf{A} matrice tridiagonale e \mathbf{z} vettore incognita. Per prima cosa decomponiamo $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{U}$ con \mathbf{L} matrice triangolare inferiore $L_{ij} = 0$ per $j > i$ e \mathbf{U} matrice triangolare superiore $U_{ij} = 0$ per $j < i$. Scegliamo $U_{ii} = 1$ chiamata fattorizzazione di Crout. Usiamo la notazione:

$$A = \begin{pmatrix} d_1 & e_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ c_1 & d_2 & e_2 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & c_{N-3} & d_{N-2} & e_{N-2} \\ 0 & \vdots & \vdots & 0 & c_{N-2} & d_{N-1} \end{pmatrix} \quad (66)$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} w_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ v_1 & w_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & v_{N-3} & w_{N-2} & 0 \\ 0 & \vdots & \vdots & 0 & v_{N-2} & w_{N-1} \end{pmatrix} \quad (67)$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & t_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & t_2 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & 0 & 1 & t_{N-2} \\ 0 & \vdots & \vdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (68)$$

Troviamo dunque il sistema di equazioni:

$$\begin{cases} w_1 = d_1 \\ t_{i-1}v_{i-1} + w_i = d_i \\ w_it_i = e_i \\ v_{i-1} = c_{i-1} \end{cases} \quad (69)$$

che possiamo risolvere in maniera iterativa: prima poniamo $v_1 = c_1$ e $w_1 = d_1$ poi usiamo $w_i = d_i - t_{i-1}v_{i-1}$ e $t_i = e_i/w_i$, dove si intende che $t_0 = v_0 = 0$.

Ora possiamo risolvere $\mathbf{LUz} = \mathbf{b}$. Procediamo in due passi entrambi iterativi. Cominciamo con trovare \mathbf{y} che risolve $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$:

$$\begin{cases} w_1y_1 = b_1 \\ v_{i-1}y_{i-1} + w_iy_i = b_i \end{cases} \quad (70)$$

poniamo dunque $y_1 = b_1/w_1$ e poi iteriamo con:

$$y_i = \frac{b_i - v_{i-1}y_{i-1}}{w_i} \quad (71)$$

Infine risolviamo $\mathbf{Uz} = \mathbf{y}$. Abbiamo:

$$\begin{cases} z_{N-1} = y_{N-1} \\ z_i + t_iz_{i+1} = y_i \end{cases} \quad (72)$$

poniamo dunque $z_{N-1} = y_{N-1}$ e poi iteriamo, con verso opposto, con:

$$z_i = y_i - t_iz_{i+1} \quad (73)$$

6 Serie di Fourier discreta e Fast Fourier Transform

Consideriamo ora una funzione periodica di periodo L :

$$f(x + L) = f(x) \quad (74)$$

che conosciamo su di una griglia di N punti equispaziati, per cui vale: $f_0 = f_N$. La serie di Fourier di f permettere di scrivere tale funzione come:

$$f(x) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{m=1,+\infty} \left(a_m \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) + b_m \sin\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) \right) \quad (75)$$

Possiamo calcolare la corrispondente trasformata di Fourier discreta che possiamo poi usare per interpolare la funzione f . I coefficienti a_m e b_m sono dati da:

$$a_m = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx \quad (76)$$

$$b_m = \frac{2}{L} \int_0^L f(x) \sin\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx \quad (77)$$

$$(78)$$

Infatti, se consideriamo a_m

$$\int_0^L f(x) \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx = \frac{1}{2}a_0 \int_0^L \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx \quad (79)$$

$$+ \int_0^L \sum_{m'=1,+\infty} a'_m \cos\left(\frac{2\pi}{L}m'x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx \quad (80)$$

$$+ \int_0^L \sum_{m'=1,+\infty} b'_m \sin\left(\frac{2\pi}{L}m'x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L}mx\right) dx \quad (81)$$

$$(82)$$

Possiamo usare i seguenti integrali indefiniti:

$$\int \cos(\alpha x) \cos(\beta x) dx = \frac{\sin((\alpha - \beta)x)}{2(\alpha - \beta)} + \frac{\sin((\alpha + \beta)x)}{2(\alpha + \beta)} \quad \text{per } |\alpha| \neq |\beta| \quad (83)$$

$$\int \cos^2(\alpha x) dx = \frac{1}{2}x + \frac{1}{4\alpha} \sin(2\alpha x) \quad (84)$$

$$\int \sin(\alpha x) \cos(\beta x) dx = -\frac{\cos((\alpha + \beta)x)}{2(\alpha + \beta)} - \frac{\cos((\alpha - \beta)x)}{2(\alpha - \beta)} \quad \text{per } |\alpha| \neq |\beta| \quad (85)$$

$$(86)$$

Da cui si ottiene facilmente le formule di Eq. 76.

Spesso è conveniente, anche per una funzione f reale, scrivere:

$$f(x) = \sum_{m=-\infty, \infty} c_m e^{i\frac{2\pi}{L}mx} \quad (87)$$

dove:

$$c_m = \frac{1}{L} \int_0^L f(x) e^{-i\frac{2\pi}{L}mx} dx \quad (88)$$

Infatti:

$$\frac{1}{L} \int_0^L f(x) e^{-i\frac{2\pi}{L}mx} dx = \frac{1}{L} \int_0^L \left(\sum_{m'=-\infty, \infty} c_{m'} e^{i\frac{2\pi}{L}m'x} \right) e^{-i\frac{2\pi}{L}mx} dx \quad (89)$$

$$= \frac{1}{L} \sum_{m'=-\infty, \infty} \int_0^L e^{i\frac{2\pi}{L}(m'-m)x} dx \quad (90)$$

$$= \frac{1}{L} \sum_{m'=-\infty, \infty} L c_{m'} \delta_{m', m} \quad (91)$$

$$= c_m \quad (92)$$

Se f è reale possiamo ricavare le seguente relazione:

$$f(x) = f^*(x) \quad (93)$$

$$\sum_m c_m e^{i\frac{2\pi}{L}mx} = \sum_{m'} c_{m'}^* e^{-i\frac{2\pi}{L}m'x} \quad (94)$$

da cui, per f reale:

$$c_m = c_{-m}^* \quad (95)$$

E' interessante il caso in cui la funzione periodica f è conosciuta su di N punti equispaziati x_i con $i = 0, N - 1$ e con $x_N - x_0 = L$. La condizione di periodicità viene scritta con: $f_{i+N} = f_i$. La serie di Fourier discreta viene definita con:

$$f_i = \frac{1}{N} \sum_{j=0, N-1} g_j e^{i\frac{2\pi}{L}jx_i} \quad (96)$$

con:

$$g_i = \sum_{j=0, N-1} f_j e^{-i\frac{2\pi}{L}ix_j} \quad (97)$$

Usando la relazione $x_i = iL/N$ possiamo scrivere:

$$f_i = \frac{1}{N} \sum_{j=0, N-1} g_j e^{i \frac{2\pi}{N} j i} \quad (98)$$

$$g_i = \sum_{j=0, N-1} f_j e^{-i \frac{2\pi}{N} j i} \quad (99)$$

Infatti:

$$\sum_{j=0, N-1} f_j e^{-i \frac{2\pi}{N} j i} = \sum_{j=0, N-1} \frac{1}{N} \sum_{j'=0, N-1} g_{j'} e^{i \frac{2\pi}{N} j' j} e^{-i \frac{2\pi}{N} j i} \quad (100)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j'=0, N-1} \sum_{j=0, N-1} g_{j'} e^{i \frac{2\pi}{N} (j' - i) j} \quad (101)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j'=0, N-1} g_{j'} N \delta_{j', i} \quad (102)$$

$$= g_i \quad (103)$$

In Eq. 98 abbiamo usato la stessa convenzione di segni e del fattore $1/N$ usata nella libreria di python *scipy*. Notiamo che sia la f che la funzione inversa g sono periodiche, pertanto:

$$g_{-i} = g_{N-i} \quad (104)$$

A prima vista il calcolo della serie discreta di Fourier scala con il numero N di punti come $O(N^2)$. Fortunatamente è possibile raccogliere i termini entranti le sommatorie in Eq. 98 in maniera tale da ottenere un costo di ordine $O(N \ln(N))$. Tale algoritmo prende il nome Fast Fourier Transform (FFT).

6.1 Derivare una trasformata di Fourier

E' interessante notare come sia semplice l'operazione di derivata nel caso la funzione $f(x)$ sia espressa come serie di Fourier. Sia:

$$f(x) = \sum_m c_m e^{i \frac{2\pi}{L} m x} \quad (105)$$

allora

$$\frac{df(x)}{dx} = \sum_m \left(i c_m \frac{2\pi}{L} m \right) e^{i \frac{2\pi}{L} m x} \quad (106)$$

quindi in questo caso la derivata è esatta. Nel caso della trasformata discreta, la derivata si ottiene tramite la medesima corrispondenza:

$$g_m \rightarrow i g_m \frac{2\pi}{L} m \quad (107)$$

7 Risolvere equazioni

vogliamo risolvere la generica equazione:

$$f(x) = 0 \quad (108)$$

valutando f e, in caso la sua derivata, numericamente. Supponiamo che la funzione f sia continua.

7.1 Metodo della bisezione

Cerchiamo soluzioni nell'intervallo $[x_0, x_N]$ e consideriamo la solita griglia equispaziata h . Se tra i e $i + 1$ il segno di f cambia, allora c'è almeno una soluzione nell'intervallo $[x_i, x_{i+1}]$. Notiamo che la condizione del cambio di segno può essere scritta come $f_i f_{i+1} < 0$. Supponiamo ora di voler trovare una soluzione con accuratezza ϵ . Usiamo il seguente algoritmo:

1. poniamo $a = x_i$ e $b = x_{i+1}$
2. poniamo $c = \frac{b-a}{2}$
3. se $f(c)f(a) < 0$ poniamo $b = c$ altrimenti poniamo $a = c$
4. se $b - a < \epsilon$ il risultato è $x_{sol} = \frac{b-a}{2}$ altrimenti torniamo al punto 2

7.2 Metodo di Newton-Raphson

Questo metodo sfrutta sia il calcolo di f sia di $f^{(1)} = \frac{df}{dx}$. L'idea è di approssimare f con una funzione lineare e di trovare una soluzione approssimata e di iterare. Cominciamo dal punto x_{trial} :

1. considero $f(x) \approx f(x_{trial}) + f^{(1)}(x_{trial})(x - x_{trial})$
2. risolvo e pongo $x_{sol} = x_{trial} - \frac{f(x_{trial})}{f^{(1)}(x_{trial})}$
3. se $|x_{trial} - x_{sol}| < \epsilon$ prendo la soluzione x_{sol} altrimenti pongo $x_{trial} = x_{sol}$ e riparto dal punto 1