Approssimazione numerica di sistemi fisici

Daniele Di Pietro

Collegio Ghislieri, 22/02/2024

Funded by the European Union
European Research Council
Established by the European Commission

Modellizzazione di sistemi fisici

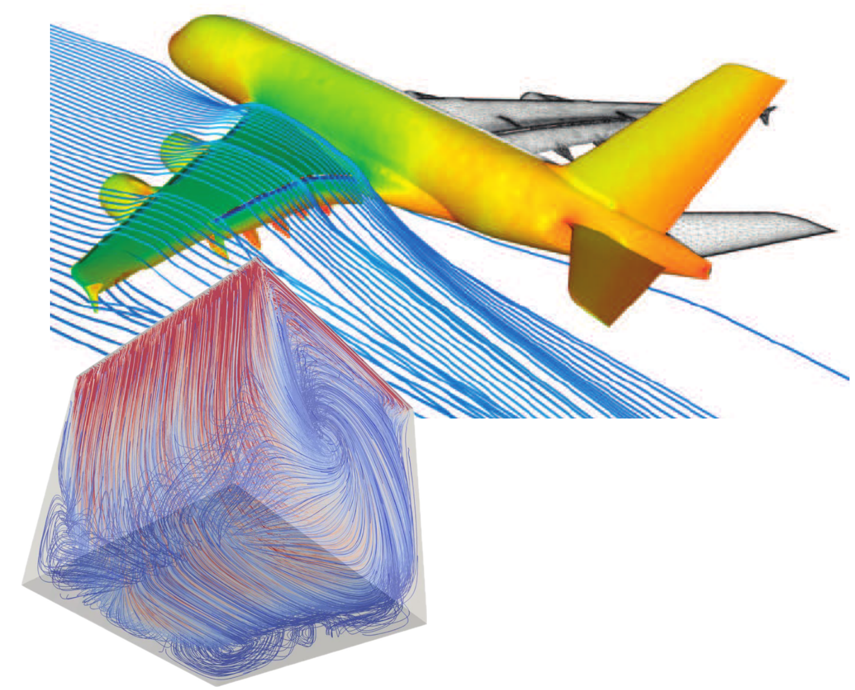
Modellizzazione

$$-\nu \Delta \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} + \nabla p = \boldsymbol{f}$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$$

Discretizzazione

Sistema fisico

Modello matematico



Modello numerico

Simulazione tratta [Botti, Di Pietro, Droniou, 2019] e immagini tratte da internet

Equazioni alle derivate parziali

Nozione

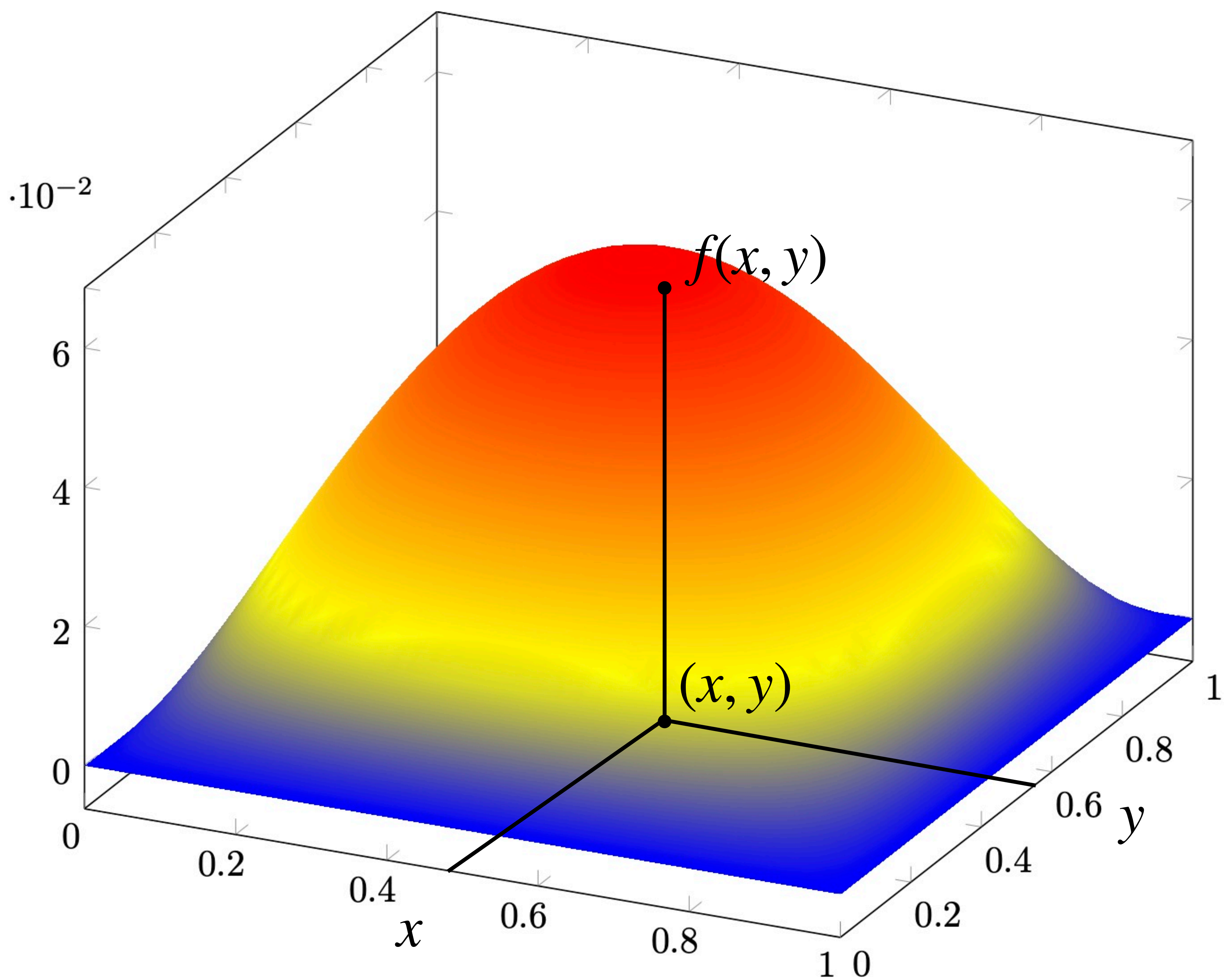
- I modelli matematici di fenomeni fisici si esprimono spesso in termini di equazioni alle derivate parziali (EDP)
- La nozione di equazione è nota dalle scuole secondarie
- Un esempio di equazione è:

Trovare i numeri reali x tali che $x^2 + 2x + 4 = 0$

- Nelle equazioni alle derivate parziali, l'incognita è una funzione di più variabili (come coordinate spaziali, tempo, etc.)

Equazioni alle derivate parziali

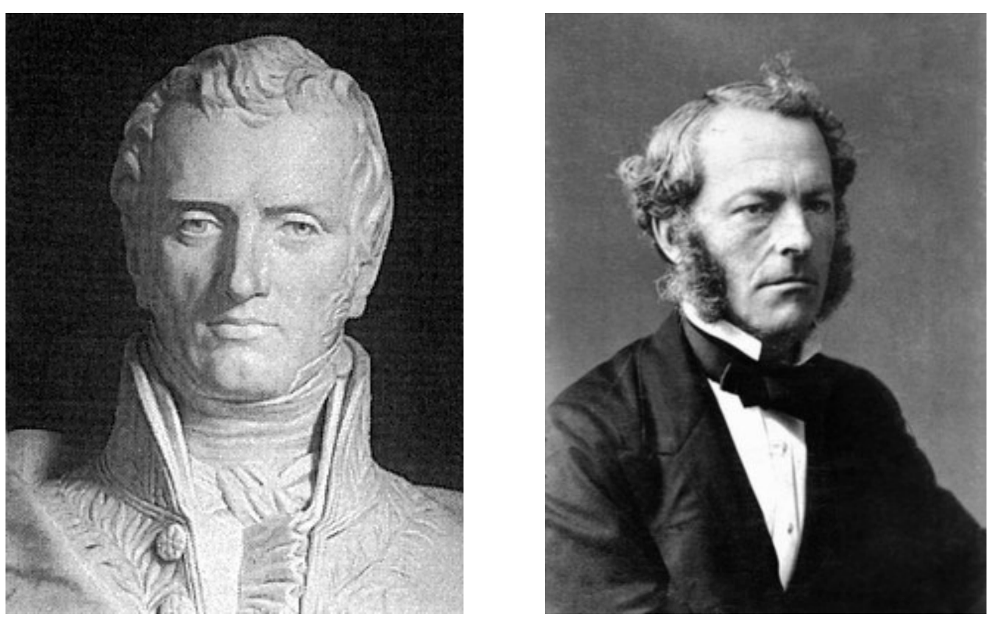
Un esempio di funzione di due variabili



Equazioni alle derivate parziali

Questioni matematiche

- Esiste una soluzione?
- Se esiste, è unica?
- Se controllo il dato, controllo anche la soluzione?
- Se il dato è regolare, lo è anche la soluzione?



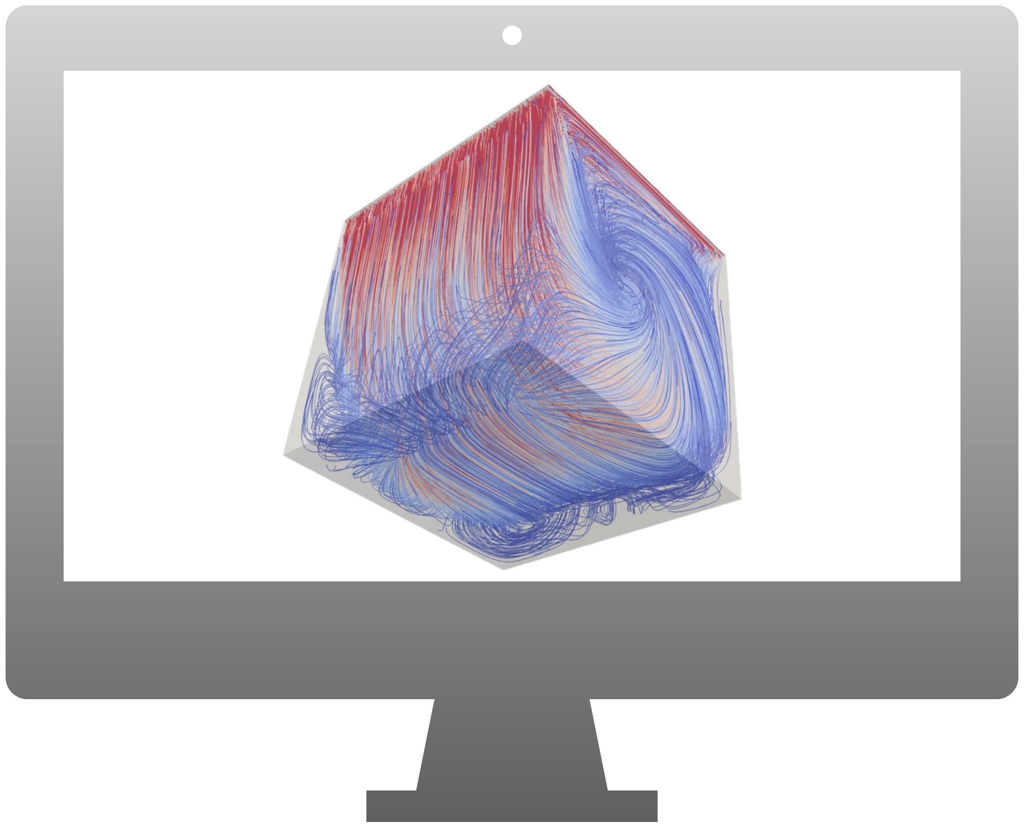
Claude-Louis Navier (1785–1836) e George Gabriel Stokes (1819–1903), a cui si devono le equazioni della fluidodinamica

CMI

Il Clay Mathematics Institute ha messo in palio 1M$ per la dimostrazione di esistenza e regolarità di soluzioni delle equazioni di Navier—Stokes

Soluzione numerica

- In generale, non è possibile risolvere una EDP in modo esatto
- Per ottenere informazioni quantitative sulla soluzione, è possibile risolverla in maniera approssimata sul calcolatore
- Questo richiede lo sviluppo di metodi numerici



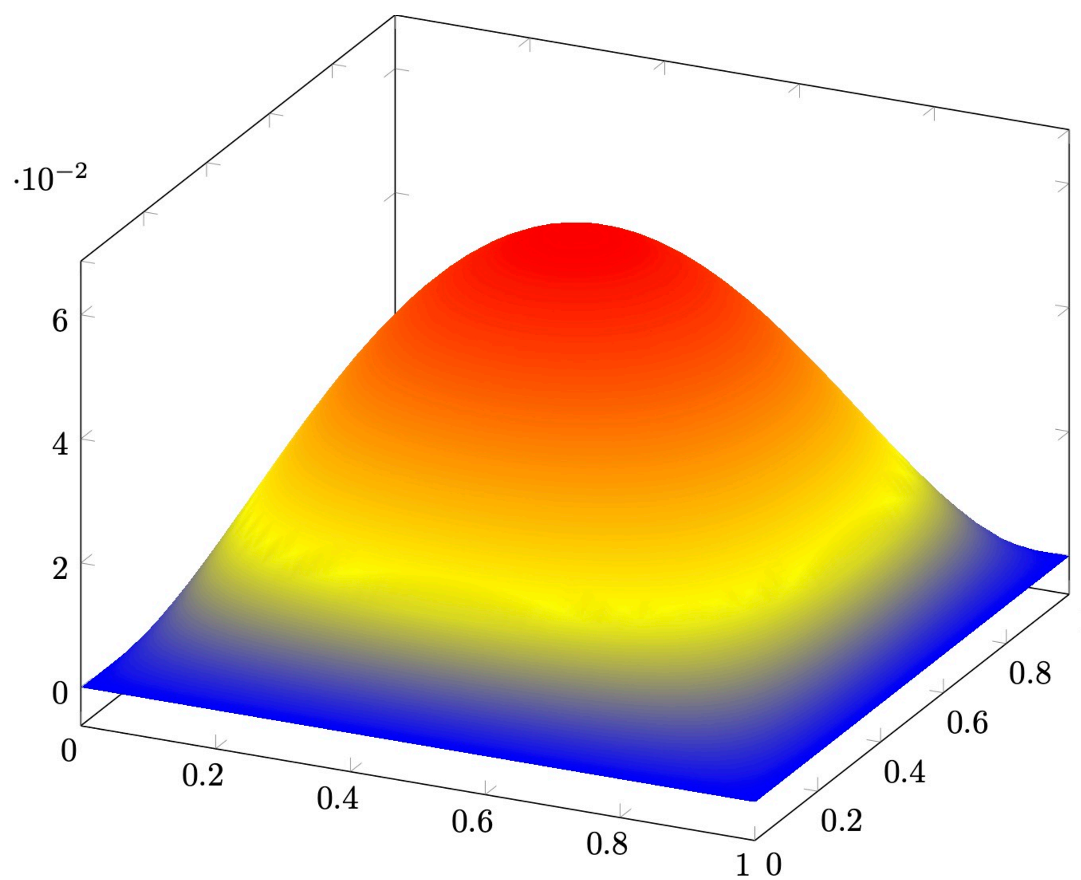
Soluzione numerica

Difficoltà

- Per conoscere interamente la soluzione di una EDP, bisognerebbe conoscerne il valore in ogni punto

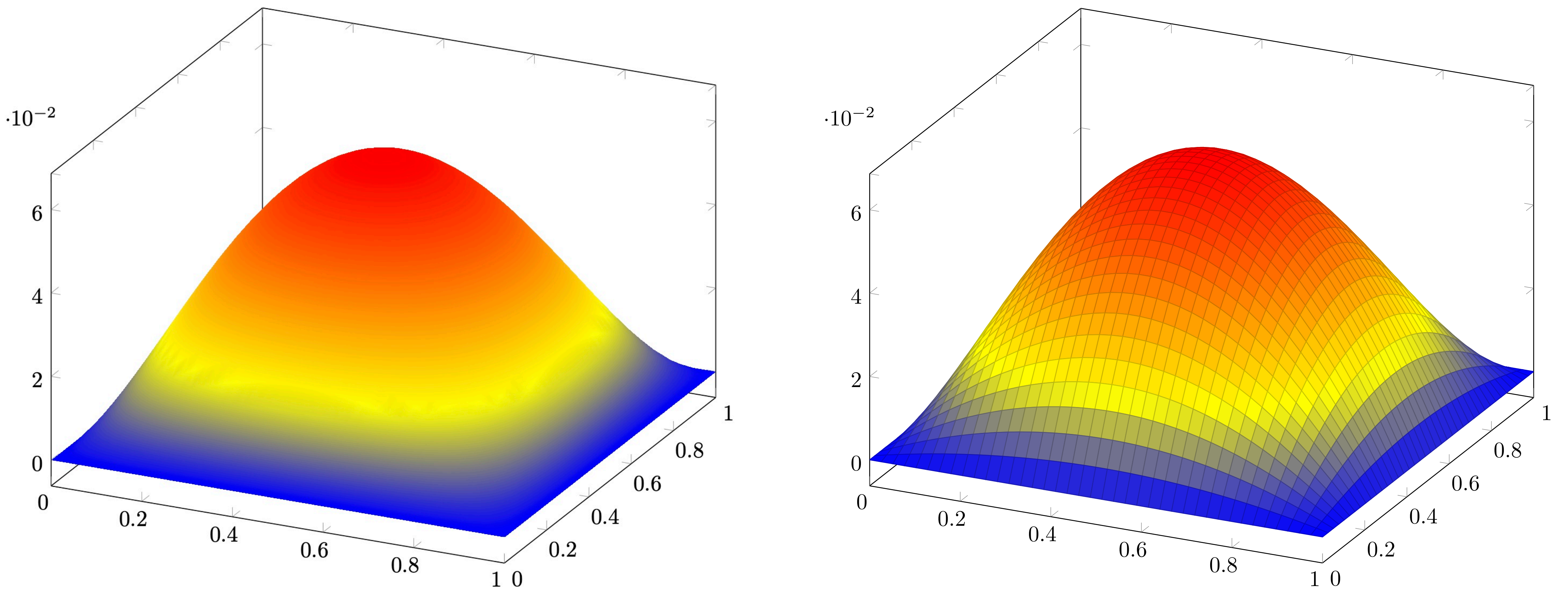
- I punti sono infiniti: questo richiederebbe di gestire un'infinità di valori

- I calcolatori non sono in grado di gestire oggetti di dimensione infinita!



Soluzione numerica

Discretizzazione



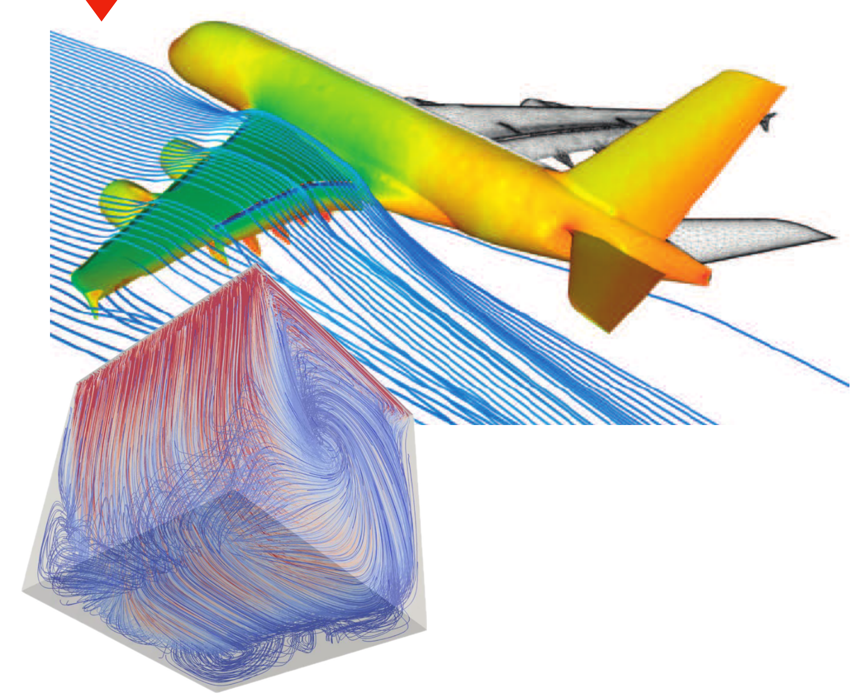
Soluzione numerica

Convergenza

Errore di modellizzazione ϵ_{mod}

$$-\nu\Delta \boldsymbol{u} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} + \nabla p = \boldsymbol{f}$$
$$\nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0$$

Errore di discretizzazione $\epsilon_{\text{dis},N}$



Convergenza:

$$\lim_{N\to\infty} \epsilon_{\text{dis},N} = 0?$$

con N misura dello “sforzo” richiesto al calcolatore

Soluzione numerica

Il principio di Lax per problemi lineari

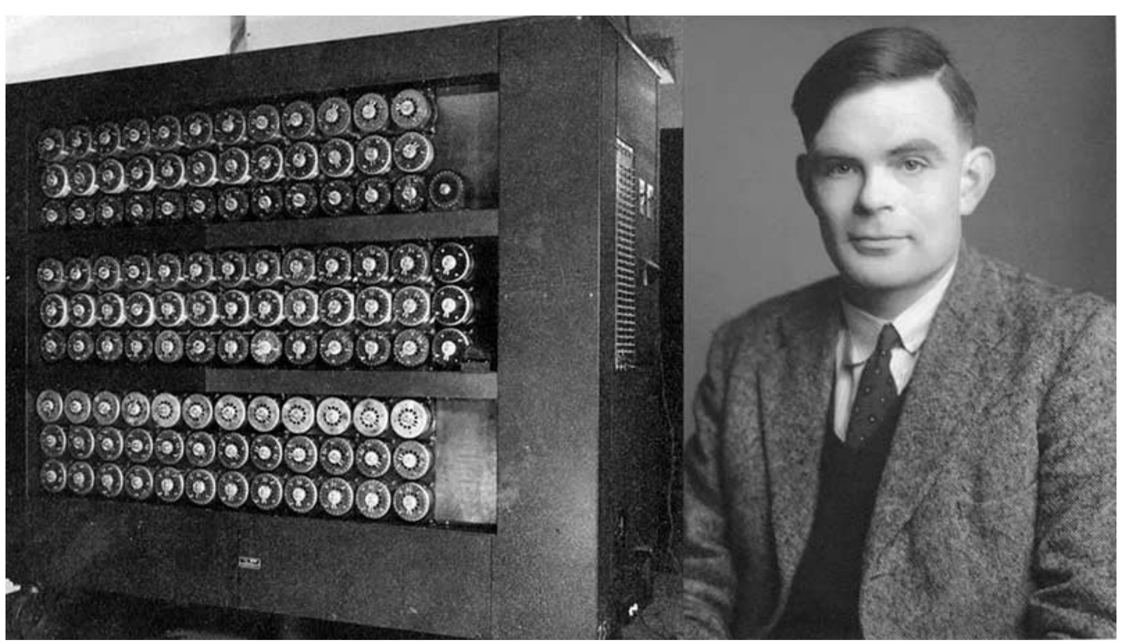
$$\text{Stabilità} \implies \left(\text{Consistenza} \iff \text{Convergenza}\right)$$

- **Stabilità:** piccole variazioni del dato generano piccole variazioni della soluzione numerica
- **Consistenza:** il problema risolto sul calcolatore è rappresentativo dell'EDP

Peter Lax (1926—)

Metodi numerici per le EDP

- Dal secondo dopoguerra, lo sviluppi dei calcolatori digitali ha permesso risolvere numericamente EDP sempre più complesse
- Lo sviluppo di metodi numerici è frutto di interazioni feconde tra matematici, ingegneri, fisici…
- Ad oggi, la risoluzione numerica di problemi fisici complessi presenta importanti problemi matematici



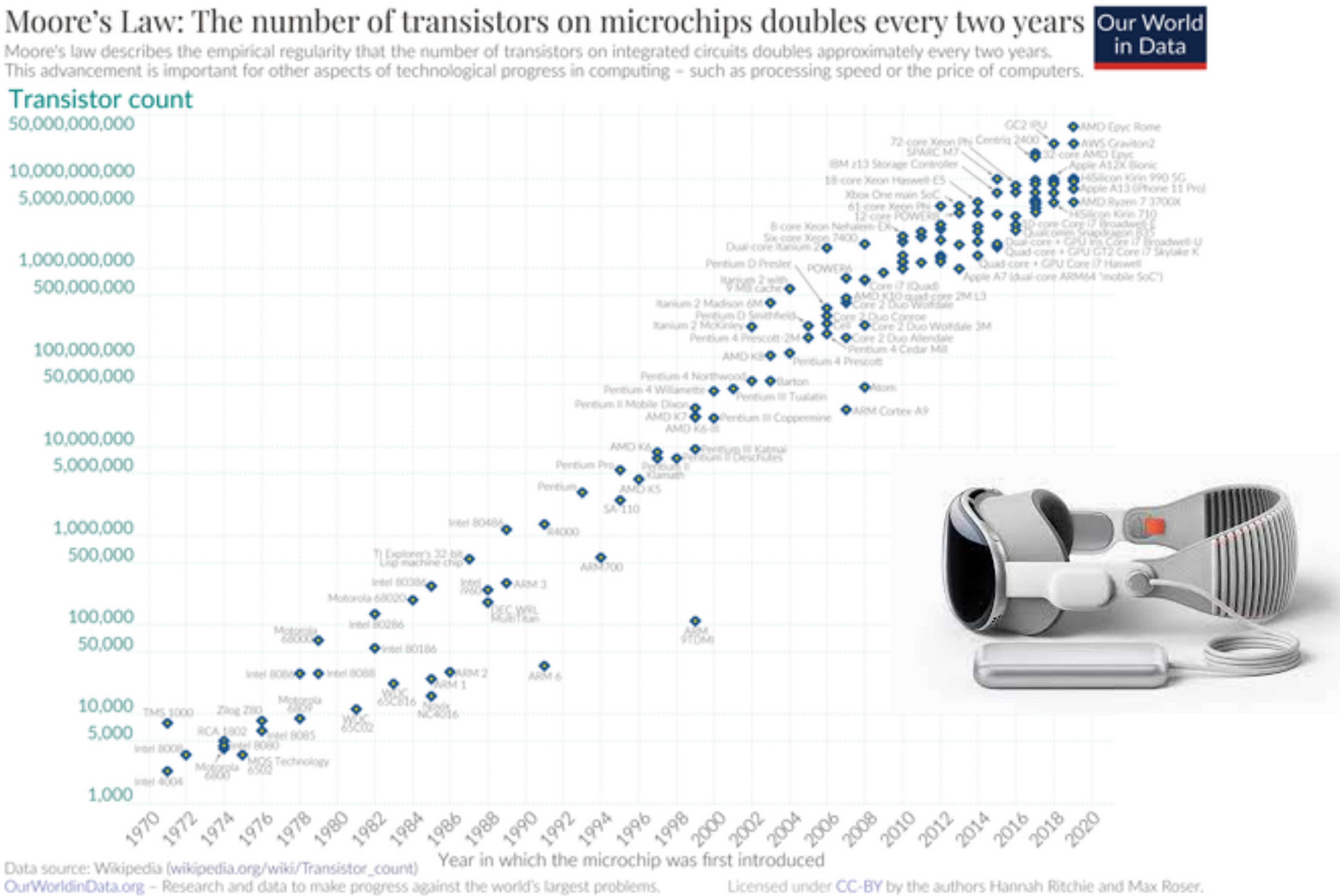
Alan Turing (1912–1954), che ha teorizzato il calcolatore moderno nel 1937

Funded by the European Union

European Research Council
Established by the European Commission

Il progetto NEMESIS ha ricevuto un finanziamento di quasi 8M€ dalla Comunità Europea per sviluppare metodi numerici per problemi fisici complessi

La legge di Moore



Metodi numerici per le EDP

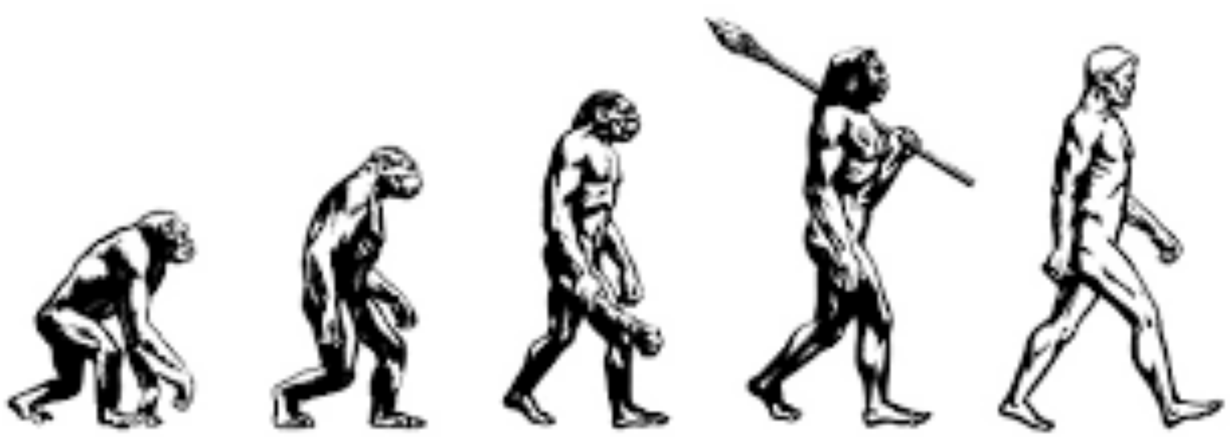
Esempi di metodi e loro origine matematica

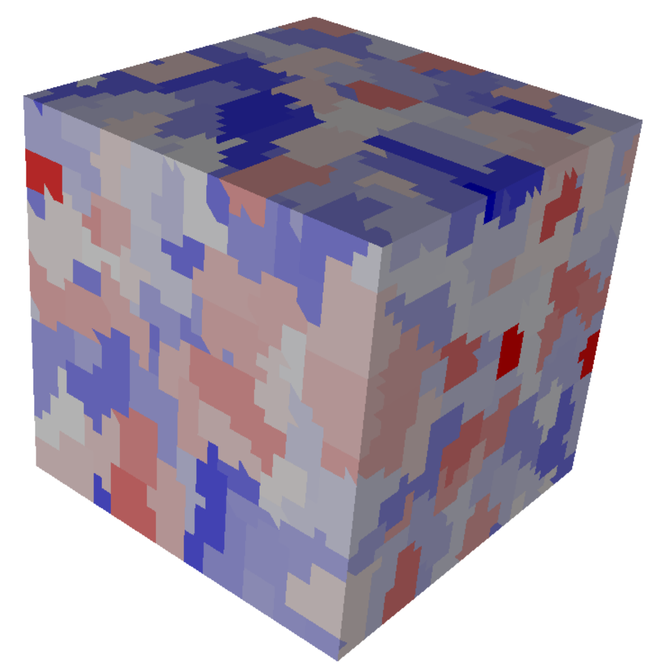
- Differenze Finite (dal Teorema di Taylor, 1715)
- Volumi Finiti (VF, dal Teorema della Divergenza, ~1800)
- Elementi Finiti (EF, dal Metodo di Galerkin, 1915)

~1960—

- POEMS: POlyhedral Element MethodS (da VF + EF)

2000—



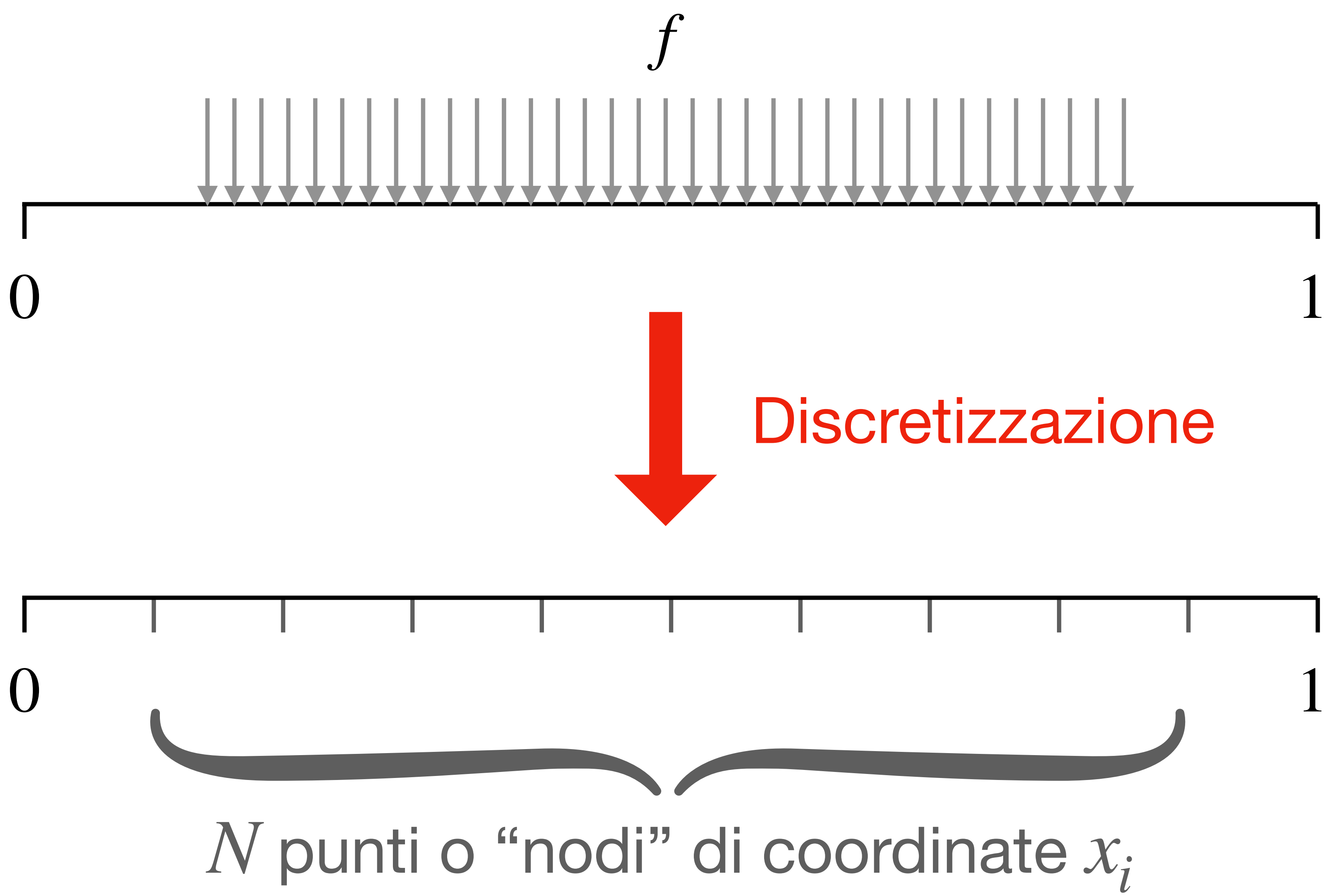


I POEMS supportano decomposizioni del dominio molto generali

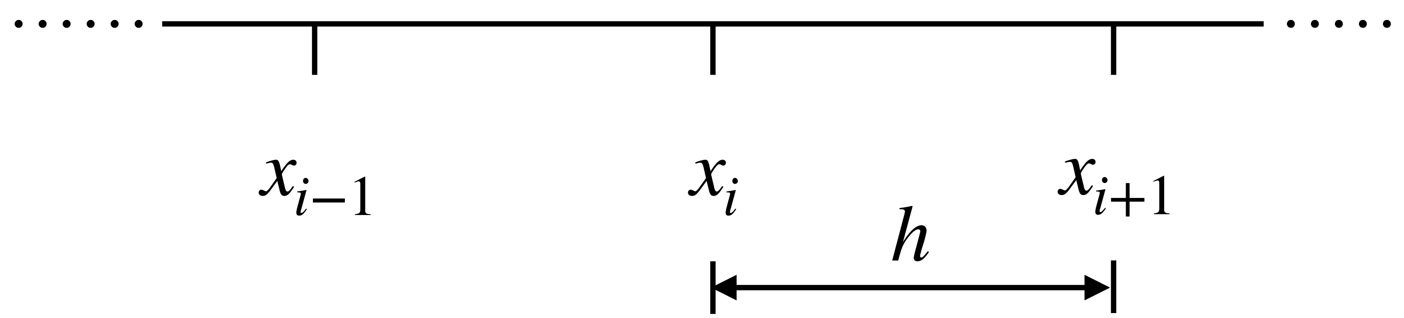
Il metodo delle differenze finite

Trovare $u : [0,1] \to \mathbb{R}$ tale che

$$\begin{cases} -u'' = f & \text{in } (0,1), \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$



Il metodo delle differenze finite



Ponendo, per brevità, $\phi_i := \phi(x_i)$ e $h := \dfrac{1}{N+1}$, abbiamo

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \phi_i' h + \phi_i'' \frac{h^2}{2} + \mathrm{o}(h^2), \qquad \phi_{i+1} = \phi_i + \phi_i' h + \phi_i'' \frac{h^2}{2} + \mathrm{o}(h^2)$$

Facendo la differenza tra le espansioni e riordinando, otteniamo una approssimazione di u'':

$$\phi_i'' = \frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{h^2} \cancel{+ \frac{\mathrm{o}(h^2)}{h^2}}$$

Il metodo delle differenze finite

Per concludere, richiediamo che l'equazione sia verificata nei punti interni e che la soluzione sia nulla in 0 e 1:

$$\begin{cases} -\dfrac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} = f(x_i) & \text{per ogni } 1 \leq i \leq N \\ u_0 = u_{N+1} = 0 \end{cases}$$

Questo è un sistema di equazioni algebriche lineari:

$$\underbrace{\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{A}_N} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{u}_N} = \underbrace{\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N) \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{b}_N}$$

Analisi numerica

Questioni tipiche

- Analisi di stabilità: Il sistema algebrico $\boldsymbol{A}_N \boldsymbol{u}_N = \boldsymbol{f}_N$ è risolubile? La sua soluzione è unica? Come dipende dal dato?
- Analisi a priori: La soluzione $\boldsymbol{u}_N$ converge verso u? Se sì, in che senso?
- Solutori: Come risolvere in modo efficace $\boldsymbol{A}_N \boldsymbol{u}_N = \boldsymbol{f}_N$ per N grande?
- Analisi a posteriori: È possibile, una volta disponibile $\boldsymbol{u}_N$, dare una stima calcolabile dell'errore rispetto a u?

Questioni tipiche

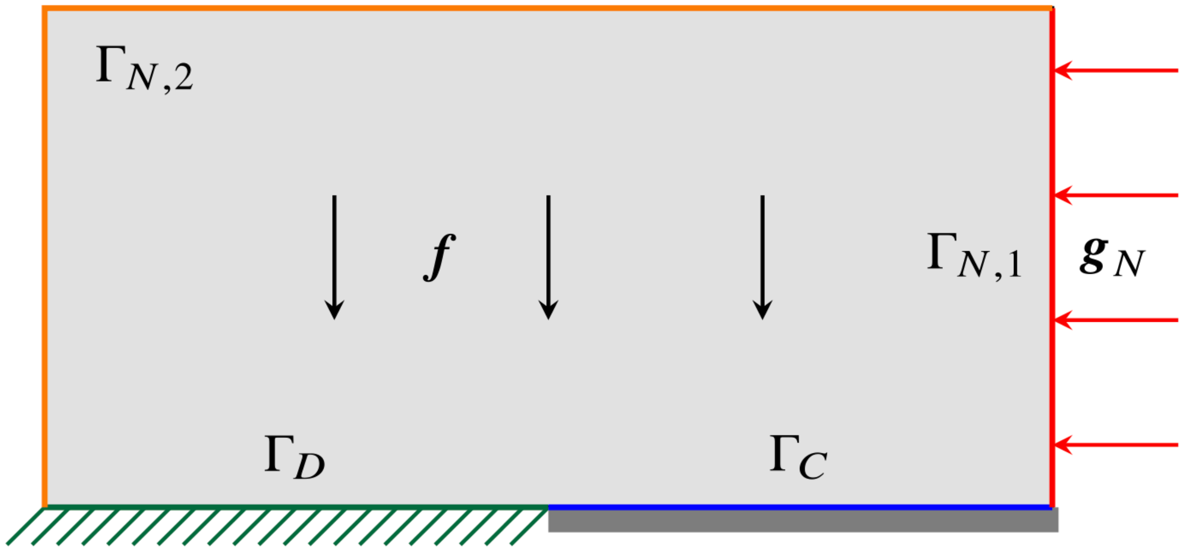
Solutori

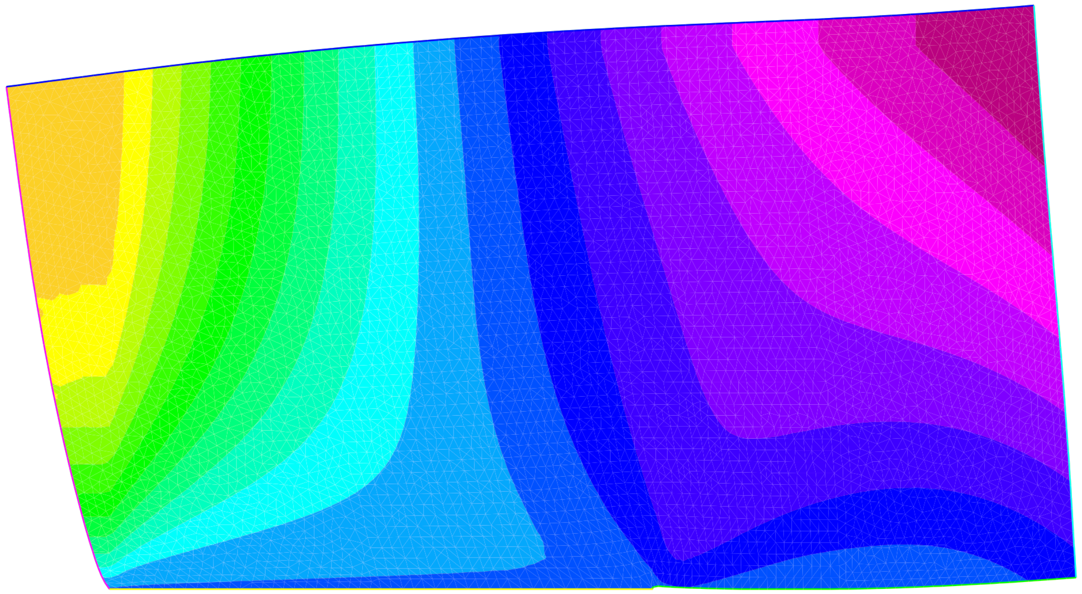
- I problemi derivanti dalla discretizzazione di PDE sono molto grandi: si hanno facilmente milioni o miliardi di incognite
- Per fortuna sono anche poco densi (matrici con molti zeri)
- Tipicamente, sono mal condizionati: nell'esempio, $\mathrm{cond}(A) \propto \frac{1}{h^2}$
- Anche su calcolatori molto potenti, sono necessari speciali solutori, spesso specifici al problema da risolvere

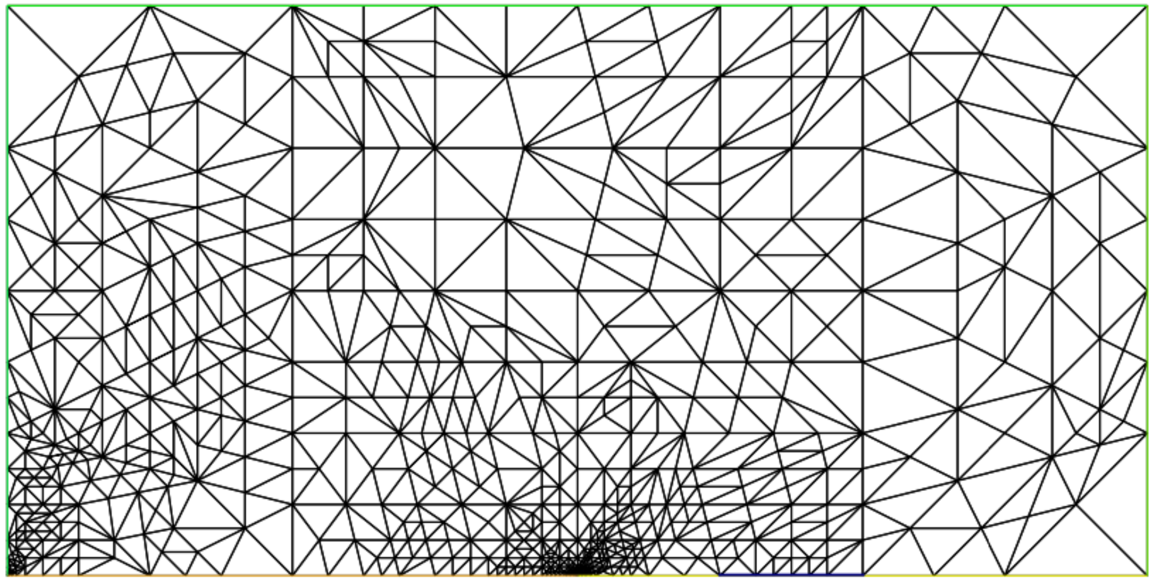
Frontier (Oak Ridge National Laboratory), il più potente supercomputer attualmente in funzione

Questioni tipiche

Analisi a posteriori e raffinamento adattativo







Simulazione tratta da [Di Pietro, Fontana, Kazymyrenko, 2022]

Approssimazione numerica di problemi fisici

Interazioni

- L’analisi di problemi fisici avanzati pone significative difficoltà matematiche
- Difficoltà legate alle non linearità richiedono elaborati strumenti di Analisi Funzionale
- Difficoltà legate alla presenza di operatori differenziali incompleti richiedono tecniche di Topologia Algebrica
- …
- **Più generalmente, l’Analisi Numerica si nutre di interazioni con l’Ingegneria, la Fisica, … e molti rami della Matematica**

Funded by the European Union

European Research Council
Established by the European Commission

Il progetto NEMESIS esplora interazioni tra l’Analisi Numerica e la Topologia Algebrica per identificare discretizzazioni stabili di sistemi fisici complessi

Grazie dell’attenzione!

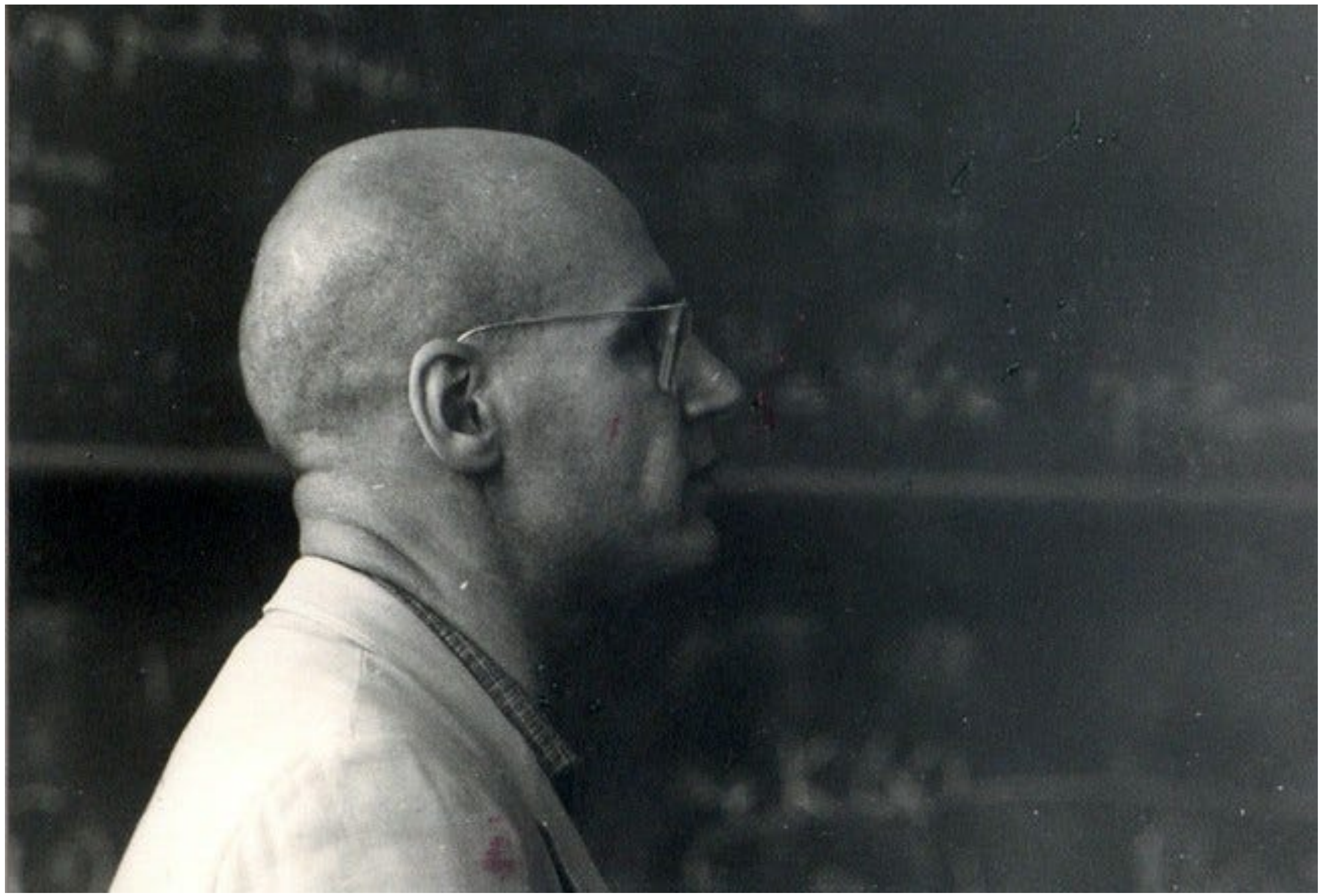
Funded by the European Union (ERC Synergy, NEMESIS, project number 101115663).

Views and opinions expressed are however those of the authors only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Research Council Executive Agency. Neither the European Union nor the granting authority can be held responsible for them.

Funded by the European Union

European Research Council
Established by the European Commission

Archivio Grothendieck di Montpellier



https://grothendieck.umontpellier.fr/