

Appunti di metodi numerici e algoritmi computazionali

Nicola Stella

www.nicolastella.it

31 gennaio 2012

Sommario

Breve dimostrazione dell'uso di L^AT_EX.

Indice

1	Fluidodinamica	1
1.1	Equazioni della Fluidodinamica	1
1.1.1	Equazioni del Moto	1
1.1.2	Similarità e numeri adimensionali	3
1.2	Turbolenza	4
1.2.1	Turbolenza	4
1.2.2	Scale Caratteristiche	6
1.2.3	RANS	7
1.2.4	Viscosità Turbolenta (eddy viscosity) e Diffusività Termica Turbolenta	8
1.2.5	Modelli Algebrici e Mixing Length	9
1.2.6	Modello di Cebeci-Smith	9
1.2.7	Modello di Baldwin-Lomax	10
1.2.8	Modelli ad una equazione: Modello di Prandtl	11
1.2.9	Modello a due equazioni k-epsilon	12
1.2.10	Modello a due equazioni k-omega	12
1.3	Bibliografia e Letture di Approfondimento	13
2	Metodi Numerici	13
2.1	Equazioni alle derivate parziali	13
2.1.1	Generalità sulle Equazioni alle derivate parziali	13
2.1.2	Classificazione delle PDE	14
2.1.3	Esempi di PDE paraboliche in fluidodinamica	16
2.1.4	Esempi di PDE ellittiche in fluidodinamica	16
2.1.5	Esempi di PDE iperboliche in fluidodinamica	17
2.1.6	Matematica e Finanza: Equazione di Black-Scholes	17
2.2	Schemi numerici di approssimazione	17
2.2.1	Differenze Finite	18
2.2.2	Differenze Finite: Schemi con stencils pesati	21

2.2.3	Metodi dei Residui pesati	23
2.3	Errori e analisi di stabilità	25
2.3.1	Accuratezza	26
2.3.2	Consistenza	26
2.3.3	Stabilità	26
2.3.4	Analisi di Stabilità di Von Neumann	27
2.4	Algoritmi di risoluzione per sistemi lineari	29
2.4.1	Algoritmo di Gauss e Fattorizzazione LU	30
2.4.2	Algoritmo di Thomas	31
2.4.3	Algoritmo di Thomas per sistemi pentadiagonali	32
2.4.4	Metodo di eliminazione a blocchi	33
2.4.5	Metodo di Gauss-Seidel	34
2.4.6	Metodo di Jacobi	35
2.4.7	Metodo SOR (Successive Over-Relaxation)	35
2.5	Metodi numerici per PDE paraboliche	36
2.5.1	Metodo Esplicito (per l'equazione di diffusione del calore)	36
2.5.2	Metodo di Crank-Nicolson	36
2.6	Metodi numerici per PDE ellittiche	37
2.7	Metodi numerici per PDE iperboliche	38
2.7.1	Metodi numerici per PDE Iperboliche Lineari	38
2.8	Alcuni codici in Fortran77 e Matlab	40
2.8.1	MATLAB community scambio file	40
2.8.2	PDE TOOLBOK	40
2.8.3	IDL ed ENVI	40
2.9	Bibliografia e letture di approfondimento	40
3	Algoritmi e Modelli Computazionali	40
3.1	Modelli Microscopici	41
3.1.1	Dinamica Molecolare	41
3.2	Modelli Mesoscopici	41
3.2.1	Dissipative Particle Dynamics	41
3.2.2	Direct Simulation Monte Carlo Method	43
3.2.3	Metodo di collisione a più particelle	43
3.3	Bibliografia e letture di approfondimento	44
4	Lattice Boltzmann Method	44
4.1	Caratteristiche del Lattice Boltzmann Method	44
4.1.1	Equazione di trasporto di Boltzmann	44
4.1.2	Caratteristiche principali del LBM	46
4.2	LBM ad una componente	48
4.3	LBM a due componenti	48
4.3.1	Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Generalità	48
4.3.2	Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Funzioni di distribuzione d'equilibrio	51
4.3.3	Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Limite continuo	52
4.4	LBM con termini di forza	52
4.4.1	Termini di Forza nell'equazione di trasporto discretizzata	53
4.5	Applicazioni principali del LBM	54
4.5.1	Esempi di Miscele Binarie Isoterme	55

4.5.2	Lattice Boltzmann Method Termico - Separazione di fase Fluido non ideale	55
4.6	Bibliografia e letture di approfondimento	55
4.6.1	Articoli, Libri ed altro	55
4.6.2	Reviews	56
5	Introduzione alla teoria del Caos e teorie frattali	56
5.1	Leggi Evolutive	57
5.2	Mappa Logistica - Introduzione	59
5.3	Alcune definizioni importanti	59
5.4	Studio della mappa logistica - Regime non caotico	60
5.5	Studio della mappa logistica - Regime caotico e mappa a tenda	61
5.6	Studio della mappa logistica - Zona di Transizione	62
6	Introduzione all'Econofisica	63
6.1	Probabilità: Introduzione	64
6.2	Probabilità Bernulliana	65
6.3	Probabilità condizionata e teorema di Bayes	66
6.4	Probabilità nel continuo	67
6.5	Distribuzioni di Probabilità	69
6.6	Processi Stocastici: Processo di Markov	71
6.7	Random Walk	74
6.8	Considerazioni sul Random Walk e moto Browniano	76
6.9	Equazione differenziale stocastica ed integrale stocastico	78
6.10	Equazione di Black-Scholes	79
7	Chi Sono	80
8	Bibliografia	81

1 Fluidodinamica

1.1 Equazioni della Fluidodinamica

1.1.1 Equazioni del Moto

Il punto di partenza per la derivazione delle equazioni dell'idrodinamica sono le leggi di conservazione: iniziamo dall'equazione di continuità che deriva dalla conservazione della massa del fluido. E' da premettere che per punto nel fluido si intende un elemento di fluido e non una sua singola molecola; infatti dal momento che la dinamica dei fluidi riguarda fenomeni macroscopici, ogni elemento infinitesimo di volume, seppur piccolo, contiene un grande numero di molecole. Consideriamo un elemento di fluido nel volume totale del fluido che si considera; la massa entrante in questo elemento nell'unità di tempo sarà pari alla massa entrante nell'elemento stesso. Formalizzando queste considerazioni e applicando alcuni teoremi di analisi vettoriale si arriva all'equazione di continuità

$$\partial_t n + \text{div}(n\mathbf{u}) = 0$$

che in coordinate cartesiane diventa

$$\partial_t n + \partial_\alpha (n u_\alpha) = 0$$

L'equazione per il campo di velocità nel caso più semplice riguardante un fluido non soggetto ad effetti dissipativi, ossia un fluido ideale, è

$$\partial_t (n u_\alpha) = -\partial_\beta T_{\alpha\beta}$$

detta equazione di Eulero, e il tensore a secondo membro è il tensore di Cauchy, di secondo rango e simmetrico, con

$$T_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} + n u_\alpha u_\beta$$

In alcuni casi non si può trascurare la viscosità e gli effetti indotti da questa, primo tra tutti il trasferimento irreversibile d'impulso tra diversi punti del fluido. In questo caso siamo in presenza di un fluido viscoso e l'equazione di Eulero va modificata prendendo in considerazione termini che rappresentano il contributo dovuto alla viscosità. Tali termini aggiuntivi sono contenuti in un altro tensore di secondo rango simmetrico $S_{\alpha\beta}$ che va sottratto al tensore $T_{\alpha\beta}$; esso è denominato tensore di stress viscoso ed ha la seguente espressione

$$S_{\alpha\beta} = \eta \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2\delta_{\alpha\beta}}{d} \partial_\gamma u_\gamma \right) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma$$

dove d rappresenta la dimensionalità del sistema, η la viscosità dinamica e ζ la viscosità di bulk. Di conseguenza nell'equazione di Eulero il tensore $T_{\alpha\beta}$ viene sostituito da

$$T_{\alpha\beta} \rightarrow T'_{\alpha\beta} = T_{\alpha\beta} - S_{\alpha\beta}$$

per cui si avrà

$$\partial_t (n u_\alpha) = -\partial_\beta T'_{\alpha\beta}$$

Dopo alcuni passaggi algebrici si arriva all'equazione di Navier-Stokes

$$\partial_t (n u_\alpha) + \partial_\alpha (n u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\alpha \left[\eta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2\delta_{\alpha\beta}}{d} \partial_\gamma u_\gamma) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right]$$

Se il fluido non è omogeneo, come capita nel caso di fluidi multifase o nel caso di miscele, è opportuno considerare il contributo dei gradienti di concentrazione. In questo caso, infatti, la pressione del sistema non sarà uniforme in tutte le zone del fluido o della miscela, per cui ci sarà una dipendenza della pressione dalla concentrazione e dai gradienti della concentrazione. Di conseguenza il termine p va rimpiazzato con in cosiddetto tensore di pressione

$$p\delta_{\alpha\beta} \rightarrow P_{\alpha\beta}$$

e l'equazione di Navier-Stokes diventa

$$\partial_t (n u_\alpha) + \partial_\alpha (n u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha P_{\alpha\beta} + \partial_\alpha \left[\eta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2\delta_{\alpha\beta}}{d} \partial_\gamma u_\gamma) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right]$$

Quando nel fluido la densità si mantiene costante in ogni porzione di volume (anche durante il loro moto) esso non è soggetto a compressioni o espansioni apprezzabili. Sotto queste condizioni il fluido si dice incomprimibile e vale la condizione $\delta_\alpha u_\alpha = 0$; di conseguenza l'equazione di Navier-Stokes si semplifica nella seguente espressione

$$\partial_t u_\alpha + u_\beta \partial_\beta u_\alpha = -\frac{1}{n} \partial_\alpha P_{\alpha\beta} + \nu \nabla^2 u_\alpha$$

dove $\nu = \frac{\eta}{n}$ è la viscosità cinematica.

A queste equazioni si aggiunge l'equazione di convezione-diffusione che descrive, per l'appunto, i meccanismi di diffusione e convezione nel fluido nel caso in cui la composizione del fluido varia in ogni punto, come avviene ad esempio nel caso di una miscela

$$\partial_t \varphi + \partial_\alpha (\varphi u_\alpha) = D \nabla^2 \mu$$

dove D è la costante di diffusione, μ il potenziale chimico, φ la concentrazione.

C'è infine l'equazione dell'energia, con la quale si tiene conto delle variazioni flusso di calore indotto da differenze di temperatura nel fluido

$$\partial_t e = -\partial_\alpha (e u_\alpha) - T'_{\alpha\beta} \partial_\alpha u_\beta - \partial_\alpha J_\alpha^q$$

dove e è la densità di energia interna totale, J^q la corrente di calore. Le grandezze termodinamiche $P_{\alpha\beta}, \mu, \varphi, e$, etc. possono essere ricavate da un'energia libera (per approfondimenti si veda il libro di S. R. De Groot and P. Mazur).

Classificazione

- Fluido incomprimibile non viscoso e flusso potenziale
- Fluido incomprimibile viscoso: laminar, turbolento
- Strato limite incomprimibile: laminare, turbolento, separazione
- Fluido comprimibile: non viscoso, viscoso
- Strato limite comprimibile
- Fluidi complessi

I Fluidi complessi sono un caso particolare di fluidi che hanno una struttura visco elastica e/o una orientazione caratterizzata dall'elicità. Casi di fluidi complessi sono i cristalli liquidi e le soluzioni polimeriche. In questi casi la struttura delle equazioni cambia: basti pensare alla concentrazione di essi che non è più rappresentata da una grandezza scalare bensì da una grandezza tensoriale.

1.1.2 Similarità e numeri adimensionali

Similarità e numeri adimensionali.

Spesso è conveniente riportare le equazioni fluidodinamiche in forma adimensionale; questo aiuta a studiare al meglio i regimi in cui si trova il sistema e ad adottare delle semplificazioni nelle equazioni, soprattutto per ridurre gli sforzi computazionali. Tale approccio tiene conto dei parametri del sistema (fluido, corpo in un fluido, etc..) raggruppandoli in gruppi adimensionali. E' noto

infatti che due fluidi sono dinamicamente simili se i numeri adimensionali che li governano hanno lo stesso valore.

Rimandando ad un testo di fluidodinamica (come il Landau) per i calcoli, si definiscono di seguito i numeri adimensionali più importanti.

Numero di Reynolds $\rightarrow Re = \frac{Ud}{\nu}$

Re rappresenta il rapporto tra le forze inerziali e quelle viscosi. in particolare si ha che

$Re \leq 2000 \rightarrow$ Regime Stazionario, flusso laminare;

$2000 \leq Re \leq 4000 \rightarrow$ Regime di transizione

$Re \geq 4000 \rightarrow$ Regime non stazionario e disordinato. Evoluzione verso un regime turbolento ($Re \geq 10000$) in cui le forze viscosi sono trascurabili

Numero di Mach $\rightarrow Ma = \frac{U}{c_s}$

E' dato dal rapporto tra velocità del fluido e la velocità del suono. Esso fornisce una misura della comprimibilità dovuta al moto. Si ha che

$Ma \leq 0.1 \rightarrow$ Regime Subsonico

$0.8 \leq Ma \leq 1.3 \rightarrow$ Regime Transonico

$Ma = 1 \rightarrow$ Regime Sonico

$Ma \geq 1 \rightarrow$ Regime Supersonico

$Ma \geq 5 \rightarrow$ Regime Ipersonico

Numero di Prandtl $\rightarrow Pr = \frac{\eta c_p}{\lambda}$

Misura l'incidenza della diffusività dovuta alla quantità di moto rispetto alla diffusività dovuta al calore.

Numero di Schmidt $\rightarrow Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\eta}{nD}$

Utilizzato nel caso in cui nel fluido vi siano fenomeni diffusivi, è dato dal rapporto tra forza viscosa e forza diffusiva. Esso misura quindi quanto incide il regime diffusivo rispetto a quello viscoso.

Numero di Froude $\rightarrow Fr = \frac{U}{(gL)^{1/2}}$

Dato dal rapporto tra forza d'inerzia e forza peso, spesso utilizzato nello studio del moto delle onde generato da imbarcazioni. Valori molto piccoli di Fr indicano che la gravità mantiene la superficie dell'acqua piatta e la resistenza al moto dovuta alle onde generate è trascurabile.

Tramite un'analisi sui valori assunti da questi numeri adimensionali si può inquadrare il particolare problema, il regime fluidodinamico e la natura del sistema, potendo così apportare delle semplificazioni alle equazioni del moto.

1.2 Turbolenza

1.2.1 Turbolenza

I fenomeni turbolenti, tra i quali quelli fluidodinamici, hanno la peculiarità di essere dei sistemi dinamici non lineari, caotici la cui natura risiede in alcuni termini delle equazioni che li governano; essi inoltre, dipendono fortemente dalle condizioni iniziali: lo stesso esperimento, quindi, può essere ripetuto più volte ottenendo situazioni finali differenti le une dalle altre. La natura di questa non linearità risiede in alcuni termini delle equazioni che governano un sistema: in fluidodinamica, infatti, il campo di velocità può assumere una dipendenza dal tensore di stress viscoso; la viscosità, inoltre può dipendere dalla temperatura del sistema la quale può variare al variare dell'energia. La natura fisica della turbolenza può essere compresa tramite uno studio che prende in considerazione differenti scale di lunghezza, tempo ed energia, come dimostra la teoria di Kolmogorov ed i suoi sviluppi.

Un'analisi in serie di Fourier mette in evidenza tre regimi fluidodinamici diversi: uno in cui prevalgono gli effetti viscosi che inibiscono trasferimenti di energia da strutture del sistema grandi a quelle più piccole (inibendo gli effetti turbolenti); in un altro prevalgono gli effetti inerziali in cui l'energia viene trasferita dalle grandi strutture del sistema a quelle più piccole generando turbolenza. C'è infine la situazione intermedia.

Lo stesso fu osservato da Reynolds in modo sperimentale, il quale introdusse un coefficiente che prese il suo nome, tramite il valore del quale caratterizzò tre regimi. Tipi di turbolenza

La turbolenza può essere:

- Isotropa, quando le grandezze sono invarianti per cambio di sistema di riferimento;
- Omogenea, quando le grandezze non variano nello spazio;
- Omogenea e isotropa, quando si verificano le precedenti;
- Libera;
- Di parete, quando si presenta in prossimità di una parete.

Da tutte le considerazioni fatte è facile dedurre che le equazioni di sistemi turbolenti possono essere risolte numericamente tramite.

Un approccio è rappresentato dalla risoluzione diretta delle equazioni di Navier-Stokes, noto in letteratura come DNS (Direct Numerical Simulation), integrazione che permetterebbe di ottenere soluzioni molto dettagliate ma che richiederebbe "costi" computazionali elevatissimi (tempi di simulazione, memoria ram, ecc..) dal momento che l'evoluzione delle grandezze fluidodinamiche dovrebbe avvenire su griglie computazionali con un elevato numero di nodi. L'uso della DNS è quindi limitato al caso di numeri di Reynolds moderati, in modo tale da dover utilizzare geometrie semplici e quindi griglie poco fitte.

Il metodo più diffuso è il cosiddetto RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes): in esso si considerano medie temporali sulle velocità, quindi i loro valori medi ai quali vanno aggiunti termini di fluttuazione. Se $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ è la velocità macroscopica del fluido, \mathbf{u}' il termine di fluttuazione, U la sua media, si pone

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = U + \mathbf{u}'$$

;

sostituendo questa espressione nelle equazioni di Navier-Stokes e mediando, si ottiene un'equazione che differisce nella forma da quella originale per un termine aggiuntivo che rappresenta gli effetti della turbolenza. Lo stesso vale per l'equazione dell'energia. Senza entrare nei dettagli, i termini turbolenti che escono fuori sono la viscosità turbolenta e la diffusività termica turbolenta, che sono alla base della non chiusura delle equazioni del moto.

Un altro approccio standard è rappresentato dal LES (Large Eddy Simulation), che risolve le equazioni del moto nelle scale di lunghezza e tempo dei grandi vortici, mentre per le scale più piccole vengono utilizzati modelli basati sulla viscosità turbolenta. In aggiunta vengono utilizzate procedure di filtro per separare grandi e piccole scale.

Esiste un approccio ibrido, che integra sia il LES che il RANS: esso è il DES (Detached Eddy Simulation), in cui viene utilizzata una procedura RANS per flussi vicino alle pareti e una procedura LES lontano dalle pareti.

Modelli

I principali modelli di turbolenza sono classificabili come segue:

Modelli Algebrici	Modelli una equaz.	Modelli due equaz.	Altri Modelli
Baldwin-Lomax	Prandtl	Modello $\kappa - \varepsilon$	Modello $\overline{u^2} - f$
Johnson-King	Baldwin-Barth	Modello $\kappa - \omega$	Modello $\zeta - f$
Cebeci-Smith	Spalart-Allmaras		

Come si vedrà nei prossimi articoli, l'approccio RANS fa emergere nuove nuove incognite e con la conseguenza del problema della chiusura: ci si ritrova infatti con un numero di incognite superiore al numero di equazioni del sistema in esame.

La soluzione di tale sistema viene effettuata facendo alcune assunzioni. Nei modelli algebrici le assunzioni che vengono fatte non comportano ulteriori equazioni da risolvere, motivo per cui tali modelli sono anche detti a zero equazioni. I modelli ad una equazione invece prevedono una nuova equazione aggiuntiva da risolvere mentre i problemi a due equazioni ne prevedono per l'appunto due aggiuntive.

1.2.2 Scale Caratteristiche

Come già accennato, una grandezza che evolve in modo turbolento si può studiare scomponendola in un termine che identifica la sua media temporale ed una componente che rappresenta le fluttuazioni dovute per l'appunto alla turbolenza; ad esempio nel caso della velocità di un fluido

$$u(x, t) = U + u'$$

dove U rappresenta la media temporale calcolata come segue

$$U = \frac{1}{\Delta t} \int_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} u dt$$

dove Δt rappresenta un periodo temporale su cui viene effettuata la media; la media temporale sul periodo Δt della fluttuazione u' è nulla, mentre non lo è la

sua media quadratica

$$\overline{u'^2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{-\Delta t/2}^{+\Delta t/2} (u - U) dt$$

Se consideriamo il caso generale in tre dimensioni possiamo caratterizzare la turbolenza tramite il coefficiente di correlazione

$$C_{ij} = \overline{u_i u_j}$$

dove i, j rappresentano le componenti spaziali x, y, z . Un valore non nullo del coefficiente di correlazione indica quindi che le velocità lungo le diverse componenti sono correlate. Nella turbolenza, infatti, sono presenti strutture caratterizzate da variabili correlate, ossia dei vortici, noti in letteratura scientifica con il termine inglese eddies. Secondo l'idea di Kolmogorov tali vortici possono trasferire energia cinetica a vortici più piccoli e così via in un processo a catena finché non viene raggiunta una scala in cui viene dissipata in calore: questa è la scala dei piccoli vortici per la quale si possono identificare

$$\text{Viscosità cinematica} \longrightarrow \nu = \frac{\eta}{n}$$

$$\text{Energia cinetica dissipata per unità di tempo} \longrightarrow \epsilon = -\frac{dk}{dt}$$

da cui si ricavano le scale caratteristiche per i piccoli vortici alle quali avviene dissipazione

$$\tau \sim \sqrt{\frac{\nu}{\epsilon}} \longrightarrow \text{scala di tempo caratteristica,}$$

$$\ell \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \longrightarrow \text{scala di lunghezze caratteristica}$$

$$u_\tau \sim (\nu\epsilon)^{1/4} \longrightarrow \text{scala di velocità caratteristica.}$$

1.2.3 RANS

Vediamo ora le equazioni di Navier-Stokes alle medie di Reynolds, identificate con l'acronimo RANS (dall'inglese Reynolds Averaged Navier-Stokes equations). Bisogna considerare le equazioni di Navier-Stokes sostituendo alle velocità u la decomposizione $\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}'$ e alla pressione p la decomposizione $p = P + p'$; quindi sostituiranno le precedenti decomposizioni nella seguente

$$n \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + n \nabla (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{n} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u}$$

ottenendo

$$n \frac{\partial (\mathbf{U} + \mathbf{u}')}{\partial t} + n \nabla [(\mathbf{U} + \mathbf{u}') (\mathbf{U} + \mathbf{u}')] = -\frac{1}{n} \nabla (P + p') + \nu \nabla^2 (\mathbf{U} + \mathbf{u}').$$

Sviluppiamo singolarmente i termini dell'equazione ottenuta:

$$n \frac{\partial (\mathbf{U} + \mathbf{u}')}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{u}'}{\partial t} \longrightarrow \text{lineare}$$

$$\nabla (P + p') = \nabla P + \nabla p' \longrightarrow \text{lineare}$$

$$\nabla^2 (\mathbf{U} + \mathbf{u}') = \nabla^2 \mathbf{U} + \nabla^2 \mathbf{u}' \longrightarrow \text{lineare}$$

$$\nabla [(\mathbf{U} + \mathbf{u}') (\mathbf{U} + \mathbf{u}')] = \nabla (\mathbf{U}\mathbf{U}) + \nabla (\mathbf{U}\mathbf{u}') + \nabla (\mathbf{u}'\mathbf{U}) + \nabla (\mathbf{u}'\mathbf{u}') \neq \nabla (\mathbf{U}\mathbf{U}) + \nabla (\mathbf{u}'\mathbf{u}') \longrightarrow \text{non lineare.}$$

Se effettuiamo le medie dei termini appena sviluppati, ricordando che la media di \mathbf{U} è ancora \mathbf{U} e lo stesso vale per P , la media di \mathbf{u}' è nulla, così come per p' , che la media di $\mathbf{U}\mathbf{u}'$ è nulla, e che, come esposto nell'articolo riguardo le caratteristiche della turbolenza

$$\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} \neq 0$$

o in componenti

$$\overline{u'_i u'_j} \neq 0$$

si ottiene l'equazione per il campo di velocità (Navier-Stokes) mediata

$$n \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + n \nabla (\mathbf{U}\mathbf{U}) + \nabla (\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) = -\frac{1}{n} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{U}$$

Se non fosse per il termine fluttuante

$$\nabla (\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'})$$

l'equazione per u sarebbe la stessa per U . L'equazione di continuità invece non viene alterata dal procedimento delle medie di Reynolds. L'equazione dell'energia invece viene alterata, presentando in aggiunta un termine fluttuante

$$\nabla (\overline{e'\mathbf{u}'})$$

1.2.4 Viscosità Turbolenta (eddy viscosity) e Diffusività Termica Turbolenta

Da quanto visto nella discussione sulle RANS nelle equazioni della fluidodinamica escono fuori dei nuovi termini, in particolare

$$\nabla (\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}) \longrightarrow$$

nell'equazione del campo delle velocità

$$\nabla (\overline{e'\mathbf{u}'}) \longrightarrow$$

nell'equazione dell'energia.

Il termine fluttuante dell'equazione di Navier-Stokes si può pensare come un termine aggiuntivo per il tensore di stress viscoso S_{ij} ; quest'ultimo in assenza di turbolenza ha la classica forma (per un fluido incomprimibile)

$$S_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

mentre in presenza di effetti turbolenti

$$S_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \overline{u'_i u'_j}$$

Di qui si definisce la grandezza introdotta da Boussinesq chiamata viscosità turbolenta, meglio nota col termine *eddy viscosity*

$$\varepsilon_m = - \frac{\overline{u'_i u'_j}}{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}}$$

Allo stesso modo per l'equazione dell'energia si può definire la diffusività termica turbolenta ε_h .

L'aggiunta di questi nuovi termini nelle equazioni della fluidodinamica accresce il problema della chiusura per esse, ossia quel problema che sorge quando il numero di equazioni di un sistema è inferiore al numero delle incognite. E' ovvio che in questi casi bisogna fare delle assunzioni; in particolare nella fluidodinamica ci sono dei modelli opportuni per trattare i flussi turbolenti. I principali modelli possono essere classificati essenzialmente in

- Modelli algebrici o a zero equazioni;
- Modelli ad una equazione;
- Modelli a due equazioni.

Nei modelli algebrici le assunzioni che vengono fatte non comportano ulteriori equazioni da risolvere, motivo per cui tali modelli sono anche detti a zero equazioni. I modelli ad una equazione invece prevedono una nuova equazione aggiuntiva da risolvere mentre i problemi a due equazioni ne prevedono per l'appunto due aggiuntive.

1.2.5 Modelli Algebrici e Mixing Length

I modelli algebrici o a zero equazioni hanno un campo di applicabilità abbastanza limitato; essi sono applicabili a problemi dello strato limite (boundary layer). In questo caso viene risolta l'equazione di continuità e del campo di velocità assumendo che

$$-\overline{u'_x u'_y} = \varepsilon_m \frac{\partial u_x}{\partial y}$$

possa essere scritta in termini di lunghezza di mescolamento ℓ definita da

$$-\overline{u'_x u'_y} = \ell^2 \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} \right)^2$$

in una forma algebrica chiusa. Ad esempio secondo l'ipotesi di Prandtl $\ell = ky$ che sostituita all'equazione differenziale, dopo averla risolta ci dà un'equazione algebrica dipendente da y . k è la costante di Kàrmàn e vale $k = 0.4$

1.2.6 Modello di Cebeci-Smith

Solitamente nello strato limite si distinguono tre zone: una interna, una esterna e una di contatto in cui le soluzioni delle equazioni dei due casi precedenti si sovrappongono.

Nel modello di Cebeci-Smith si distinguono solo la regione interna e quella esterna dello strato limite liscio

$$\begin{cases} 0 \leq y \leq y_c & \text{regione interna} \\ y_c \leq y \leq \delta & \text{regione esterna} \end{cases}$$

dove δ denota lo spessore dello strato limite.

Regione interna: $0 \leq y \leq y_c$

La viscosità turbolenta è rappresentata dalla relazione

$$\varepsilon_m = n l^2 \sqrt{\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2}$$

con

$$\ell = ky \left(1 - e^{-\frac{y^+}{A^+}}\right)$$

$$A^+ = 26 \sqrt{1 + y \frac{dp/dx}{\nu u_\tau^2}}$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}$$

Regione esterna: $y_c \leq y \leq \delta$

La viscosità turbolenta è

$$\varepsilon_m^{out} = n \alpha u_e \delta_u^* F_k(y, \delta)$$

dove u_e è la velocità longitudinale esterna;

$\alpha = 0.0168$

$\delta_u^* = \int_0^\delta \left(1 - \frac{u_x}{u_e}\right)$ è la velocità dello spessore dello strato limite

$F_k(y, \delta) = \left[1 + 5.5 \left(\frac{y}{\delta}\right)^6\right]^{-1}$ è la funzione d'intermittenza di Klebanoff.

Il modello di Cebeci-Smith trova applicazione nei problemi in cui si possono considerare casi pratici di flussi ad alta velocità, come nelle applicazioni aerospaziali.

1.2.7 Modello di Baldwin-Lomax

Anche il modello di Baldwin-Lomax è applicabile a problemi di strato limite ma a differenza del modello di Cebeci-Smith, non è applicabile in casi di valori di curvatura significativi. Esso trova applicazione nei problemi in cui si possono considerare casi pratici di flussi ad alta velocità, come nelle applicazioni aerospaziali.

Anche in questo modello distinguiamo

$$\begin{cases} 0 \leq y \leq y_c & \text{regione interna} \\ y_c \leq y \leq \delta & \text{regione esterna} \end{cases}$$

dove δ denota lo spessore dello strato limite.

Regione interna: $0 \leq y \leq y_c$

La viscosità turbolenta è come nel modello di Cebeci-Smith

$$\varepsilon_m^{in} = n l^2 \sqrt{\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2}$$

con

$$\ell = k y \left(1 - e^{-\frac{y^+}{A^+}}\right)$$

$$A^+ = 26 \sqrt{1 + y \frac{dp/dx}{\rho u_\tau^2}}$$

$$y^+ = \frac{u_\tau y}{\nu}$$

Regione esterna: $y_c \leq y \leq \delta$

La viscosità turbolenta è

$$\varepsilon_m^{out} = n \alpha C_1 u_{diff}^2 C_2 \frac{y_{max}}{F_{max}} F_k$$

dove F_{max} e y_{max} sono i massimi della funzione

$$F(y) = \sqrt{\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)^2} \left(1 - e^{-\frac{y^+}{A^+}}\right)$$

$u_{diff} = u_{max} - u_{min}$ è la differenza tra il valore massimo e minimo della velocità sul profilo;

$$F_k = \left[1 + 5,5 \left(\frac{y C_3}{y_{max}}\right)\right]$$

Solitamente $u_{min} = 0$ per lo strato limite.

Per il modello di Baldwin-Lomax

$$A^+ = 26$$

$$\alpha = 0.0168$$

$$C_1 = 1.6$$

$$k =$$

$$C_3 = 0,3$$

$$C_2 = 0,25$$

1.2.8 Modelli ad una equazione: Modello di Prandtl

I modelli ad una equazione sono poco usati anche perchè ci sono i modelli a due equazioni che risultano molto più efficienti.

Mostriamo solamente uno dei tre modelli, quello proposto da Prandtl, il quale, posto come velocità caratteristica

$$u_\tau = \sqrt{k} \text{ per cui } \varepsilon_m = \ell \sqrt{k}$$

propose l'aggiunta dell'equazione per l'energia cinetica turbolenta

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{u_\tau}{\sigma} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$

dove il tasso di dissipazione dell'energia turbolenta (dissipazione per unità di tempo) è, secondo Prandtl,

$$\epsilon = C \frac{k^{3/2}}{\ell}$$

$$C = 0.07 - 0.09$$

$$\sigma = 1$$

i, j sono gli indici spaziali.

1.2.9 Modello a due equazioni k-epsilon

Il modello $k - \epsilon$ ha una sua formulazione standard e le sue varianti. Nel caso standard si considerano due equazioni di trasporto turbolento invece che una: una per l'energia cinetica turbolenta

$$k$$

ed una per la variazione di energia cinetica turbolenta nell'unità di tempo ϵ . Ponendo

$$\varepsilon_m = C \frac{k^2}{\epsilon}$$

le equazioni sudette si scrivono come segue

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\varepsilon_m}{\sigma} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \epsilon$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} = C_1 S_{ij} \frac{\epsilon}{k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\varepsilon_m}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right]$$

con

$$C_1 = 1.44$$

$$C_2 = 1.92$$

$$\sigma = 1$$

$$\sigma_\epsilon = 1.3$$

1.2.10 Modello a due equazioni k-omega

Il modello $k - \omega$ considera due equazioni aggiuntive, una per k e l'altra per la vorticità. In particolare la vorticità è rappresentata da ω ; in particolare essa rappresenta nel modello standard il rapporto tra ϵ e l'energia cinetica turbolenta. Il modello presenta delle varianti, sviluppate nel tempo; sarà qui esposto il modello standard.

Nelle equazioni sono presenti un termine dissipativo, uno di diffusione ed uno di produzione

$$\frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \varepsilon_m \sigma_k) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_k k \omega$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + u_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \varepsilon_m \sigma_\omega) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + S_{ij} \alpha \frac{\omega}{k} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta_\omega \omega^2$$

con

$$\alpha = \frac{13}{25}$$

$$\beta_k = \frac{9}{100}$$

$$\beta_\omega = \frac{3}{40}$$

$$\sigma_k = \frac{1}{2}$$

$$\sigma_\omega = \frac{1}{2}$$

$$\varepsilon_m = \frac{k}{\omega}$$

1.3 Bibliografia e Letture di Approfondimento

2 Metodi Numerici

2.1 Equazioni alle derivate parziali

2.1.1 Generalità sulle Equazioni alle derivate parziali

Una generica PDE può essere scritta nella seguente forma

$$A f_{xx} + B f_{xy} + C f_{yy} + D f_x + E f_y + F f = G$$

dove $f(x, y, z, t)$ è una generica funzione, soluzione della PDE ed i pedici indicano la variabile rispetto a cui f è derivata. Una PDE è caratterizzata come segue:

PDE Lineare	Derivate parziali in forma lineare e coefficienti non dipendenti da f
PDE non Lineare	I coeff. dipendono da f e/o le derivate parziali appaiono in forma non lineare
PDE Omogenea	Equaz. del tipo $\nabla^2 f = 0$ (eq. di Laplace)
PDE non Omogenea	Equaz. del tipo $\nabla^2 f = F(x, y, z)$ (eq. di Poisson)
PDE quasi lineare 2° ordine non omogenea	$Af_{xx} + Bf_{xy} + Cf_{yy} + Df_x + Ef_y + Ff = G$ A,B,C possono dipendere da x,y, f_x, f_y D,E,F possono dipendere da x,y,f G può dipendere da x,y
PDE quasi lineare 1° ordine non omogenea	$af_t + bf_x = c$ a,b,c possono dipendere da x,t,f
Sistema PDE quasi lineare 1° ordine non omogenee	$af_t + bf_x + cg_t + dg_x = e$ $Af_t + Bf_x + Cg_t + Dg_x = E$ A,B,C,D,E,a,b,c,d,e possono dipendere da x,y,f,g

2.1.2 Classificazione delle PDE

Una PDE può essere classificata in base alle sue caratteristiche. Una caratteristica è una ipersuperficie n-1 dimensionale lungo la quale si propaga l'informazione di una PDE (anche le discontinuità si propagano lungo di essa). Una caratteristica può essere reale o complessa. Nell'ultimo caso le informazioni si propagano in ogni punto del dominio e quindi si influenzano le une con le altre (questo è il caso dei problemi di equilibrio).

PDE quasi lineare 2° ordine non omogenea

Differenziando f_x ed f_y

$$df_x = f_{xx}dx + f_{xy}dy$$

$$df_y = f_{yx}dx + f_{yy}dy$$

si ottiene un sistema in forma matriciale

$$\begin{pmatrix} A & B & C \\ dx & dy & 0 \\ 0 & dx & dy \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{xx} \\ f_{xy} \\ f_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -Df_x - Ef_y - F + G \\ df_x \\ df_y \end{pmatrix}.$$

Ponendo pari a zero il determinante si ottiene una equazione differenziale per la caratteristica

$$\frac{dx}{dy} = \frac{B \pm \Delta}{2A}$$

per cui

$\Delta > 0 \rightarrow 2$ caratteristiche reali \Rightarrow PDE Iperbolica

$\Delta = 0 \rightarrow 2$ caratteristiche reali coincidenti \Rightarrow PDE Parabolica

$\Delta < 0 \rightarrow$ nessuna caratteristica reale \Rightarrow PDE Ellittica

Sistema PDE quasi lineare 1° ordine non omogenee \rightarrow Con ragionamenti del tutto analoghi al casoprecedente si arriva alle stesse conclusioni

PDE quasi lineare 1° ordine non omogenea \rightarrow Una singola PDE del primo ordine è sempre Parabolica.

Molta attenzione bisogna porre a particolari PDE come ad esempio l'equazione di convezione diffusione: essa è un'equazione ellittica in quanto non ha caratteristiche reali; tuttavia presenta termini del primo ordine che hanno caratteristiche reali che danno il loro contributo.

Le PDE descrivono sistemi con diversi tipi di evoluzione. In particolare:

PDE Ellittica: descrive problemi di equilibrio. Non essendoci caratteristiche reali ogni punto del dominio è interessato all'evoluzione verso una condizione di equilibrio.

PDE Paraboliche e Iperboliche: descrivono problemi di propagazione. Una grandezza si propaga lungo cammini in un dominio limitato o illimitato in uno o due versi di propagazione.

Solitamente le leggi che regolano determinati sistemi sono accompagnate da contizioni sugli istanti iniziali e sui contorni del dominio in cui avviene l'evoluzione in modo tale che la soluzione sia unica per il problema specifico che su vuol studiare. Per i problemi stazionari (non dipendenti dal tempo) le condizioni al contorno possono essere di tre tipi:

- Condizione di Dirichlet: si specifica il valore della soluzione f lungo il contorno del dominio di evoluzione;
- Condizione di Neumann: si specifica unil valore della derivata di f perpendicolare ad ogni punto del contorno $\partial_n f$, con n vettore normale al contorno;
- Condizione mista: si specificano entrambe le condizioni precedenti $a f + \partial_n f$

Per problemi stazionari, oltre alle condizioni al contorno appena scritte, vanno specificate in aggiunta le condizioni iniziali:

- Per PDE al primo ordine: $f(x, y, z, 0) = F(x, y, z)$
- Per PDE al secondo ordine: $f(x, y, z, 0) = F(x, y, z)$ e una condizione sul primo ordine $\partial_t f = G(x, y, z)$

Nello specificare le condizioni iniziali e al contorno per i diversi tipi di PDE bisogna sempre essere certi che il problema sia ben posto; un problema è ben posto se (Hadamard, 1923)

1. Esiste la soluzione;
2. La soluzione è unica;
3. La soluzione dipende con continuità dai valori iniziali e al contorno.

2.1.3 Esempi di PDE paraboliche in fluidodinamica

Vediamo alcuni esempi di PDE paraboliche in fluidodinamica.

Dall'equazione dell'energia, considerando trascurabile il campo di velocità (flusso stazionario o con piccole velocità) e considerando costanti il calore specifico e la conducibilità termica, si ottiene l'equazione di diffusione del calore

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2};$$

essa è non stazionaria in quanto è presente una derivata temporale di T per cui si considera T variabile nel tempo.

Nel caso in cui il campo di velocità non può essere trascurato nella precedente compare un altro termine, il termine convettivo, ragion per cui l'equazione è detta equazione di convezione-diffusione del calore

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2};$$

che è sempre una PDE Parabolica. Un altro esempio di PDE parabolica è l'equazione di Burger

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

che è non lineare. Questa equazione fu introdotta da Burger per riprodurre in modo semplificato il campo di velocità di un fluido senza trascurarne gli effetti essenziali come la non stazionarietà, la convettività e gli effetti viscosi e ovviamente la non linearità. Vengono trascurati invece i contributi del gradiente di pressione.

2.1.4 Esempi di PDE ellittiche in fluidodinamica

Un'equazione ellittica è rappresentata dall'equazione di Laplace per una certa variabile. Esempi di equazioni ellittiche in fluidodinamica sono l'equazione del calore stazionaria

$$\nabla^2 T = 0$$

oppure l'equazione del potenziale (per un flusso non viscoso)

$$\nabla^2 \phi = 0$$

utilizzata nella forma bidimensionale

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0$$

utile per tracciare le linee di corrente per i flussi.

2.1.5 Esempi di PDE iperboliche in fluidodinamica

Esempi di PDE iperboliche in fluidodinamica sono l'equazione di convezione lineare per la densità del fluido

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$$

e l'equazione di Burger privata del termine viscoso

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

che conserva ancora il carattere non lineare.

2.1.6 Matematica e Finanza: Equazione di Black-Scholes

Un esempio di equazione alle derivate parziali che descrive l'evoluzione di un sistema non fluidodinamico, o più in generale fisico, è l'equazione di Black-Scholes. Si tratta di una PDE parabolica che può essere implementata numericamente tramite un algoritmo computazionale Monte Carlo o con una classica implementazione alle differenze finite. La sua forma è simile all'equazione di convezione diffusione. E' interessante analizzarla in quanto essa contiene una grandezza che evolve come un moto Browniano, in genere descritto per il moto di una sospensione in un fluido.

$$\frac{\partial O}{\partial t} + rS \frac{\partial O}{\partial S} + \frac{\sigma^2}{2} S^2 \frac{\partial^2 O}{\partial S^2} = rO$$

dove $S(t)$ è un moto Browniano e rappresenta il valore del prezzo di un'azione, $O(S(t), t)$ è il valore di un'opzione in cui valore dipende dal valore dell'azione, r è il tasso valutato in un mercato senza rischio in un breve intervallo di tempo. Pf rappresenta il valore di un portfolio di copertura la cui presenza garantisce l'assenza di termini aleatori (rappresentati da un processo di Wiener).

2.2 Schemi numerici di approssimazione

La risoluzione delle PDE richiede una discretizzazione per gli operatori differenziali. Il punto di partenza è considerare il dominio di evoluzione come una griglia caratterizzata da nodi su cui calcolare il valore (discreto) delle grandezze d'interesse. I metodi di discretizzazione più popolari sono essenzialmente tre: metodo alle differenze finite, metodo ai volumi finiti, metodo agli elementi finiti. Il metodo alle differenze finite consiste nel calcolare, per ogni step temporale (anch'esso discreto) il valore di una funzione su ogni nodo del reticolo (i particolari di questo schema numerico sono esposti nel mio lavoro di tesi). Esso è indicato per risolvere le equazioni in forma locale (differenziale).

Il metodo ai volumi finiti valuta il valore di una funzione in una cella di volume che è parte del dominio totale; ogni cella è individuata da un nodo. Tale metodo è indicato per risolvere le equazioni in forma integrale e assicura la conservazione delle grandezze in esame.

Il metodo agli elementi finiti, in particolare il metodo di Galerkin, consiste nell'approssimare la soluzione delle PDE tramite delle funzioni interpolanti lineari o bilineari. Tale metodo è un caso particolare dei metodi dei residui pesati

(weighted residual methods) di cui fa parte anche il metodo spettrale: la differenziazione i due è che nel primo le funzioni interpolanti sono polinomi mentre nel secondo sono funzioni ortogonali come le serie di Fourier o i polinomi di Legendre.

2.2.1 Differenze Finite

Il Metodo alle Differenze Finite (FDM) è un metodo matematico che permette di approssimare nel discreto le derivate e gli operatori differenziali presenti nelle equazioni differenziali ed è particolarmente utile nello studio numerico delle equazioni differenziali alle derivate parziali. Tale metodo ci permette di discretizzare le derivate di una funzione su svariate griglie regolari e non, costituenti lo spazio discretizzato. Nel nostro caso la discretizzazione viene effettuata su uno spazio uniformemente discretizzato e con contorni definiti, come ad esempio un reticolo con $n \times n$ nodi, attraverso differenze dei valori assunti dalla funzione stessa nei vari punti dello spazio su cui è definita. Per tale approssimazione si può definire un'accuratezza, ossia l'errore dovuto alla discretizzazione delle derivate.

Derivata in avanti, all'indietro e centrata

Iniziamo con le definizioni più semplici: consideriamo lo spazio limitato e discretizzato rappresentato da un reticolo con nove nodi, ossia una geometria D_2Q_9 , ed ivi definita una funzione φ preferibilmente liscia; più precisamente nella letteratura scientifica è detta smooth function, ossia una funzione differenziabile infinite volte (quindi continua) nel suo dominio. In questa geometria spaziale vale $\Delta x = \Delta y \equiv h$ quantità che sarà usata anche nella stima dell'errore ai vari ordini. Osservando la figura seguente

Inserire Fig

Si nota come abbiamo varie possibilità di derivazione scegliendo le diverse direzioni. Definiamo derivata in avanti (o forward) della funzione $\varphi(x, y)$ rispetto ad x la derivata approssimata come segue

$$\bar{\partial}_{x(+)}\varphi(x, y) = \frac{\varphi(x+h, y) - \varphi(x, y)}{h}$$

dove come sempre $\partial_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ e la barra sopra il simbolo di derivata sta ad indicare che si tratta di una derivata approssimata con uno schema alle differenze finite; il simbolo (+) indica che la derivata è approssimata con uno schema forward. Allo stesso modo definiamo derivata all'indietro (o backward) di $\varphi(x, y)$ rispetto ad x , la derivata approssimata con il seguente schema

$$\bar{\partial}_{x(-)}\varphi(x, y) = \frac{\varphi(x, y) - \varphi(x-h, y)}{h}$$

Da queste due definizioni possiamo definire la derivata centrata che non è altro che una media tra le precedenti appena viste

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = \frac{\varphi(x+h, y) - \varphi(x-h, y)}{2h}$$

infatti

$$\frac{\bar{\partial}_{x(+)}\varphi(x, y) + \bar{\partial}_{x(-)}\varphi(x, y)}{2} = \frac{\varphi(x+h, y) - \varphi(x, y) + \varphi(x, y) - \varphi(x-h, y)}{2h}$$

Allo stesso modo si possono definire le derivate forward, backward, centrata rispetto ad y

$$\begin{aligned}\bar{\partial}_{y(+)}\varphi(x, y) &= \frac{\varphi(x, y+h) - \varphi(x, y)}{h} \\ \bar{\partial}_{y(-)}\varphi(x, y) &= \frac{\varphi(x, y) - \varphi(x, y-h)}{h} \\ \bar{\partial}_y\varphi(x, y) &= \frac{\varphi(x, y+h) - \varphi(x, y-h)}{2h}\end{aligned}$$

dalle quali si può ottenere il gradiente con uno schema centrato

$$\bar{\nabla}\varphi(x, y) = (\bar{\partial}_x\varphi(x, y), \bar{\partial}_y\varphi(x, y)) = \left(\frac{\varphi(x+h, y) - \varphi(x-h, y)}{2h}, \frac{\varphi(x, y+h) - \varphi(x, y-h)}{2h} \right).$$

Rappresentazione mediante Stencils

Le derivate possono essere espresse in modo più esemplificativo, utilizzando una rappresentazione grafica tramite stencils; esse infatti schematizzano il reticolo adottato come geometria spaziale. Ad esempio la derivata rispetto ad x approssimata con uno schema centrato può essere rappresentata dal seguente stencil

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(x, y)}$$

mentre la derivata centrata rispetto ad y può essere rappresentata dalla seguente

$$\bar{\partial}_y\varphi(x, y) = \frac{1}{2h} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(x, y)} ;$$

il pedice delle stencils indica la funzione alla quale si applica la derivata.

Consideriamo ora le derivate centrate; effettuiamo un'espansione in serie di Taylor di

$$\varphi(x, y)$$

al secondo ordine in h (ricordiamo che: $\Delta x = h$, $\Delta y = k$, e che siamo nel caso in cui $\Delta x = \Delta y \Rightarrow h = k$; possiamo quindi utilizzare come incremento spaziale h indifferentemente per x ed y)

$$\varphi(x+h, y) \simeq \varphi(x, y) + h\varphi_x + \frac{h^2}{2}\varphi_{xx} + \frac{h^3}{6}\varphi_{xxx} + \frac{h^4}{24}\varphi_{xxxx}$$

$$\varphi(x-h, y) \simeq \varphi(x, y) - h\varphi_x + \frac{h^2}{2}\varphi_{xx} - \frac{h^3}{6}\varphi_{xxx} + \frac{h^4}{24}\varphi_{xxxx}$$

$$\varphi(x, y+h) \simeq \varphi(x, y) + h\varphi_y + \frac{h^2}{2}\varphi_{yy} + \frac{h^3}{6}\varphi_{yyy} + \frac{h^4}{24}\varphi_{yyyy}$$

$$\varphi(x, y-h) \simeq \varphi(x, y) - h\varphi_y + \frac{h^2}{2}\varphi_{yy} - \frac{h^3}{6}\varphi_{yyy} + \frac{h^4}{24}\varphi_{yyyy}$$

dove i pedici indicano il simbolo di derivata; precisamente

$$\begin{aligned}\varphi_x &= \partial_x, \\ \varphi_{xx} &= \partial_x^2, \\ \varphi_{xxx} &= \partial_x^3, \\ \varphi_{xxxx} &= \partial_x^4\end{aligned}$$

e lo stesso vale per le derivate rispetto ad y .

Con le opportune sostituzioni (dopo aver moltiplicato il primo membro per $2h$) si ottiene

$$2h\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = 2h\varphi_x + \frac{2h^3}{6}\varphi_{xxx}$$

ovvero

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) \simeq \varphi_x + \frac{h^2}{6}\varphi_{xxx}.$$

Si osserva quindi come approssimare una derivata con lo schema centrato ha un'accuratezza dell'ordine $\mathcal{O}(h^2)$ che si commette un errore del secondo ordine nell'effettuare questa approssimazione. Ovvio che piú h è piccolo, minore è l'errore. Allo stesso modo si ha

$$\bar{\partial}_y\varphi(x, y) \simeq \varphi_y + \frac{h^2}{6}\varphi_{yyy}.$$

Quindi

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)} \simeq \varphi_x + \frac{h^2}{6}\varphi_{xxx}$$

$$\bar{\partial}_y\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)} \simeq \varphi_y + \frac{h^2}{6}\varphi_{yyy}$$

e il gradiente può essere espresso dalla seguente stencil

$$\bar{\nabla}\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(\mathbf{x},t)}, \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(\mathbf{x},t)} \right).$$

Con l'ausilio delle derivate approssimate viste in precedenza possiamo trovare le derivate seconde centrate

$$\bar{\partial}_x^2\varphi(x, y) = \frac{\varphi(x+h, y) + \varphi(x-h, y) - 2\varphi(x, y)}{h^2}$$

$$\bar{\partial}_y^2\varphi(x, y) = \frac{\varphi(x, y+h) + \varphi(x, y-h) - 2\varphi(x, y)}{h^2}$$

che sommate danno il laplaciano

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = \bar{\partial}_x^2 \varphi(x, y) + \bar{\partial}_y^2 \varphi(x, y) = \frac{\varphi(x+h, y) + \varphi(x-h, y) + \varphi(x, y+h) + \varphi(x, y-h) - 4\varphi(x, y)}{h^2}$$

rappresentato dal seguente stencil

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{\varphi(x, y)}$$

detto *laplaciano a cinque punti*.

2.2.2 Differenze Finite: Schemi con stencils pesati

Descriviamo ora le forme più generali delle derivate appena viste e quindi degli operatori differenziali. Si può infatti considerare una derivata dando un peso alle varie direzioni della geometria adottata. Per le derivate rispetto ad x ed y , infatti, la stencil assume una forma più generale

$$\bar{\partial}_x \varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -B & 0 & B \\ -A & 0 & A \\ -B & 0 & B \end{bmatrix}_{\varphi(x, y)}$$

$$\bar{\partial}_y \varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} B & A & B \\ 0 & 0 & 0 \\ -B & -A & -B \end{bmatrix}_{\varphi(x, y)}$$

dove A e B rappresentano i pesi che hanno le direzioni del reticolo nel calcolo delle derivate. In questo modo variando i pesi si può regolare l'incidenza degli errori di approssimazione. Per vedere ciò calcoliamo prima la forma esplicita delle derivate per poi trovare, tramite uno sviluppo in serie di Taylor, l'accuratezza di questa approssimazione. Consideriamo prima le seguenti espansioni in serie di Taylor

$$\varphi(x \pm h, y) \simeq \varphi(x, y) \pm h\varphi_x + \frac{h^2}{2}\varphi_{xx} \pm \frac{h^3}{6}\varphi_{xxx} + \frac{h^4}{24}\varphi_{xxxx}$$

$$\varphi(x, y \pm h) \simeq \varphi(x, y) \pm h\varphi_y + \frac{h^2}{2}\varphi_{yy} \pm \frac{h^3}{6}\varphi_{yyy} + \frac{h^4}{24}\varphi_{yyyy}$$

$$\begin{aligned} \varphi(x+h, y \pm h) &\simeq \varphi(x, y) & + \\ h\varphi_x \pm h\varphi_y + \frac{h^2}{2}(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + h^2\varphi_{xy} & & + \\ \frac{h^3}{6}(\varphi_{xxx} \pm \varphi_{yyy}) + \frac{h^3}{2}(\pm\varphi_{xxy} + \varphi_{xyy}) & & + \end{aligned}$$

$$+ \frac{h^4}{24}(\varphi_{xxxx} + \varphi_{yyyy}) + \frac{h^4}{4}\varphi_{xxyy} \pm \frac{h^4}{6}(\varphi_{xxyy} + \varphi_{xyyy})$$

$$\begin{aligned} \varphi(x-h, y \pm h) &\simeq \varphi(x, y) & - \\ h\varphi_x \pm h\varphi_y + \frac{h^2}{2}(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) \pm h^2\varphi_{xy} + \frac{h^3}{6}(-\varphi_{xxx} \pm \varphi_{yyy}) + \frac{h^3}{2}(\pm\varphi_{xxy} - \varphi_{xyy}) & & + \\ + \frac{h^4}{24}(\varphi_{xxxx} + \varphi_{yyyy}) + \frac{h^4}{4}\varphi_{xxyy} \mp \frac{h^4}{6}(\varphi_{xxyy} + \varphi_{xyyy}) & & . \end{aligned}$$

La derivata centrata rispetto ad x risulta essere:

$$h\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = A[\varphi(x+h, y) - \varphi(x-h, y)] + B[\varphi(x+h, y+h) + \varphi(x+h, y-h) - \varphi(x-h, y+h) - \varphi(x-h, y-h)];$$

effettuando le sostituzioni opportune e, dopo aver semplificato i termini simili, si ha

$$h\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = 2Ah\varphi_x + A\frac{h^3}{3}\varphi_{xxx} + 4Bh\varphi_x + \frac{2B}{3}h^3\varphi_{xxx} + 2Bh^3\varphi_{xyy}$$

da cui

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = (2A + 4B)\left(\varphi_x + \frac{h^2}{6}\varphi_{xxx}\right) + 2Bh^2\varphi_{xyy},$$

e affinché abbia senso deve valere la condizione $2A + 4B = 1$. Quindi si conclude che la derivata centrata rispetto ad x vale

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = \varphi_x + \frac{h^2}{6}\varphi_{xxx} + 2Bh^2\varphi_{xyy}$$

con $2A + 4B = 1$.

Allo stesso modo si ha

$$h\bar{\partial}_y\varphi(x, y) = A[\varphi(x, y+h) - \varphi(x, y-h)] + B[\varphi(x+h, y+h) + \varphi(x-h, y+h) - \varphi(x+h, y-h) - \varphi(x-h, y-h)];$$

eseguendo lo stesso procedimento utilizzato pocanzi si ottiene

$$\bar{\partial}_y\varphi(x, y) = \varphi_y + \frac{h^2}{6}\varphi_{yyy} + 2Bh^2\varphi_{xxy}$$

con la condizione $2A + 4B = 1$.

Si osserva quindi come l'accuratezza è sempre di h^2 ma può essere regolata tramite i pesi A e B. Possiamo quindi concludere che

$$\bar{\partial}_x\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} -B & 0 & B \\ -A & 0 & A \\ -B & 0 & B \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)} \simeq \varphi_x + \frac{h^2}{6}\varphi_{xxx} + 2Bh^2\varphi_{xyy}$$

$$\bar{\partial}_y\varphi(x, y) = \frac{1}{h} \begin{bmatrix} B & A & B \\ 0 & 0 & 0 \\ -B & -A & -B \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)} \simeq \varphi_y + \frac{h^2}{6}\varphi_{yyy} + 2Bh^2\varphi_{xxy}$$

con il vincolo $2A + 4B = 1$.

Osserviamo che per $A = \frac{1}{2} \Rightarrow B = 0$ si ottengono i valori che ci riportano al caso standard.

Laplaciano

Lo stencil più generale, detto laplaciano a nove punti, per il laplaciano è

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} F & E & D \\ E & -4(E+F) & E \\ F & E & F \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)}$$

la cui espressione formale risulta quindi essere

$$\begin{aligned} h^2 \bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = & E[\varphi(x+h, y) + \varphi(x-h, y) + \varphi(x, y+h) + \varphi(x, y-h) - 4\varphi(x, y)] + \\ & + F[\varphi(x+h, y+h) + \varphi(x-h, y+h) + \varphi(x+h, y-h) + \varphi(x-h, y-h) - 4\varphi(x, y)]. \end{aligned}$$

Con le opportune sostituzioni si ha, dopo qualche semplice semplificazione,

$$\begin{aligned} h^2 \bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = & Eh^2(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + E\frac{h^2}{12}(\varphi_{xxx} + \varphi_{yyy}) + \\ & + 2Fh^2(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + F\frac{h^4}{6}(\varphi_{xxx} + \varphi_{yyy}) + Fh^4\varphi_{xxyy} \end{aligned}$$

da cui, semplificando h^2 e mettendo in evidenza i fattori comuni, segue

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = (E + 2F)(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}) + (E + 2F)\frac{h^2}{12}(\varphi_{xxx} + \varphi_{yyy}) + Fh^2\varphi_{xxyy}$$

che ha senso se $E + 2F = 1$; quindi

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = \nabla^2 \varphi + \frac{h^2}{12}(\partial_x^4 + \partial_y^4) \varphi + Fh^2\partial_x^2\partial_y^2\varphi$$

con il vincolo sui pesi sopra scritto. In conclusione, si ottiene il laplaciano a nove punti

$$\bar{\nabla}^2 \varphi(x, y) = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} F & E & F \\ E & -4(E+F) & E \\ F & E & F \end{bmatrix}_{\varphi(x,y)} \simeq \nabla^2 \varphi + \frac{h^2}{12}(\partial_x^4 + \partial_y^4) \varphi + Fh^2\partial_x^2\partial_y^2\varphi$$

con $E + 2F = 1$.

Anche in questo caso che i valori $E = 1 \Rightarrow F = 0$ corrispondono al caso standard, rappresentato dal laplaciano a cinque punti.

2.2.3 Metodi dei Residui pesati

I Metodi dei Residui pesati (WRM dall'inglese Weighted residual methods) sono concettualmente diversi dallo schema alle differenze finite. I primi infatti assumono che la soluzione può essere rappresentata analiticamente attraverso una soluzione di partenza approssimata e una funzione rappresentante il Residuo.

Dai metodi dei residui pesati discendono il metodo ai volumi finiti e agli elementi finiti e il metodo spettrale. Consideriamo come caso esempio l'equazione di diffusione del calore

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2}$$

dove la barra sopra T indica la soluzione esatta. Il punto di partenza è quello di assumere una soluzione approssimata T nel seguente modo

$$T(x, y, z, t) = T_0(x, y, z, t) + \sum_{j=1}^J a_j(t) \phi_j(x, y, z) \quad (1)$$

dove $T_0(x, y, z, t)$ viene scelto in modo tale che siano soddisfatte al meglio le condizioni al contorno e iniziali. $\phi_j(x, y, z)$ sono delle funzioni note, scelte in modo tale da interpolare al meglio la soluzione esatta, che hanno una forma polinomiale o trigonometrica come ad esempio

$$\phi_j(x, y, z) = x^{j-1}$$

o anche

$$\phi_j(x, y, z) = \sin(j\pi x).$$

$a_j(t)$ sono coefficienti da determinare risolvendo un sistema di equazioni generate dall'equazione principale. Si assume che

$$L(\bar{T}) = \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} = 0 \quad (2)$$

che non sarà identicamente nulla se in essa si sostituisce la (1) ed esisterà quindi un'equazione residua

$$L(T) = R$$

,

$$(3)$$

in generale continua in x, y, z, t .

Per J sufficientemente grande i coefficienti $a_j(t)$ possono essere scelti in maniera tale che R sia piccolo nel dominio computazionale, per cui possono essere determinati con la condizione che l'integrale sulla funzione R nel dominio computazionale sia nullo

$$\int \int \int W_m(x, y, z) R dx dy dz = 0, \quad (4)$$

generando un sistema di M equazioni ($m=1, \dots, M$) nelle incognite a_j . Dal momento che i coefficienti a_j possono dipendere dal tempo il sistema sarà rappresentato da equazioni differenziali ordinarie nel caso non stazionario, mentre nel caso stazionario sarà un sistema di equazioni algebriche.

Le funzioni $W_m(x, y, z)$ rappresentano i pesi o funzioni test e in base alla scelta della loro forma funzionale si hanno diversi metodi appartenenti alla categoria dei metodi dei residui pesati, alcuni dei quali sono di seguito elencati.

- Metodo dei Sottodomini

Si suddivide il dominio computazionale in M sottodomini D_m , che possono essere sovrapposti, e si pone

$W_m = 1$ all'interno di D_m ,

$W_m = 0$ al di fuori di D_m .

Tale metodo coincide con il metodo ai volumi finiti ed ha la caratteristica importante di garantire le leggi di conservazione anche con la discretizzazione dal momento che quest'ultima viene effettuata sulle leggi integrali; in questo modo si ottengono soluzioni accurate in particolar modo per i flussi interni o flussi con onde d'urto.

- Metodo di Collocazione

Si sceglie

$$W_m(x) = \delta(x - x_m), \quad (6)$$

dove $\delta(x - x_m)$ è la delta di Dirac e $x = (x, y, z)$.

Tale metodo lo si ricava ponendo $R(x_m) = 0$ nell'integrale (4). Il metodo alle differenze finite è in un certo senso un metodo di collocazione con la differenza che nel primo non si utilizzano soluzioni approssimate. Una variante particolare è rappresentata dal metodo di collocazione ortogonale, in cui le funzioni interpolanti sono funzioni polinomiali ortogonali e le incognite rappresentano i valori nodali di T , mentre i punti di collocazione x_m sono scelti dagli zeri di una delle funzioni polinomiali ortogonali.

- Metodo di Galerkin

Si scelgono

$$W_m(x, y, z) = \phi_m(x, y, z), \quad (8)$$

Se le funzioni approssimanti formano un insieme completo (ad esempio un insieme completo per una polinomiale è rappresentato da $1, x^2, x^3, \dots, x^M$), si ha che la funzione residua risulta ortogonale ad ogni elemento dell'insieme completo e di conseguenza la soluzione approssimata T , convergerà alla soluzione esatta \bar{T} per M che tende ad infinito.

2.3 Errori e analisi di stabilità

Conseguenza dell'approssimazione delle PDE sono gli errori di discretizzazione. Tali errori possono propagarsi o meno ad ogni evoluzione da nodo a nodo della griglia computazionale. In generale lo schema alle differenze finite per una PDE deve soddisfare alcuni requisiti, ossia:

- **Accuratezza.** Il calcolatore effettua un arrotondamento ad un numero finito di cifre, arrotondamento che viene effettuato in ogni step per calcoli iterati; questo porta ad errori di Round-off. E' quindi evidente che aumentando i punti della griglia computazionale si hanno meno errori di troncamento ma più errori di round-off (e viceversa).

- **Consistenza.** Uno schema alle differenze finito applicato alle PDE è consistente se infittendo la griglia computazionale (aumentando il numero di nodi) diminuisce l'errore di troncamento.
- **Stabilità.** Si ha stabilità quando all'infittirsi della griglia la soluzione numerica converge a quella analitica. La stabilità riguarda problemi di marcia ossia a problemi di evoluzione nel tempo le cui soluzioni quindi vengono effettuate a step temporali. Non si applica quindi a problemi di equilibrio governati da equazioni ellittiche.

La stabilità può essere forte o debole, a seconda che l'errore di round-off sia globale o in un singolo punto. E' nell'ultimo caso che viene effettuata l'analisi in quanto lo studio della stabilità forte è difficile (per non dire impossibile) da effettuare.

L'analisi di stabilità debole viene effettuato secondo il metodo di Von Neumann, basato su un'analisi di Fourier.

2.3.1 Accuratezza

L'arrotondamento che effettua l'elaboratore elettronico durante le simulazioni numeriche porta ad errori detti Errori di Round Off. In un calcolo iterato, infatti, viene effettuato un arrotondamento per ogni step. Tali errori sono proporzionali al numero di punti sulla griglia computazionale, per cui una griglia fitta porta ad un aumento di errori di round off, ma anche ad una diminuzione di Errori di Troncamento.

2.3.2 Consistenza

Nell'approssimazione di una PDE con uno schema alle differenze finite possiamo valutare, quando possibile, la differenza tra la soluzione numerica e quella analitica. Una rappresentazione alle differenze finite si dice Consistente se
 Soluzione analitica - Soluzione alle differenze finite $\rightarrow_{h \rightarrow 0} 0/te\text{x}$

2.3.3 Stabilità

La stabilità è applicabile solo a problemi di marcia, per cui non è applicabile a problemi di equilibrio rappresentati da PDE Ellittiche.

Uno schema approssimato è Stabile quando da uno step d'interazione al successivo gli errori di ogni natura non crescono. In particolare uno schema sarà convergente se è stabile e consistente, ossia quando la soluzione numerica tende a quella analitica all'infittirsi della griglia.

Distinguiamo la stabilità forte da quella debole.

Stabilità Forte

Errore round off globale (in tutti i punti) Cresce \rightarrow Instabilità

Errore round off globale (in tutti i punti) Non Cresce \rightarrow Stabilità

Stabilità Debole

Errore round off in un punto Cresce \rightarrow Instabilità

Errore round off in un punto Non Cresce \rightarrow Stabilità

L'analisi di stabilità forte è di difficile studio, se non impossibile, per cui si ricorre allo studio della stabilità debole tramite l'analisi di Von Neumann che fa ricorso all'analisi di Fourier.

2.3.4 Analisi di Stabilità di Von Neumann

Denotiamo con

PDE = Soluzione Analitica;
N = Soluzione Numerica;
D = Soluzione numerica esatta (ossia con accuratezza infinita);
r = errore di round off;

Ovviamente

$$N = D + r$$

PDE Paraboliche

Consideriamo come PDE parabolica l'equazione del calore

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

discretizzata con uno schema FTCS

$$T_j^{n+1} - T_j^n - \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} (T_{j+1}^n - 2T_j^n + T_{j-1}^n) = 0.$$

e sostituiamo la relazione $N = D + r$; ricordando che la soluzione D deve essere soddisfatta ($D=0$) si ottiene

$$r_j^{n+1} - r_j^n - \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x} (r_{j+1}^n - 2r_j^n + r_{j-1}^n) = 0_m \text{ (zero macchina).}$$

Dal momento che c'è evoluzione temporale di r così come per D, possiamo effettuare l'analisi in serie di Fourier.

Siano

$2L$ intervallo di oscillazione

m = numero oscillazioni complete in $2L$

$k_m = \frac{2m\pi}{2L}$, $m = 0, 1, \dots, M$ Numero d'onda

$M = m_{max}$

$\beta = k_m \Delta x$

$f_m = \frac{k_m}{2\pi} = \frac{m}{2L}$ frequenza della m-esima armonica.

Possiamo scrivere l'errore di round off in serie di Fourier

$$r(x, t) = \sum_m b_m(t) e^{ik_m x} = \sum_m r_m(x, t);$$

essendo nel campo dei numeri complessi, b_m può essere scritto come una fase

$$b_m = e^{at}$$

per cui

$$r(x, t) = \sum_m e^{at} e^{ik_m x}$$

Nelle precedenti possiamo sostituire quindi

$$t \rightarrow n$$

$$t + \Delta t \rightarrow n + 1$$

$$x \rightarrow j$$

$$x + \Delta x \rightarrow j + 1$$

e sostituire la forma in serie per r .

Possiamo quindi definire

$$\chi = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

$G = \frac{r_j^{n+1}}{r_j^n}$ Fattore di Amplificazione.

La schematizzazione quindi risulta stabile se l'errore di round off ad $n + 1$ è minore rispetto allo step temporale n , ossia quando

$$r_j^{n+1} \leq r_j^n$$

per cui la condizione di stabilità risulta

$$|G| \leq 1 \rightarrow \text{Stabilità (debole)}$$

dove si è utilizzato il modulo in quanto G è un numero complesso. Sostituendo in G le forme esponenziali per r e ricordando alcune relazioni che legano gli esponenziali alle funzioni sin e cos nel campo complesso si ottiene

$$|G| = |1 - 4\chi \sin^2 \frac{\beta}{2}| \leq 1$$

da cui la condizione di stabilità

$$\chi \leq \frac{1}{2}.$$

Nel caso 2-dimensionale

$$|G| = \left| 1 - 4\chi_x \sin^2 \frac{\beta_x}{2} - 4\chi_y \sin^2 \frac{\beta_y}{2} \right| \leq 1$$

$$\chi_x + \chi_y \leq \frac{1}{2}.$$

PDE Iperboliche

Per l'equazione di Burger non viscosa (PDE iperbolica)

$$G = \cos\beta - i\nu \sin\beta$$

$$|G| = |\cos\beta - i\nu \sin\beta| \leq 1 \Rightarrow \sqrt{\cos^2\beta + \nu^2 \sin^2\beta} \leq 1$$

da cui

$$|\nu| \leq 1$$

dove

$$\nu = c \frac{\Delta t}{\Delta x} \text{ Numero di Courant.}$$

Quindi la condizione di stabilità diventa

$$\left| c \frac{\Delta t}{\Delta x} \right| \leq 1.$$

2.4 Algoritmi di risoluzione per sistemi lineari

La discretizzazione spaziale e temporale delle PDE riconduce le stesse a sistemi di equazioni lineari ricunducibili ad una forma matriciale

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B}$$

dove la forma della matrice dei coefficienti \mathbf{A} induce ad algoritmi specifici di risoluzione, a seconda che sia densa, sparsa, diagonale, tridiagonale, pentadiagonale, etc. Gli algoritmi risolutivi per i sistemi lineari sono classificabili essenzialmente nelle seguenti categorie

- Metodi diretti;
- Metodi Iterativi;
- Metodi Multigrid.

Metodi Diretti Per piccoli sistemisi può utilizzare il metodo di Newton. Un metodo diretto abbastanza efficiente soprattutto per la soluzione di sistemi tridiagonali è il metodo di eliminazione di Gauss (spesso accompagnato dall'algoritmo di fattorizzazione LU), ma non molto veloce e che in alcuni casi può essere poco efficiente. Un algoritmo efficiente per sistemi tridiagonali è l'algoritmo di Thomas. Sistemi che presentano \mathbf{A} in forma tridiagonale a blocchi possono essere risolti con il metodo di eliminazione a blocchi che è un'estensione dell'algoitmo di Thomas.

Metodi Iterativi Si tratta di procedure che approssimano la soluzione effettuando ripetute iterazioni. In generale si stabilisce inizialmente una soluzione al problema, per poi modificarla producendo una serie di approssimazioni successive fino a convergere alla soluzione esatta entro un margine d'errore fissato. I metodi Iterativi popolari sono: metodo di Jacobi, metodo di Gauss-Seidel, metodi iterativi a blocchi, metodo SIP (Strongly Implicit Procedure), appartenenti in particolare alla categoria dei metodi iterativi stazionari, mentre tra i metodi iterativi non stazionari citiamo il metodo del Gradiente Coniugato.

Metodi Multigrid

2.4.1 Algoritmo di Gauss e Fattorizzazione LU

Un sistema lineare triangolare

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \quad a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \vdots \\ \quad \quad \quad a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

può essere posto in forma matriciale

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

ossia nella forma $AX = B$. La soluzione di tale sistema può essere effettuata con il metodo di eliminazione di Gauss:

- Si considera la soluzione n-esima $x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$
- Per ogni valore k che va da n-1 a 1 si calcola $x_k = \frac{1}{a_{kk}} \left(b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}x_j \right)$.

procedura detta per sostituzione all'indietro. Il caso particolare appena presentato riguarda un sistema la cui matrice dei coefficienti è di tipo triangolare superiore, ma può essere risolto anche per matrici triangolari inferiori con la stessa procedura ma per sostituzione in avanti.

Se invece la matrice dei coefficienti non ha natura triangolare, ma ha la generica forma

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \dots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

e quindi di un sistema lineare

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Trasformiamo la matrice originaria in una matrice tridiagonale superiore eliminando le matrici

$$\begin{aligned} & \tilde{a}_i \\ \tilde{c}'_1 &= \left(\tilde{b}_1\right)^{-1} \tilde{c}_1, \\ \tilde{d}'_1 &= \left(\tilde{b}_1\right)^{-1} \tilde{d}_1, \\ \tilde{b}'_i &= \tilde{b}_i - \tilde{a}_i \tilde{c}'_{i-1} \\ \tilde{c}'_i &= \left(\tilde{b}'_i\right)^{-1} \tilde{c}_i, \\ \tilde{d}'_i &= \left(\tilde{b}'_i\right)^{-1} \left[\tilde{d}_i - \tilde{a}_i \tilde{d}'_{i-1}\right]. \end{aligned}$$

Alla fine si otterrà un sistema in cui \tilde{c}'_i rimpiazza \tilde{c}_i , \tilde{d}'_i rimpiazza \tilde{d}_i , e la matrice unità I rimpiazza \tilde{b}_1 .

Nel secondo step si effettua una sostituzione all'indietro

$$\begin{aligned} \tilde{x}_n &= \tilde{d}'_n \\ \tilde{x}_i &= \tilde{d}'_i - \tilde{c}'_i \tilde{x}_{i+1} \end{aligned}$$

2.4.5 Metodo di Gauss-Seidel

L'algoritmo di Gauss-Seidel è un algoritmo iterativo per la risoluzione di sistemi lineari per i quali i coefficienti sulla diagonale della matrice dei coefficienti hanno un valore in modulo maggiore degli elementi non diagonali.

Dato un sistema $AX = B$ deve valere

$$|a_{ii}| > \sum_{i \neq j} |a_{ij}|.$$

Prima di tutto riscriviamo la matrice

$$A$$

come la somma algebrica di una matrice diagonale D , una matrice triangolare inferiore G e una matrice triangolare superiore S

$$A = D - G - S;$$

la soluzione del sistema sarà quindi data dall'iterazione della seguente espressione

$$x^{n+1} = (D - G)^{-1} (Sx^n + B)$$

ossia, in termini di componenti

$$x_i^{n+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j < i} a_{ij} x_j^{n+1} - \sum_{j > i} a_{ij} x_j^n \right)$$

L'implementazione si effettua fissando inizialmente una soluzione \bar{x} a cui deve convergere la soluzione numerica; quindi si itera la precedente per ogni step k e al termine del ciclo si verifica se è stata raggiunta la convergenza ad \bar{x} con una certa tolleranza; se la condizione non viene soddisfatta il ciclo riparte con una nuova \bar{x} .

2.4.6 Metodo di Jacobi

Il metodo di Jacobi, anch'esso metodo iterativo, è applicabile sotto la condizione $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$.

Scriviamo la matrice A come la somma algebrica di una matrice diagonale D , una matrice triangolare inferiore G e una matrice triangolare superiore S

$$A = D - G - S;$$

e risolviamo il sistema come segue

$$x^{n+1} = D^{-1} [(G + S)x^n + B]$$

che in termini di componenti diventa

$$x_i^{n+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_j^n \right]$$

L'implementazione si effettua fissando inizialmente una soluzione \bar{x} a cui deve convergere la soluzione numerica; quindi si itera la precedente per ogni step k e al termine del ciclo si verifica se è stata raggiunta la convergenza ad \bar{x} con una certa tolleranza; se la condizione non viene soddisfatta il ciclo riparte con una nuova \bar{x} .

2.4.7 Metodo SOR (Successive Over-Relaxation)

Il metodo SOR (del sovrarilassamento successivo) è una tecnica numerica di accelerazione della convergenza; esso è in un certo senso una generalizzazione del metodo di Gauss-Seidel in quanto consiste nel considerare un parametro nella relazione discretizzata ϑ detto fattore di rilassamento al fine di ottenere la convergenza con una migliore tolleranza:

$$x_i^{n+1} = (1 - \vartheta) x_i^n + \frac{\vartheta}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j < i} a_{ij} x_j^{n+1} - \sum_{j > i} a_{ij} x_j^n \right).$$

Ovviamente è di facile dimostrazione il fatto che $\vartheta = 1$ corrisponde al metodo di Gauss-Seidel. Il range di valori che può assumere il fattore di rilassamento dipende dalle caratteristiche della matrice dei coefficienti A ed la ricerca del valore ottimale viene effettuato in modo tale da avere una convergenza più veloce. Nel caso particolare di una matrice A simmetrica e definita positiva il valore ϑ deve essere compreso nell'intervallo

$$0 < \vartheta < 2$$

L'implementazione si effettua fissando inizialmente una soluzione \bar{x} a cui deve convergere la soluzione numerica; quindi si itera la precedente per ogni

step k e al termine del ciclo si verifica se è stata raggiunta la convergenza ad \bar{x} con una certa tolleranza; se la condizione non viene soddisfatta il ciclo riparte con una nuova \bar{x} .

2.5 Metodi numerici per PDE paraboliche

2.5.1 Metodo Esplicito (per l'equazione di diffusione del calore)

Consideriamo come equazione parabolica l'equazione di diffusione del calore unidimensionale

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

ottenibile dall'equazione dell'energia considerando il fluido in quiete o la cui velocità è trascurabile, e con conduttività termica e calore specifico costanti. Il metodo esplicito consiste nel discretizzare le derivate temporali con uno schema alle differenze finite in avanti (forward) e il laplaciano con uno schema alle differenze finite centrato:

$$\text{per } i \text{ fissato} \rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} \simeq \frac{1}{\Delta t} (T_i^{n+1} - T_i^n)$$

$$\text{per } n \text{ fissato} \rightarrow \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \simeq \frac{1}{\Delta x^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)$$

e di conseguenza l'equazione di diffusione discretizzata diventa

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n).$$

Quindi per n fissato ci calcoliamo il valore di T su ogni sito i del reticolo. Il metodo è esplicito in quanto il valore di T sul sito i allo step temporale n+1 dipende dal valore assunto da T nello step precedente che è noto.

Trattandosi di una PDE parabolica è ovvio che bisogna tener conto delle condizioni iniziali e al contorno

$$x = 0 \Rightarrow T = T_{in}(t)$$

$$x = L \Rightarrow T = T_L(t)$$

$$t = 0 \Rightarrow T = T_0(x)$$

per cui l'espressione dell'equazione del calore sopra scritta vale per $n \geq 1$ e per $i = 1, \dots, I - 1$ dove il sito I del reticolo rappresentante lo spazio discretizzato corrisponde alla coordinata $x=L$ nello spazio continuo. E' importante osservare che ai fini della stabilità numerica deve valere

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} < \frac{1}{2}$$

2.5.2 Metodo di Crank-Nicolson

Il metodo implicito di Crank-Nicolson rimuove il soddisfacimento della condizione di stabilità presente nel metodo esplicito; è quindi molto utile per simulazioni che prevedono molti step di simulazione.

La caratteristica principale del metodo è che la derivata spaziale nel sito i viene calcolata attorno al livello temporale $n + \frac{1}{2}$. Applicando il metodo all'equazione di diffusione del calore si arriva alla forma discretizzata seguente

$$T_i^{n+1} - T_i^n = \frac{\alpha}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} [(T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}) + (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)]$$

dove il primo membro è una derivata temporale discretizzata con uno schema in avanti mentre il secondo membro è la somma di due laplaciani: il primo è discretizzato con uno schema centrato al livello temporale $n+1$, il secondo con uno schema centrato al livello temporale n .

In generale il metodo di C-N è un caso particolare dello schema trapezoidale

$$\frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta T} = \frac{\alpha}{2\Delta x^2} [\lambda (T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}) + (1 - \lambda) (T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n)]$$

con $\lambda = \frac{1}{2}$; $\lambda = 0$ corrisponde allo schema esplicito.

La condizione di stabilità per lo schema trapezoidale è

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2(1 - 2\lambda)};$$

ovviamente nel metodo esplicito $\lambda = 0$ porta alla condizione di stabilità nota

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

mentre nel metodo di Crank-Nicolson

$$\lambda = \frac{1}{2} \Rightarrow \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \infty$$

il che dimostra quanto detto inizialmente e quindi tale metodo è incondizionatamente stabile.

Solitamente l'equazione del calore unidimensionale trattata con il metodo di Crank-Nicolson da luogo ad un sistema lineare tridiagonale risolvibile con l'algoritmo di Thomas.

2.6 Metodi numerici per PDE ellittiche

Una classica equazione ellittica è rappresentata dall'equazione di Laplace. Essa si può discretizzare con il metodo alle differenze finite applicato all'operatore laplaciano. I classici risultati di discretizzazione danno luogo ai noti operatori laplaciano a cinque punti e laplaciano a nove punti. Con tale discretizzazione ci ritroviamo con un sistema lineare descritto in precedenza con tutti gli algoritmi di risoluzione per esso.

Quindi, trovandoci d'avanti un'equazione ellittica bisogna discretizzare il laplaciano con uno schema a cinque o nove punti ed applicare un algoritmo di simulazione diretto o iterativo in base alle esigenze computazionali. Ad esempio se nelle simulazioni gli step computazionali non sono molto alti e si vuole effettuare una simulazione finchè non ci sia convergenza si può applicare uno degli schemi iterativi.

Tali schemi algoritmi di risoluzione sono esposti nella sezione Algoritmi di risoluzione per sistemi lineari.

2.7 Metodi numerici per PDE iperboliche

La peculiarità delle equazioni alle derivate parziali iperboliche è quella di presentare due caratteristiche reali, quindi due percorsi di evoluzione del sistema in esame. Solitamente l'applicazione di schemi numerici comporta prima un esame attento della PDE iperbolica: lineare o non lineare. Tra i metodi numerici per questo tipo di PDE vi sono i metodi basati sullo studio delle caratteristiche, il metodo di Lax, di Lax-Wendroff, di Crank-Nicolson, di MacCormack, gli schemi Upwind, Runge-Kutta, metodo TVD. Un metodo per la risoluzione di PDE non lineari nel caso unidimensionale è il metodo di Roe o risolutore di Roe.

2.7.1 Metodi numerici per PDE Iperboliche Lineari

Consideriamo come caso studio la PDE lineare

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\alpha \frac{\partial u}{\partial x}$$

con

$$\alpha > 0$$

ossia l'equazione dell'onda del primo ordine.

Dal momento che i problemi maggiori si hanno nel caso di PDE iperboliche non lineari, tralasciamo i commenti per il caso lineare, riportando di seguito una tabella riassuntiva dei principali metodi numerici per le PDE iperboliche lineari con le principali caratteristiche.

N.B.: Nella Tabella

$$c = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Metodo Tipo Approssimazione Ordine Accuratezza Stabilità

Eulero FTFS Esplicito

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\alpha \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}$$

$$\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x)$$

Incondizionatamente Instabile

Eulero FTCS Esplicito

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\alpha \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

$$\mathcal{O}[\Delta t, (\Delta x)^2]$$

Incondizionatamente Instabile

Upwind 1° ordine Esplicito

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\alpha \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}$$

$$\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x)$$

$$c \leq 1$$

Lax Esplicito

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2} (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n) - \frac{c}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)$$

$$\mathcal{O} \left[\Delta t, \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \right]$$

$$c \leq 1$$

Leapfrog Esplicito

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\Delta t} = -\alpha \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

$$\mathcal{O} [(\Delta t)^2, (\Delta x)^2]$$

$$c \leq 1$$

Lax-Wendroff Esplicito

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha \Delta t \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) + \frac{\alpha^2}{2} (\Delta t)^2 \left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right)$$

$$\mathcal{O} [(\Delta t)^2, (\Delta x)^2]$$

$$c \leq 1$$

Eulero BTCS Implicito

$$\frac{c}{2} (u_{i-1}^{n+1} - u_{i+1}^{n+1}) - u_i^{n+1} = -u_i^n$$

$$\mathcal{O} [\Delta t, (\Delta x)^2]$$

Incondizionatamente Stabile

MacCormack Multi-step

Predictor:

$$\overline{u_i^{n+1}} = u_i^n - c (u_{i+1}^n - u_i^n)$$

Corrector:

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2} \left(u_i^n + \overline{u_i^{n+1}} \right) - \frac{c}{2} \left(\overline{u_i^{n+1}} - \overline{u_{i-1}^{n+1}} \right)$$

$$\mathcal{O} \left[\Delta t, \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \right]$$

$$c \leq 1$$

Oltre a quelli asposti ci sono altri metodi utilizzabili come ad esempio il metodo di Crank-Nicolson, varianti ai metodi Upwind, metodi Upwind al secondo ordine, etc...

Note - Riferimento Bibliografico: K. Hoffmann, S. Chiang - Computational Fluid Dynamics Vol.I - EES Books (2000)

2.8 Alcuni codici in Fortran77 e Matlab

2.8.1 MATLAB community scambio file

Capita spesso di aver bisogno di una function, una subroutine o di un frammento di codice da implementare nei nostri codici d'implementazione dei nostri modelli computazionali. A tale proposito segnalo lo spazio che il sito ufficiale della Math Works dedica allo scambio file in Matlab, raggiungibile al seguente indirizzo <http://www.mathworks.it/matlabcentral/fileexchange/> Matlab Central - File Exchange

che è una vera community di gente che mette a disposizione di tutti i propri codici Matlab inerenti a svariati campi della scienza computazionale e sono liberamente scaricabili.

2.8.2 PDE TOOLBOK

Uno strumento molto utile per la risoluzione delle PDE è PDE TOOLBOX distribuito dalla Mathworks, l'azienda distributrice del noto Matlab. Questo strumento, distribuito in versione trial e scaricabile dal sito dell'azienda, risolve le PDE in 2-dim con il metodo ai volumi finiti ed è utilizzabile tramite un'interfaccia grafica, permette l'integrazione di m-files (codici sorgente scritti in matlab) e l'utilizzo tramite linea di comando per chi ne sentisse l'esigenza.

Con esso è possibile studiare alcuni problemi di fluidodinamica in modo più semplice rispetto ad altri strumenti commerciali in circolazione. Tuttavia presenta alcuni limiti come il fatto che è limitato solo a problemia 2-dim e poco agevole nell'importare dati da sistemi CAD diffusi.

Per ulteriori informazioni sul prodotto visitare la pagina dell'azienda; potete farlo cliccando su questo link. <http://www.mathworks.com/products/pde/>

2.8.3 IDL ed ENVI

2.9 Bibliografia e letture di approfondimento

3 Algoritmi e Modelli Computazionali

Esistono altri metodi per risolvere numericamente fenomeni non lineari, deterministici e non, stocastici, caotici, turbolenti. Ad esempio le equazioni dell'idrodinamica oltre alle tecniche della Computational Fluid Dynamics possono essere risolte con metodi computazionali alternativi e molto popolari. La CFD perde efficienza nel caso in cui si vogliono studiare fluidi più complessi, quando ad esempio diventano importanti le scale di tempi e lunghezze caratteristiche. In questi casi è importante quindi studiare i sistemi più a fondo, utilizzando un approccio microscopico o, meglio ancora, un approccio mesoscopico; in quest'ultimo caso si studia il sistema su scale di lunghezza molto piccole, ma non abbastanza da considerarle microscopiche, rimanendo quindi in una trattazione classica. Tale esigenza ha portato nel tempo a sviluppare degli algoritmi computazionali che fanno uso della meccanica statistica classica e della teoria cinetica. Molti di questi algoritmi trovano larga applicabilità in problemi di fluidodinamica ma con alcune piccole modifiche vengono applicati anche in altri casi come l'economia. Tra i vari algoritmi sviluppati dalla comunità scientifica vi è l'algoritmo LBM ed i seguenti:

- Molecular Dynamics (MD),
- Dissipative Particle Dynamics (DPD),
- Direct Simulation Monte Carlo Method (DSMC),
- Multi Particle Collision Dynamics (MPCD).

Gli ultimi tre utilizzano un approccio mesoscopico ed hanno natura stocastica, mentre la MD risolve le equazioni del moto di Newton ed ha natura deterministica.

Gli algoritmi 'mesoscopici' trovano applicazione anche in campi diversi dalla fluidodinamica, come ad esempio lo studio dei fenomeni di trasporto nei semiconduttori, fisica nucleare, e teorie dei mercati finanziari. Il più popolare è senza dubbio il metodo Monte Carlo.

3.1 Modelli Microscopici

3.1.1 Dinamica Molecolare

La Dinamica molecolare (MD) rappresenta un approccio numerico microscopico. In particolare la MD integra la dinamica molecolare su scala atomica con le equazioni del moto di Newton per un insieme di molecole interagenti tramite un potenziale intermolecolare. Si risolvono, infatti, un insieme di equazioni differenziali

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i\{x_j\}$$

dove m_i è la massa di un atomo, la derivata seconda temporale la sua accelerazione, $\mathbf{F}_i\{x_j\}$ è la forza intermolecolare agente sull'atomo i -esimo ed è funzione della posizione di tutti gli altri atomi x_j . L'energia termica è rappresentata dal valore medio dell'energia cinetica di tutti gli atomi. L'algoritmo MD sfrutta i valori medi per il calcolo delle proprietà del fluido e questo porta a considerare una continua rescaling delle velocità per evitare accumulo di errori numerici nella soluzione delle equazioni del moto e mantenere costante la temperatura del sistema, pagando però tempi di simulazione molto elevati e soprattutto un'inadeguatezza per simulazioni di flussi idrodinamici complessi.

3.2 Modelli Mesoscopici

3.2.1 Dissipative Particle Dynamics

L'algoritmo DPD (Dissipative particle dynamics)[9, 10] fa uso di un approccio mesoscopico in cui il sistema viene fatto evolvere nello spazio continuo ad intervalli temporali discreti. Nel DPD vengono catturati gli aspetti migliori della MD e dell'algoritmo LGA(Lattice Gas Automata): in questo modo si risolvono i problemi della MD a livello di efficienza e di tempi di simulazione. Nel DPD si considera il moto delle particelle massive per le quali massa e impulso sono conservati. L'evoluzione per ogni passo temporale si suddivide in due fasi:

- nella prima fase viene implementata l'interazione con le altre particelle che di conseguenza si riflette in una variazione d'impulso

$$\Delta p_i = \sum_{j \neq i} \Omega_{ij} e_{ij}$$

dove e_{ij} è un vettore unitario che congiunge la particella j con la particella i, mentre Ω_{ij} è uno scalare che rappresenta l'interazione tra le particelle, e fornisce informazioni sul trasferimento d'impulso tra la particella i e la particella j.

- La seconda fase rappresenta la propagazione e consiste nell'aggiornamento delle posizioni delle particelle

$$\Delta r_i = \frac{\Delta t}{m} (\mathbf{p}_i + \Delta p_i)$$

La forma di Ω_{ij} , al fine di garantire il teorema di fluttuazione-dissipazione, è

$$\Omega_{ij} = 3 \frac{1 - \frac{r_{ij}}{r_c}}{\pi r_c^2 n} \left[\Pi_{ij} - 2\varpi \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c} \right) (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j) \cdot \mathbf{e}_{ij} \right] \text{ se } r_{ij}$$

$$\Omega_{ij} = 0 \text{ se } r_{ij} \geq r_c.$$

r_c è il raggio di soglia, oltre il quale non avviene trasferimento d'impulso; la sua presenza assicura che l'interazione (quindi il trasferimento d'impulso) sia locale. Il fattore n è la densità del sistema. La scelta della forma di Ω_{ij} rappresenta il punto fondamentale dello sviluppo dell'algoritmo in quanto essa garantisce uno stato di equilibrio ben definito. Si osserva che Ω_{ij} è uno scalare simmetrico $\Omega_{ij} = \Omega_{ji}$, dal momento che si vuol garantire invarianza per traslazioni e rotazioni del sistema (quindi conservazione di impulso e momento angolare): infatti il prodotto scalare nel secondo membro della prima equazione di Ω_{ij} è simmetrico e deve valere anche Π_{ij} . In questo modo il modello è isotropico ed è assicurata l'invarianza galileiana. Π_{ij} è una componente stocastica dell'impulso: esso rappresenta la componente casuale dell'impulso trasferito dovuto alle collisioni casuali tra le particelle e che da luogo alla pressione nel fluido. Tramite Π_{ij} è inoltre possibile controllare la temperatura del sistema, dal momento che la sua varianza misura le fluttuazioni termiche nel sistema. Esso è rappresentato da una distribuzione casuale uniforme per la quale media e varianza assumono lo stesso valore Π_0 . Il secondo termine nelle parentesi quadre nel secondo membro della prima equazione per Ω_{ij} presenza di viscosità nel fluido. Il termine stocastico, quindi, tende a riscaldare il sistema, mentre il secondo termine tende a rilassare ogni moto relativo.

La coazione di questi due termini si esplica come un termostato: quando il sistema si surriscalda, il termine dissipativo tende a dominare al fine di raffreddare il sistema; quando invece si raffredda eccessivamente 'e il termine stocastico che tende a dominare, in modo tale da riscaldarlo e ripristinare quindi la sua temperatura. Nel caso in cui il sistema 'e una miscela binaria immiscibile l'algoritmo DPD va modificato, introducendo una nuova variabile detta colore che

pu'ò assumere due possibili valori: ad esempio 'rosso' per una fase e 'blu' per l'altra. Inoltre nel caso di particelle dello stesso colore (stessa fase) si utilizzano interazioni identiche (stessa variazione d'impulso) mentre nel caso di collisioni tra particelle di colore diverso si incrementa il valore della media e varianza di Π_{ij} di una quantità Π_{rep} incremento che ha l'effetto di creare una repulsione tra particelle di fasi differenti. Π rappresenta il termine di frizione ed è quindi responsabile della

L'algoritmo DPD, molto laborioso nello sviluppo analitico, è molto utile per lo studio di fluidi complessi e per simulazioni di sistemi in cui è importante considerare le interazioni idrodinamiche e il moto casuale Browniano, responsabile dell'agitazione termica.

3.2.2 Direct Simulation Monte Carlo Method

L'algoritmo DSMC (Direct simulation Monte Carlo) ha una natura stocastica, per cui le grandezze fisiche di interesse sono rappresentate da valori medi su porzioni di volume del sistema. L'idea di base è di dividere il volume del sistema in celle, ognuna delle quali contenente un certo numero di molecole (circa 50). N è il numero di molecole dell'intero sistema, distribuite casualmente e si assume che ogni molecola tra le N rappresenti N_{eff} molecole effettive (presenti in ogni cella di volume). Ogni elemento i -esimo viene inizializzato con posizione r_i e velocità v_i , come nel LBM, l'evoluzione viene implementata considerando due fasi: propagazione e collisione.

Nella prima, in ogni cella la posizione e la velocità di ogni particella vengono aggiornate a step temporali discreti Δt secondo la relazione continua

$$r'_i = r_i + \Delta t v_i$$

In questa fase le particelle vengono considerate non interagenti. Successivamente avviene la fase di collisione: viene selezionato un numero casuale di particelle da far collidere; la collisione interessa solamente particelle tra loro vicine, trascurando quelle lontane, al fine di considerare interazioni locali. Questa imposizione viene implementata facendo collidere solamente particelle appartenenti alla stessa cella, incluse quelle che si allontanano, dal momento che la probabilità di collisione dipende dall'intensità delle velocità relative tra le varie coppie di particelle che interagiscono. A differenza degli altri algoritmi visti in questa sezione il DSMC ha natura stocastica, non risolvendo le equazioni del moto di Newton, non tiene conto delle traiettorie esatte delle particelle e segue le regole della teoria cinetica, ragion per cui è molto valido per la simulazione di sistemi come i gas diluiti.

3.2.3 Metodo di collisione a più particelle

Il MCPD (Multi Particle Collision Dynamics) ha alla base il metodo DSMC visto in precedenza, con alcune modifiche. La differenza sostanziale è che nel MCPD vengono fatte collidere tutte le molecole e non solo quelle che si trovano in una cella. Nel MCPD si tiene conto della conservazione del numero di particelle N che compone il sistema e si impongono regole di conservazione locali per massa, impulso ed energia; l'energia cinetica delle particelle, tramite il teorema di equipartizione dell'energia, fissa la temperatura del sistema. In questo modo il

metodo è in grado di riprodurre nel limite continuo, le equazioni idrodinamiche e obbedisce al teorema H. Il modello risulta molto efficiente per la simulazione dei fluidi complessi e si integra con gli algoritmi DC, ma soffre della mancanza di invarianza galileiana che pu' essere risolta apportando alcuni accorgimenti alla geometria del sistema, rimedi che si riflettono sui coefficienti di trasporto.

3.3 Bibliografia e letture di approfondimento

4 Lattice Boltzmann Method

L'algoritmo Lattice Boltzmann Method (LBM) è uno dei principali algoritmi computazionali utilizzati in ambito scientifico per la simulazione delle equazioni della fluidodinamica per una svariata classe di fluidi; in particolare risulta di grande aiuto per lo studio dei fluidi complessi e per modellare flussi in mezzi porosi. Tale algoritmo, infatti, è molto utile per lo studio delle geometrie più complesse (come ad esempio pareti che fungono da ostacoli, tubi capillari, diramazioni, etc.) per via del modo in cui esse vengono definite, ossia attraverso semplici reticoli. Esso è sviluppato su scala mesoscopica e può essere isotermico o termico. In particolare esso viene utilizzato per studiare i fenomeni d'interfaccia, la crescita e l'evoluzione dei domini e dei pattern a lunghezze e tempi caratteristici differenti, come ad esempio durante la separazione di fase che si verifica durante la transizione di fase in un sistema ad una componente (ad esempio sistemi liquido-gas) e a due componenti anche detto fluido binario. Un esempio è il fenomeno della decomposizione spinodale: durante la separazione di fase si presentano domini di diverse dimensioni e questo deriva dal fatto che il sistema a tempi differenti, pu' essere soggetto a diversi regimi di evoluzione: il regime idrodinamico inerziale e di quello diffusivo. C'è quindi la presenza di due scale temporali differenti e quindi di differenti lunghezze caratteristiche. La caratteristica principale di questo modello è quella di considerare l'equazione di trasporto di Boltzmann, nota in teoria cinetica e meccanica statistica, discretizzarla, linearizzare l'operatore di collisione in approssimazione BGK (Bhatnagar, Gross, Krook), e farla evolvere su una semplice geometria discreta. Si dimostra che nel limite continuo l'equazione di trasporto così discretizzata, riproduce le equazioni della fluidodinamica.

4.1 Caratteristiche del Lattice Boltzmann Method

4.1.1 Equazione di trasporto di Boltzmann

L'equazione di trasporto di Boltzmann è una nota equazione del moto della teoria cinetica classica con la quale si descrivono i fenomeni di trasporto su scala mesoscopica: si considerano quindi i fenomeni su scale di grandezza piccole rispetto a quelle macroscopiche adottate nella CFD, ma piccole rispetto alle scale molecolari (senza quindi considerare il moto di ogni singola molecola). In questo modo si ottiene una descrizione minuziosa del sistema in esame rimanendo sempre nell'ambito della meccanica classica, trascurando quindi gli effetti quantistici, come il potenziale d'interazione molecolare nelle sue diverse forme, lo spin, e tutti gli effetti quantistici che ne conseguono.

Il sistema che si considera è costituito da un numero N di molecole racchiuse in un volume V , con temperatura sufficientemente alta e densità piccola rispetto

alla distanza media intermolecolare in modo tale che le molecole siano pacchetti d'onda localizzati. Tali condizioni sono verificate quando la lunghezza d'onda di de Broglie di una molecola risulta più piccola della distanza media tra le particelle

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2\pi kT}} \left(\sqrt{\frac{N}{V}} \right)^{1/3} \ll 1$$

L'interazione tra le molecole è descritta da una sezione d'urto σ ; consideriamo il caso di una specie di molecole e supponiamo che le pareti fisiche del volume V siano ideali, ossia che le molecole che urtano su di essa siano riflesse in modo elastico. Si considera quindi una funzione di distribuzione

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

definita in modo tale che

$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p$ = Numero di molecole in d^3r centrato in \mathbf{r} e d^3p centrato in \mathbf{p}

con \mathbf{p} quantità di moto. Di conseguenza l'informazione della presenza di N molecole nel volume V sarà espressa dalla condizione di normalizzazione

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3r d^3p = N$$

La funzione di distribuzione quindi descrive per l'appunto la distribuzione delle molecole nelle varie zone di V ; se il sistema evolve all'equilibrio ci sarà una distribuzione di equilibrio f^0 verso la quale evolverà $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ che, tramite il teorema H di Boltzmann e, risulta essere la distribuzione di Maxwell-Boltzmann.

L'equazione per l'evoluzione della funzione di distribuzione in presenza di una forza esterna risulta essere

$$\left(\partial_t + \frac{\mathbf{P}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{P}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = (\partial_t f)_{coll}$$

dove il termine di destra racchiude le informazioni sull'interazione tra le molecole ed è detto operatore di collisione; esso dipende quindi dalla sezione d'urto. Tralasciando calcoli complicati, si può dire che, considerando collisioni binarie tra le molecole e applicando l'assunzione del caos molecolare, si arriva ad una forma per l'operatore di collisione

$$(\partial_t f)_{coll} = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 \delta^4(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) |T_{fi}|^2 (f'_1 f'_2 - f_1 f_2)$$

dove gli indici 1,2 identificano la molecola 1,2 e il simbolo ' indica il valore dopo una collisione. $|T_{fi}|^2$ è la matrice di transizione che in un certo senso dà il peso alla transizione d'urto che si ha da uno stato iniziale ad uno stato finale; $\delta^4(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i)$ è la delta di Dirac.

Si arriva quindi all'equazione di trasporto di Boltzmann

$$\left(\partial_t + \frac{\mathbf{P}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{P}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int d^3p_2 d^3p'_1 d^3p'_2 \delta^4(\mathbf{P}_f - \mathbf{P}_i) |T_{fi}|^2 (f'_1 f'_2 - f_1 f_2)$$

4.1.2 Caratteristiche principali del LBM

L'algoritmo LBM nel caso di un singolo fluido, secondo il modello originale descritto nel lavoro

M. Swift, E. Orlandini, W. Osborn, and J. Yeomans. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. Physical Review E, 54(5):50415052, november 1996,

si sviluppa in alcuni punti essenziali di seguito descritti:

Discretizzazione dello spazio.

Viene considerata una geometria reticolare in cui sono definiti un passo spaziale Δx e temporale Δt e ad ogni sito del reticolo è associato un set di funzioni di distribuzione di popolazione $\{f_i(\mathbf{x}, t)\}$; a loro volta ogni f_i è associata ad un vettore reticolare e_i . Il numero di vettori reticolari dipende dalla geometria scelta: una delle più utilizzate è rappresentata dal reticolo quadrato idimensionale, denotata D_2Q_9 , con interazione tra primi vicini e secondi vicini. Questa scelta è dettata da ragioni di stabilità numerica; una geometria triangolare, infatti, genera instabilità numerica. I moduli dei vettori reticolari sono (nel caso D_2Q_9)

$e_i = 0$	se	$i = 0$	
$e_i = \frac{\Delta x}{\Delta t} = c$	se	$i = 1, 2, 3, 4$	(primi vicini)
$e_i = 2\sqrt{c}$	se	$i = 5, 6, 7, 8$	(secondi vicini)

Variabili dinamiche e conservazione locale

Le variabili fisiche macroscopiche importanti sono la densità n e l'impulso nu del fluido che sono legate dalle funzioni di distribuzione mediante i momenti di ordine zero e di ordine uno delle f_i stesse

$$n = \sum_i f_i,$$

$$nu_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha}.$$

Assumendo la conservazione locale delle f_i in ogni collisione

$$\sum_i (f_i - f_i^0) = 0$$

$$\sum_i (f_i - f_i^0) e_{i\alpha} = 0$$

viene garantita la conservazione locale della massa e dell'impulso

$$\sum_i f_i^0 = n$$

$$\sum_i f_i^0 e_{i\alpha} = nu_\alpha$$

Ad esse si aggiunge un vincolo rappresentato dal secondo momento delle f_i :

$$\sum_i f_i^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} = P_{\alpha\beta} + nu_\alpha u_\beta$$

indispensabile per una descrizione corretta delle equazioni idrodinamiche nel continuo, dove $P_{\alpha\beta}$ è il tensore di pressione che contiene i contributi della pressione di bulk p_{bulk} e dei termini convettivi. Tramite esso entrano in gioco gli

aspetti termodinamici del modello. f_0 rappresenta la funzione di distribuzione di equilibrio la cui scelta dipende dalla fisica del sistema che si vuol implementare con questo algoritmo di simulazione.

Evoluzione delle f_i

Prendendo in considerazione l'approssimazione a singolo tempo di rilassamento, le f_i evolvono secondo l'equazione di trasporto di Boltzmann

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{f_i - f_i^o}{\tau}$$

Il secondo membro dell'equazione di evoluzione delle f_i rappresenta l'operatore di collisione nell'approssimazione BGK. Tale approssimazione rende lineare l'equazione di evoluzione. L'evoluzione viene effettuata in due step: nella prima consideriamo la fase di collisione, in cui le funzioni di distribuzione che arrivano su uno stesso sito evolvono secondo la seguente equazione

$$f_i^{coll}(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^o(\mathbf{x}, t)}{\tau}$$

nel secondo step si considera la propagazione delle f_i che hanno colliso. Esse si propagano seguendo la seguente equazione

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{coll}(\mathbf{x}, t)$$

La simulazione viene effettuata dopo aver ricavato un'espressione per f_{i0} . Essa viene trovata effettuando un'espansione al secondo ordine nelle velocità macroscopiche u

$$f_i^o = A^\sigma + B^\sigma u_\alpha e_{i\alpha} + C^\sigma \mathbf{u}^2 + D^\sigma u_\alpha u_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta}$$

L'espressione esplicita dei coefficienti che compaiono nell'espansione viene trovata imponendo la condizioni di conservazione, tenendo conto delle proprietà tensoriali dei vettori reticolari. L'indice

σ

indica il valore dei coefficienti a seconda che si tratti dei primi e secondi vicini nel reticolo in esame

$$\sigma = 0 \text{ se } i = 0$$

$$\sigma = 1 \text{ se } i = 1, 2, 3, 4$$

$$\sigma = 1 \text{ se } i = 5, 6, 7, 8$$

Limite di continuità

Effettuando una espansione in serie di Taylor al secondo ordine nelle derivate del primo membro dell'equazione di trasporto di Boltzmann discreta vengono riprodotte nel continuo le equazioni di continuità e di Navier-Stokes (e di convezione-diffusione nel caso di miscele o di fluidi multifase).

Una peculiarità del modello LBM è che le proprietà termodinamiche del sistema fisico possono essere ricavate tramite un'energia libera che minimizzata riproduce le caratteristiche del sistema nello stato di equilibrio.

Nel Caso di fluidi a più componenti o di fluidi multifase è necessario considerare i gradienti di pressione lungo l'interfaccia. Una delle soluzioni originarie è stata quella di considerare funzioni di distribuzione di popolazione da far evolvere $\{g_i(\mathbf{x}, t)\}$; anch'esse sullo stesso reticolo, ma i risultati hanno mostrato instabilità numeriche. Un approccio differente ma più soddisfacente è quello di trattare l'equazione di convezion-diffusione con le tecniche CFD, generalmentediscretizzandola con uno schema alle differenze finite; si tratta del cosiddetto LBM Ibrido. Un modello LBM Ibrido è stato trattato da me durante il mio lavoro di tesi, la cui descrizione la si può consultare nell'apposita sezione del sito o nella presentazione del lavoro di laurea.

4.2 LBM ad una componente

Il Lattice Boltzmann Method ad una componente ha lo scopo di risolvere le equazioni di continuità e di Navier-Stokes per un singolo fluido, quindi un fluido ad una componente. Come descritto nelle caratteristiche principali si considera l'equazione di trasporto di Boltzmann in approssimazione lineare BGK per una sola funzione di distribuzione. La natura del moto e del fluido sono contenute nelle grandezze termodinamiche d'interesse: il tensore di pressione, ad esempio, conterrà gradienti di concentrazione se il fluido è comprimibile, informazione contenuta anche nell'espansione della funzione di distribuzione di equilibrio con un termine tensoriale.

4.3 LBM a due componenti

Il Lattice Boltzmann Method a due componenti viene utilizzato nella descrizione di fluidi binari, per l'appunto a due componenti. Questo sistema sarà caratterizzato da due funzioni di distribuzione f_i e g_i dal momento che nella miscela ci sono due densità indipendenti. In particolare, l'espansione di f_i^0 sarà presente un termine tensoriale $G_{\alpha\beta}$ non presente nell'espansione di g_i^0 (in realtà la sua presenza è ininfluenza in quanto il termine si annulla). La sua presenza assicura i contributi dei gradienti di pressione, come si può evincere dalla sua forma esplicita.

4.3.1 Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Generalità

Prendiamo ora in esame il modello descritto nel lavoro

M. Swift, E. Orlandini, W. Osborn, and J. Yeomans. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Physical Review E*, 54(5):50415052, november 1996,

modello che nel tempo ha subito le sue modifiche atte ad apportarne miglioramenti per ciò che concerne la stabilità numerica. Tuttavia è una base per capire le peculiarità del LBM.

Dal momento che nella miscela abbiamo due densità indipendenti bisogna considerare, due funzioni di distribuzione di Boltzmann, f_i e g_i , da far evolvere in step temporali discreti nello spazio discretizzato. La geometria dello spazio è di tipo reticolare; in particolare si considera un reticolo quadrato costituito da nove siti e denotato D_2Q_9 : vengono definite nove velocità reticolari

$$\{\mathbf{e}_i\}_{i=0,\dots,8}$$

che puntano su ogni sito del reticolo eccetto la velocità al centro del reticolo \mathbf{e}_0 che rappresenta lo stato di quiete. Se Δx è lo step spaziale, ossia la distanza non diagonale tra due siti, e Δt lo step temporale, allora $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ e le velocità reticolari possono essere scritte come segue

$$\mathbf{e}_0(0, 0),$$

$$\mathbf{e}_1(c, 0), \mathbf{e}_2(0, c), \mathbf{e}_3(-c, 0), \mathbf{e}_4(0, -c),$$

$$\mathbf{e}_5(c, c), \mathbf{e}_6(-c, c), \mathbf{e}_7(-c, -c), \mathbf{e}_8(c, -c)$$

con moduli

$$e_i = \begin{cases} 0 & \text{se } i = 0 \\ c & \text{se } i = 1, 2, 3, 4 \text{ (primi vicini)} \\ 2\sqrt{c} & \text{se } i = 5, 6, 7, 8 \text{ (secondi vicini)} \end{cases}$$

I vettori reticolari soddisfano delle relazioni tensoriali che saranno utili in seguito; esse sono:

$$\begin{aligned} \sum_i e_{i\alpha} &= 0 & + & 0 \\ \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} &= 2c^2 \delta_{\alpha\beta} & + & 4c^2 \delta_{\alpha\beta} \\ \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} &= 0 & + & 0 \\ \sum_i e_{i\alpha} e_{i\beta} e_{i\gamma} e_{i\delta} &= 2c^4 \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} & + & (4c^4 \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} - 8c^4 \delta_{\alpha\beta\gamma\delta}) \end{aligned}$$

dove

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma};$$

nelle proprietà tensoriali dei vettori reticolari vengono distinti i contributi dei primi vicini e dei secondi vicini. Si osserva che la sommatoria dei prodotti dispari si annulla: questo dipende dall'invarianza per inversioni spaziali

$$\mathbf{e}_i \longrightarrow -\mathbf{e}_i$$

per via della quale si verificano la terza e la quarta proprietà tensoriale. La discretizzazione si riflette sulle funzioni di distribuzione: anch'esse vengono discretizzate, ragion per cui su ogni sito vengono definiti due set di funzioni di distribuzione $\{f_i\}$, $\{g_i\}$ che evolvono secondo l'equazione di Boltzmann a singolo tempo di rilassamento

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} (f_i - f_i^0)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i - g_i^0),$$

dove f_i^0 e g_i^0 sono le funzioni di distribuzione all'equilibrio, mentre τ_f e τ_g sono i rispettivi tempi di rilassamento che, come vedremo in seguito, sono legati rispettivamente alla viscosità e alla diffusività del sistema. L'approssimazione di singolo tempo di rilassamento (anche detta approssimazione BGK) nella discretizzazione dell'equazione di trasporto di Boltzmann porta ad un operatore di collisione discretizzato linearmente e quindi ad equazioni di evoluzione lineari.

Le variabili fisiche d'interesse

n_A, n_B densità delle due componenti della miscela,
 $n = n_A + n_B \equiv$ densità totale,
 $\varphi = n_A - n_B \equiv$ Concentrazione (o parametro d'ordine),
 $\mathbf{u} \equiv$ velocità media del fluido,

sono legate alle funzioni di distribuzione tramite i vincoli

$$n = \sum_i f_i$$

,

$$nu_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha}$$

,

$$\varphi = \sum_i g_i$$

e dal momento che si assume per queste tre quantità una conservazione locale in ogni collisione

$$\sum_i (f_i - f_i^0) = 0$$

,

$$\sum_i (f_i - f_i^0) e_{i\alpha} = 0$$

,

$$\sum_i (g_i - g_i^0) = 0$$

i vincoli precedenti valgono anche per le funzioni di distribuzione all'equilibrio

$$n = \sum_i f_i^0$$

,

$$nu_\alpha = \sum_i f_i^0 e_{i\alpha}$$

,

$$\varphi = \sum_i g_i^0$$

Affinchè nel limite continuo siano riprodotte fedelmente le equazioni dell'idrodinamica è opportuno definire ulteriori vincoli, rappresentati dai momenti di secondo ordine delle f_i^0 e g_i^0 e del primo ordine di g_i^0

$$\sum_i f_i^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} = P_{\alpha\beta} + nu_\alpha u_\beta$$

$$\sum_i g_i^0 e_{i\alpha} = \varphi u_\alpha$$

,

$$\sum_i g_i^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} = c^2 \mu \Gamma \delta_{\alpha\beta} + \varphi u_\alpha u_\beta$$

dove $P_{\alpha\beta}$ è il tensore di pressione, μ il potenziale chimico, Γ è un fattore che appare nella costante di diffusione del sistema.

4.3.2 Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Funzioni di distribuzione d'equilibrio

Dal momento che l'equazione di Navier-Stokes ha una non linearità del secondo ordine è sufficiente considerare un'espansione di f_i^0 e g_i^0 al secondo ordine nelle velocità. Supponendo inoltre che le due componenti della miscela abbiano la stessa densità e viscosità si conclude che esse rilassano istantaneamente con la stessa velocità, quindi

$$f_i^0 = A^\sigma + B^\sigma e_{i\alpha} u_\alpha + C^\sigma u^2 + D^\sigma (e_{i\alpha} u_\alpha)^2 + G_{\alpha\beta}^\sigma e_{i\alpha} e_{i\beta}$$

$$g_i^0 = H^\sigma + J^\sigma e_{i\alpha} u_\alpha + K^\sigma u^2 + Q^\sigma (e_{i\alpha} u_\alpha)^2$$

Nell'espansione l'indice σ denota i coefficienti corrispondenti alle velocità di modulo 0, c , $c\sqrt{2}$; in particolare

$$\sigma = \begin{cases} 0 & \text{se } i = 0 \\ 1 & \text{se } i = 1, 2, 3, 4 \text{ (primi vicini)} \\ 2 & \text{se } i = 5, 6, 7, 8 \text{ (secondi vicini)} \end{cases}$$

Imponendo la conservazione locale ed i momenti al secondo ordine per le funzioni di distribuzione di equilibrio si ottengono i coefficienti incogniti. Ad esempio, imponendo la condizione $\sum_i f_i^0 = n$ si ottiene

$$\sum_i \left[A^\sigma + B^\sigma e_{i\alpha} u_\alpha + C^\sigma u^2 + D^\sigma (e_{i\alpha} u_\alpha)^2 + G_{\alpha\beta}^\sigma e_{i\alpha} e_{i\beta} \right] = n$$

Applicando le proprietà tensoriali per i vettori reticolari, dopo aver sommato sull'indice i si ha l'annullamento dei termini in cui compaiono i coefficienti B^σ ; esplicitando gli indici σ si arriva all'espressione seguente

$$\begin{aligned} n = \sum_i (A^0 + A^1 + A^2) &+ \sum_i (B^0 e_{i\alpha} + B^1 e_{i\alpha} + B^2 e_{i\alpha}) u_\alpha + \\ &+ \sum_i (C^0 + C^1 + C^2) u^2 + \\ &+ \sum_i \left[(D^0 + D^1 + D^2) (e_{i\alpha} u_\alpha)^2 \right] + \\ &+ \sum_i \left(G_{\alpha\beta}^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} + G_{\alpha\beta}^1 e_{i\alpha} e_{i\beta} + G_{\alpha\beta}^2 e_{i\alpha} e_{i\beta} \right) \end{aligned}$$

Procedendo allo stesso modo per l'imposizione degli altri vincoli si ottiene un sistema di otto equazioni in dodici incognite rappresentate dai coefficienti. Il sistema si risolve imponendo alcune condizioni, con i seguenti risultati

$A^0 = n - 20A^2$	$B^0 = 0$	$C^0 = -\frac{2n}{3c^2}$	$D^0 = 0$	$G_{\alpha\beta}^0 = 0$
$A^1 = 4A^2$	$B^1 = 4B^2$	$C^1 = 4C^2$	$D^1 = 4D^2$	$G_{\alpha\beta}^1 = 4G_{\alpha\beta}^2$
$A^2 = \frac{P_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta}}{24c^2}$	$B^2 = \frac{n}{12c^2}$	$C^2 = -\frac{n}{24c^2}$	$D^2 = \frac{n}{8c^4}$	$G_{\alpha\beta}^2 = \frac{P_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \text{tr}(P) \delta_{\alpha\beta}}{8c^4}$

Allo stesso modo per la funzione di distribuzione di equilibrio g_i^0 si ottiene

$H^0 = \varphi - 20H^2$	$J^0 = 0$	$K^0 = -\frac{2\varphi}{3c^2}$	$Q^0 = 0$
$H^1 = 4H^2$	$J^1 = 4J^2$	$K^1 = 4K^2$	$Q^1 = 4Q^2$
$H^2 = \frac{\Gamma\mu}{12}$	$J^2 = \frac{\varphi}{12c^2}$	$K^2 = -\frac{\varphi}{24c^2}$	$Q^2 = \frac{\varphi}{8c^4}$

4.3.3 Modello 2-dim a 9 velocità isoterma: Limite continuo

L'algoritmo LBM risolve le equazioni dell'idrodinamica, verificando l'esistenza di un limite continuo delle equazioni di evoluzione per le funzioni di distribuzione riproducendo le equazioni di continuità, di Navier-Stokes e di convezione-diffusione. Il punto di partenza è quello di considerare uno sviluppo in serie di Taylor dei membri di sinistra delle equazioni di evoluzione

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} (\partial_t + e_{i\alpha} \partial_\alpha)^k f_i = -\frac{f_i - f_i^0}{\tau_f}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} (\partial_t + e_{i\alpha} \partial_\alpha)^k g_i = -\frac{g_i - g_i^0}{\tau_g}$$

procedendo quindi alla risoluzione in modo ricorsivo con il metodo delle approssimazioni successive, fermandoci ai termini del secondo ordine. Evitando l'esposizione di calcoli lunghi e laboriosi, si può affermare che le equazioni di continuità, di Navier-Stokes e di convezione-diffusione vengono riprodotte trascurando alcuni termini spuri e considerando

$$\nu = c^2 \Delta t \frac{2\tau_f - 1}{6} \equiv \text{viscosità cinematica}$$

$$\zeta = \nu \left(2 - \frac{3}{c^2} \frac{dp^{bulk}}{dn} \right) \equiv \text{viscosità di bulk o seconda viscosità}$$

$$D = \Gamma \left(\tau_g - \frac{1}{2} \right) c^2 \Delta t \equiv \text{costante di diffusione.}$$

I termini spuri che si presentano nel limite continuo influiscono nella stabilità numerica; i modelli LBM più recenti evitano il presentarsi di tali termini inserendo nell'equazione di evoluzione dei termini di forza.

4.4 LBM con termini di forza

Allo scopo di risolvere i problemi di stabilità numerica viene introdotto un nuovo termine nell'equazione di trasporto di Boltzmann discretizzata, per l'appunto un termine di forza, il cui scopo è quello di inglobare termini che sarebbero altrimenti trascurati in uno schema LBM classico. Il termine di forza può rappresentare forze di volume o gravitazionali, a seconda della natura del problema in esame e può avere diverse forme funzionali. Una panoramica sui termini di forza viene fatta nella review di Ladd Verberg (si veda bibliografia). Nel mio lavoro di tesi (LBM ibrido per un fluido binario) sono stati studiati due tipi di termini di forza di volume che differiscono l'uno dall'altro sia per la forma che per l'incidenza che hanno nel modello. Da uno sviluppo multiscala, infatti, si evince un'altra importante differenza: uno appare al secondo ordine nel numero di Knudsen, l'altro al primo ordine, influenzando diversamente il rilassamento verso l'equilibrio delle funzioni di distribuzione. Questo risultato ha portato notevoli miglioramenti alla stabilità numerica del modello.

4.4.1 Termini di Forza nell'equazione di trasporto discretizzata

Gli studi recenti rivolti al LBM si sono focalizzati anche nel ricercare soluzioni utili per ridurre fenomeni spuri e per ampliare il range di stabilità per le varie versioni del modello. In uno di questi accorgimenti ormai adottato dalla comunità scientifica è quello di aggiungere nell'equazione di trasporto di Boltzmann discretizzata un termine di forza: la sua presenza ha l'utilità di inglobare termini spuri che si presentano nel limite continuo permettendo di riprodurre fedelmente le equazioni della fluidodinamica nel continuo. L'equazione di trasporto di Boltzmann discretizzata risulta essere quindi

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\Delta t F_i - \Delta t \frac{f_i - f_i^0}{\tau_f}$$

dove risulta il termine di forza

$$\Delta t F_i$$

la cui forma dipende dal caso di studio: esso può rappresentare forze esterne di densità dovute alla presenza di gradienti pressione oppure la forza gravitazionale. Una possibile forma per il termine di forza può essere

$$F_i = \frac{\mathbf{F}}{m} \partial_{\mathbf{e}_i} f_i;$$

assumendo che localmente la funzione di distribuzione f_i sia prossima all'equilibrio

$$\partial_{\mathbf{e}_i} f_i \simeq \partial_{\mathbf{e}_i} f_i^0$$

segue che essa approssima quella all'equilibrio che, nel caso in esame, è una distribuzione di Maxwell-Boltzmann

$$f_i^0 = n \left(\frac{m}{2\pi KT} \right)^{\frac{d}{2}} e^{-m \frac{(\mathbf{e}_i - \mathbf{u})^2}{2KT}}$$

dove T è la temperatura del sistema, K è la costante di Boltzmann e d è la dimensionalità del sistema. Ponendo $c^2 = \frac{3KT}{m}$ ed effettuando la derivata rispetto ad \mathbf{e}_i della Maxwell-Boltzmann, dalla relazione

$$\partial_{\mathbf{e}_i} f_i \simeq \partial_{\mathbf{e}_i} f_i^0$$

si ottiene

$$\partial_{\mathbf{e}_i} f_i \simeq -\frac{3}{c^2} (\mathbf{e}_i - \mathbf{u}) f_i^0$$

che porta alla seguente forma dell'equazione di trasporto discretizzata

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{3}{c^2} \Delta t f_i^0 (\mathbf{e}_i - \mathbf{u}) \cdot \frac{\mathbf{F}}{m} - \Delta t \frac{f_i - f_i^0}{\tau_f}.$$

L'espressione di \mathbf{F} deve essere scelta in modo tale da riprodurre nel limite continuo le equazioni di continuità e di Navier-Stokes; per problemi diffusivi in cui risultano gradienti di pressione essa risulta

$$\frac{\mathbf{F}}{m} = \frac{c^2}{n} \nabla(-p_c) + \frac{c^2}{n} \kappa \varphi \nabla(\nabla^2 \varphi)$$

con

$$p_c = -\frac{a}{2}\varphi^2 + \frac{3}{4}b\varphi^4.$$

Effettuando il limite continuo tramite un'espansione multiscala nel numero di Knudsen si dimostra che il termine di forza così ottenuto è di ordine due nel numero di Knudsen. Questa osservazione è molto importante in quanto scegliendo un termine di forza alternativo, come vedremo in seguito, si ottengono risultati migliori a livello di stabilità numerica.

Possiamo infatti considerare come termine per il termine di forza la seguente espressione

$$F_i = \omega_i \left[A + \frac{B_\alpha e_{i\alpha}}{c_s^2} + \frac{C_{\alpha\beta} (e_{i\alpha} e_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \right]$$

dove per il modello D_2Q_9

$$\omega_o = 4/9, \omega_{1-4} = 1/9, \omega_{5-8} = 1/36, c_s = c/\sqrt{3}$$

$A, B_\alpha, C_{\alpha\beta}$, sono funzioni di \mathbf{F} (la cui espressione è la stessa di quella data pocanzi) e le loro espressioni si esplicano effettuando il limite continuo.

Con questo nuovo termine di forza vengono implementati ulteriori vincoli

$$\sum_{i=0}^8 F_i = A, \sum_{i=0}^8 e_{i\alpha} F_i = B_\alpha, \sum_{i=0}^8 e_{i\alpha} e_{i\beta} F_i = c_s^2 A \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} [C_{\alpha\beta} + C_{\beta\alpha}]$$

e viene ridefinito il momento di ordine uno

$$nu_\alpha^* = \sum_i f_i e_{i\alpha} + m\Delta t F_\alpha \Rightarrow nu_\alpha^* = nu_\alpha + m\Delta t F_\alpha.$$

Dai calcoli (che qui traslasciamo) risulta

$$A = 0, \mathbf{B} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \mathbf{F}, \mathbf{C} = \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) \mathbf{u}^* \mathbf{F} - \mathbf{F} \mathbf{u}^*.$$

Dall'espansione multiscala il termine di forza risulta di ordine uno nel numero di Knudsen. Questa espressione per il termine di forza porta a risultati migliori nel caso di un sistema caratterizzato da un fluido binario o multifase.

4.5 Applicazioni principali del LBM

Il Modello LBM trova applicazione in svariati campi della fluidodinamica e idrodinamica, come descritto inizialmente; il suo limite è quello di non essere stabile nel caso di numeri di Mach alti. Recenti ricerche cercano di sviluppare LBM Ibridi in cui si tiene conto della viscosità artificial.

Vi sono LBM che tengono conto anche di variazioni di temperatura del sistema fluidodinamico, nei quali si implementano le equazioni del calore e funzioni di distribuzione di popolazione che rappresentano localmente l'entropia del sistema.

Gli algoritmi LBM vengono anche implementati per lo studio della traslocazione del DNA (biopolimeri) in mezzi porosi o anche per lo studio delle reti di traffico urbano, come mostrato nei seguenti articoli:

J-P. Meng, Y-H. Qian, S-Q. Dai, Modelling of urban traffic networks with Lattice Boltzmann Model, EPL, 81 (2008) 44003

S. Succi, S. Melchionna, M. Fyta, E. Kaxiras, Exploring DNA traslocation throught a nanopore via a multiscale Lattice-Boltzmann Molecula-Dynamics methodology, arXiv:physics/0702180 [physics.bio-ph] (2007)

4.5.1 Esempi di Miscele Binarie Isoterme

Goccia immersa in un fluido immiscibile

Separazione di fase (immagini in sequenza)

Immagini elaborate tramite IDL

4.5.2 Lattice Boltzmann Method Termico - Separazione di fase Fluido non ideale

Bianco ? Nero = Densità massima ? Densità minima

Fonte: G. Gonnella, A. Lamura, and V. Sofonea, Lattice Boltzmann Simulation of Thermal Nonideal Fluids - Phys. Rev. E 76, 036703 (2007). Immagini elaborate tramite IDL

4.6 Bibliografia e letture di approfondimento

4.6.1 Articoli, Libri ed altro

Articoli

N. Stella. Schemi numerici per la riduzine delle velocità spurie nei metodi reticolari di Boltzmann. Tesi di laurea.

P. Bhatnagar, E. Gross, and M. Krook. Physical review, 94:511, 1954.

F. Higuera, S.Succi, and R.Benzi. Europhys. Lett., 30:329364, 1989.

M. Swift, E. Orlandini, W. Osborn, and J. Yeomans. Lattice boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. Physical Review E, 54(5):50415052, November 1996.

A. Lamura, G. Gonnella and J.M. Yeomans, A Lattice Boltzmann Model of Ternary Fluid Mixtures. Europhys. Lett. 45, 314 (1999).

A. Lamura and G. Gonnella, Lattice Boltzmann Simulations of Segregating Binary Fluid Mixtures in Shear Flow, Physica A 294, 295 (2001).

A. Xu, G. Gonnella and A. Lamura, Phase Separation of Incompressible Binary Fluids with Lattice Boltzmann Methods, Physica A 331, 10 (2004).

A. Xu, G. Gonnella and A. Lamura, Simulations of Complex Fluids by Mixed Lattice Boltzmann - Finite Difference Methods, Physica A 362, 42 (2006).

G. Amati, F. Massaioli, G. Gonnella, A. Xu, and A. Lamura, Three-dimensional Lattice Boltzmann Model Results for Complex Fluids Ordering, Int. J. Mod. Phys. C 12, 1819 (2005).

G. Gonnella, A. Lamura, and V. Sofonea, Lattice Boltzmann Simulation of Thermal Nonideal Fluids, Phys. Rev. E 76, 036703 (2007).

A. Keating, J. Beedy and R. Shock. Lattice Boltzmann Simulations of the DLR-F4, DLR-F6 and Variants. 46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit 7 - 10 January 2008, Reno, Nevada.

Libri

Succi S. (2001). The lattice Boltzmann Equation: for Fluid Dynamics and Beyond. Series Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford New York: Oxford University Press

4.6.2 Reviews

S. Chen and G. Dolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. Annual Review of Fluid Mechanics, 9:345, 1998.

A. Ladd and R. Verberg. Lattice-Boltzmann Simulation of particle-Fluid Suspension. J. Stat. Physics, 104:11911251, 2001.

B. Dünweg and A. J. C. Ladd. Lattice Boltzmann Simulation of soft matter systems. ArXiv e-prints, arXiv:0803.2826v2 [cond-mat.soft] 2008

5 Intoduzione alla teoria del Caos e teorie frattali

Spesso la parola caos fa pensare impulsivamente ad una situazione o, per meglio dire, un sistema in cui vi è disordine completo, non controllabile e non predicibile in tempi futuri. Possiamo pensare ai mercati finanziari: osservando i grafici sugli andamenti degli indici di borsa o dei titoli azionari mostrati da televisione e giornali possiamo notare degli andamenti, come dire, caotici, poco o per nulla prevedibili. Possiamo pensare anche al caos mentale generato dai nostri pensieri che vagano incontrollati. Queste considerazioni portano a definizioni non corrette di caos, almeno in termini scientifici. Molti ricercatori infatti si sono cimentati nel tempo nella ricerca di ordini nascosti nel caos, studi che con il tempo hanno maturato molti risultati dando vita ad una teoria del caos.

Un esempio di fenomeno caotico può essere rappresentato dal problema della crescita della popolazione dei conigli studiato in tempi lontani da Leonardo da Pisa (meglio noto come Fibonacci). Un esempio importante di studio di fenomeni caotici è quello condotto da Edward Lorenz sulla meteorologia il quale trovò una importantissima proprietà dei sistemi caotici: essi sono fortemente dipendenti dalle condizioni iniziali. Successivamente questa caratteristica è diventata in un certo senso la definizione basilare di sistema caotico.

Un sistema caotico è caratterizzato dalla non linearità della sua evoluzione. Facciamo qualche esempio per chiarire meglio questo concetto basilare. Un sistema è lineare quando è possibile stabilire una proporzionalità tra causa ed effetto. Un esempio è rappresentato dalla molla: se essa viene tirata (causa) viene alterato il suo equilibrio e di conseguenza c'è una forza di richiamo verso la sua posizione iniziale (effetto) che tende a ripristinare l'equilibrio. L'intensità di questa forza è proporzionale allo spostamento dalla posizione iniziale della molla (di riposo) dal momento che è stata tirata. La formalizzazione matematica di questo fenomeno è nota come Legge di Hooke.

La non linearità entra in gioco quando questa proporzionalità viene meno. Un esempio classico è rappresentato dai fenomeni fluidodinamici in cui sono presenti gli effetti della turbolenza. Questi fenomeni sono descritti da equazioni alle derivate parziali non lineari la cui risoluzione analitica è possibile solamente in alcuni casi particolari, ragion per cui la ricerca delle loro soluzioni viene effettuata per via numerica tramite l'ausilio di elaboratori elettronici. Nei fenomeni non lineari è possibile definire un limite in cui si instaura il regime caotico.

Una teoria strettamente legata al caos è la teoria frattale: essa ha lo scopo di studiare a fondo le geometrie complesse e senza criterio. La geometria frattale trova gli ordini nascosti in quei sistemi caratterizzati da geometrie le cui dimensioni non sono intere. Facciamo un esempio: quando vediamo un sasso dalla forma irregolare tendiamo ad associarlo ad una pallina, ossia un oggetto a tre dimensioni. Questo perchè non sappiamo dargli una dimensione ben definita e per non incorrere in crisi sulla natura delle cose approssimiamo la sua dimensione. Quindi siamo portati a classificare gli oggetti come: oggetti unidimensionali (linee, dimensione = 1) bidimensionali (aree, dimensione=2) tridimensionali (volumi, dimensione = 3). Tramite la teoria frattale si può studiare l'oggetto più a fondo e dargli una dimensione non intera. Il sasso dell'esempio precedente non avrà più dimensione 3 bensì una dimensione non intera, compresa tra 2 e tre. La teoria frattale ha tuttavia applicazioni ben più complesse: un esempio può essere l'applicazione di essa ai grafici complicati degli indici di borsa. Un ringraziamento sentito e doveroso va al mio professore di tesi, Prof. G. Gonnella (Università degli studi di Bari e INFN sez. Bari), autore della dispensa di Lezioni di fisica non lineare scritta per i suoi alunni, dalla quale prendo spunto per argomentare la teoria del caos.

5.1 Leggi Evolutive

Modelli molto semplici a livello formale di sistemi dinamici sono i modelli evolutivi biologici, come quelli che descrivono le dinamiche di crescita di una popolazione di una certa specie. Le semplici relazioni matematiche che li descrivono possono presentare, infatti, dei comportamenti complessi nei quali si può instaurare entro certi limiti il regime caotico.

La loro dinamica di crescita temporale può essere studiata a tempi discreti, trascurando la sovrapposizione delle generazioni (ad. es. padre, figlio, etc.). In questo modo tra una generazione e la successiva intercorre un tempo discreto Δt che per semplicità può essere posto pari ad 1.

Una relazione che considera la variabile temporale a valori discreti viene detta mappa. Nei sistemi in cui possono instaurarsi dinamiche caotiche ha la sua importanza fondamentale una particolare mappa, detta Mappa Logistica, che ha un certo carattere di universalità per i sistemi caotici. Essa è rappresentata dalla seguente relazione

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$$

e come vedremo a breve, ad essa può essere ricondotta la legge di evoluzione di una popolazione, con la quale si spiegheranno anche i significati delle variabili e coefficienti. Nei post successivi saranno descritte le caratteristiche della mappa logistica.

Modelli evolutivi

Un semplice modello evolutivo è quello introdotto anni addietro da Leonardo da Pisa, meglio noto con il nome Fibonacci, il quale cercò di studiare la crescita di una popolazione di conigli. Egli partì dalla semplice considerazione che in un certo periodo temporale t un numero di coppie di conigli si riproducano, dando luogo al tempo $t+1$ ad una nuova generazione. Se N_t rappresenta la popolazione di conigli al tempo t , la generazione successiva N_{t+1} sarà legata alla precedente

tramite una certa relazione

$$N_{t+1} = f(N_t)$$

dove f rappresenta la forma funzionale caratteristica del sistema che si vuol studiare. Fibonacci nel suo studio trovò che la relazione

$$f(N_t) = N_t + N_{t-1}$$

ossia la popolazione al tempo $t+1$ dipende dalla somma delle popolazioni al tempo t e $t-1$. Questa non è altro che la nota successione di Fibonacci, che dà luogo ai numeri di Fibonacci

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \dots$$

I modelli evolutivi successivi hanno cercato di risolvere alcuni problemi di carattere concettuale, come considerare certi limiti alla crescita dipendenti dalla quantità di cibo a disposizione e altri fattori che rendono più realistiche le dinamiche evolutive.

Un modello che tiene conto di questi fattori è il ben noto modello evolutivo di Verhulst

$$\frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K} \right).$$

Con esso si può descrivere, ad esempio, l'evoluzione di una popolazione d'insetti:

il fattore r è, ad esempio, il numero di uova che in media un insetto depone in un anno mentre il fattore

$$\left(1 - \frac{N}{K} \right)$$

descrive l'autolimitazione del sistema. Se infatti $N=K$ si ha variazione temporale nulla. K è quindi un numero critico, oltre il quale non c'è più crescita; questo può ad esempio capitare quando non c'è più cibo.

Possiamo allora considerare il modello di Verhulst a tempo discreto (indicando la variabile t con n)

$$N_{n+1} = rN_n \left(1 - \frac{N_n}{K} \right)$$

nel quale possiamo dividere ambo i membri per K e porre $x_n = \frac{N_n}{K}$ ottenendo

$$x_n = rx_n(1 - x_n)$$

che è proprio la mappa logistica di cui si è dato un accenno inizialmente.

Tale modello è stato ulteriormente ampliato considerando la diffusione di una specie per via dei fenomeni migratori. Si tratta del modello di Fisher-Kolmagoroff che introduce nel modello di Verhulst il termine diffusivo

$$\frac{dN}{dt} = rN \left(1 - \frac{N}{K} \right) + D\nabla^2 N$$

con D costante di diffusione.

5.2 Mappa Logistica - Introduzione

La mappa logistica è definita dalla seguente relazione

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$$

definita nell'intervallo $[0, 1]$ per $1 \leq r \leq 4$. Questa definizione assicura che le traiettorie rappresentative della mappa siano sempre confinate nell'intervallo $[0, 1]$; nel caso $r=4$ infatti questo confinamento verrebbe meno: se partiamo da un valore iniziale $x_0 = 1/2$ si avrebbe

$$x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty.$$

Al variare di r nell'intervallo di definizione della mappa logistica si possono illustrare tutti i regimi dinamici pre e post caos.

Solitamente si può scrivere la relazione funzionale della mappa nella forma generale

$$x_{n+1} = M(x_n)$$

e per una mappa iterata m volte

$$x_{n+m} = M^m(x_n) \equiv M(M^{m-1}(x_n)).$$

Un valore particolare di r per la mappa logistica è $r=4$: per tale valore la mappa logistica è riconducibile ad una mappa particolare detta mappa a tenda, il cui studio è molto utile per evidenziare alcune proprietà dei sistemi dinamici. La sua definizione è

$$x_{n+1} = 1 - 2|x_n - 1/2|$$

con

$$0 \leq x_n \leq 1$$

dove la scelta dell'intervallo di definizione assicura l'azione della mappa in un intervallo chiuso e limitato. Si dimostra che la mappa a tenda, o la mappa logistica per $r=4$, rappresenta un sistema caotico. Un'altra proprietà importante evidenziata dalla mappa a tenda è quella di rimanere confinata nell'intervallo $[0, 1]$ (quindi limitata) tramite la sua azione di stiramento e ripiegamento: la prima consiste in uno stiramento dell'intervallo $[0, 1]$ di una lunghezza doppia rispetto a quella iniziale. Successivamente l'operazione di piegatura dell'intervallo su se stesso riporta ad un intervallo della stessa lunghezza di quello iniziale.

5.3 Alcune definizioni importanti

Prima di studiare le caratteristiche delle mappe è opportuno conoscere alcune definizioni utili per la comprensione dei concetti che verranno trattati.

Consideriamo una legge dinamica nel continuo rappresentata dall'equazione differenziale

$$\dot{x} = M(x)$$

$$x(t_0) = x_0$$

dove $M(x)$ funzione reale a valori reali non dipendente in modo esplicito dal tempo. La soluzione dell'equazione differenziale sarà una funzione $x(t)$

Lo spazio che rappresente l'insieme dei possibili valori di x è detto spazio delle fasi; $M(x)$ è un campo che genera il flusso delle x 'trasportate' dal tempo iniziale al tempo t ; L'insieme delle $x(t)$ rappresenta un'orbita e rappresenta tutti quei punti delle linee di flusso, o per meglio dire, tutti quei punti che rappresentano lo stato del sistema dinamico nel tempo.

Un punto \bar{x} è un punto fisso per $M(x)$ se $M(\bar{x}) = \bar{x}$;

Un punto x_s è detto stazionario se $f(x_s) = 0$, cioè se rendono nulla la derivata \dot{x} ;

Sia $M^m(x)$ una mappa iterata m -volte; diremo che x è un punto periodico di periodo N se

$$M^m(x) = x$$

La mappa corrispondente prende allora il nome di mappa periodica e il punto periodico rappresenta un punto fisso per la mappa iterata m -volte

$$M^m(x).$$

5.4 Studio della mappa logistica - Regime non caotico

Analizziamo ora la mappa logistica al variare di r , vedendo i diversi comportamenti dinamici non caotici. Consideriamo l'equazione

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n)$$

con $x_{n+1} = x_n = M(x)$ i cui punti fissi risultano essere

$$x_{f1} = 0 \text{ e } x_{f2} = 1 - \frac{1}{r}$$

In generale la stabilità dei punti fissi la si può studiare effettuando il valore assoluto della derivata della mappa $|dM/dx|$ e studiando il segno:

$$|dM/dx|_{x=x_f} > 1 \Rightarrow x_f \text{ Instabile}$$

$$|dM/dx|_{x=x_f} < 1 \Rightarrow x_f \text{ Stabile}$$

Studiamo il caso $r > 1$; in particolare analizziamo il caso particolare $r = 2,6$. Il punto fisso $x_{f1} = 0$ è un punto fisso stabile o repulsore in quanto scegliendo una condizione iniziale x_0 prossima al valore $x_{f1} = 0$ e iterando la mappa, il punto x_n si allontanerà da $x_{f1} = 0$, come si può osservare dalla figura seguente
inserire figura

Il punto fisso $x_{f2} = 1 - \frac{1}{r}$ è invece un punto fisso stabile o attrattore in quanto tutte le traiettorie che partono nelle sue vicinanze tendono a ritornare su di esso. La figura seguente illustra in generale il comportamento generale della mappa logistica per $r = 2,6$. La retta bisettrice interseca la curva nei punti fissi e la sua funzione è quella di determinare graficamente la stabilità dei punti fissi.

In generale $x_{f1} = 0$ risulta essere instabile per tutti i valori di r mentre $x_{f2} = 1 - \frac{1}{r}$ risulta essere stabile o un attrattore solo per $1 < r < 3$.

Si dimostra che nell'intervallo di valori $1 < r < 3$ non ci sono orbite con periodo maggiore di uno, per cui per ogni condizione iniziale x_0 compresa nell'intervallo di valori $0 < x_0 < 1$ si avranno traiettorie che si avvicinano all'attrattore $x_{f2} = 1 - \frac{1}{r}$. In questo caso l'intervallo $[0, 1]$ è detto **Bacino di attrazione** per l'attrattore $x_{f2} = 1 - \frac{1}{r}$.

5.5 Studio della mappa logistica - Regime caotico e mappa a tenda

La mappa logistica per $r=4$ mostra una dinamica caotica. Questo lo si evince tramite lo studio della mappa a tenda: si dimostra infatti che la mappa logistica per $r=4$

$$x_{n+1} = 4x_n(1 - x_n)$$

è riconducibile alla mappa a tenda, definita dalla seguente relazione

$$x_{n+1} = 1 - 2|x_n - 1/2|$$

tramite un opportuno cambio di variabili. Se infatti introduciamo y_n a valori in $[0, 1]$ definita tramite la relazione seguente

$$\sin^2 \frac{y_n \pi}{2}$$

la mappa logistica assume la seguente forma (dopo gli opportuni calcoli)

$$x_{n+1} = 4x_n(1 - x_n) \Rightarrow \sin^2 \frac{y_n \pi}{2} = \sin^2 y_n \pi$$

che ha le seguenti soluzioni

$$\frac{y_n \pi}{2} = \pm y_n \pi + k\pi \text{ con } k \text{ intero.}$$

Imponendo l'appartenenza a $[0, 1]$ si ottiene

$$y_{n+1} = 2y_n \text{ per } 0 \leq y_n \leq 1/2$$

$$y_{n+1} = 2 - 2y_n \text{ per } 1/2 \leq y_n \leq 1$$

che è la definizione di mappa a tenda.

L'operazione di coniugazione topologica ci assicura che se almeno una delle due mappe è caotica lo è anche l'altra. In particolare se $M(x)$ e $T(x)$ sono due mappe

$$M : A \rightarrow A$$

$$T : B \rightarrow B$$

con A e B chiusi e limitati ed esiste un omeomorfismo $O : A \rightarrow B$ che soddisfi

$$O(M(x)) = T(O(x))$$

la mappa M è topologicamente coniugata.

Ritornando alla mappa a tenda, si dimostra che la trasformazione precedente è un omeomorfismo, per cui se la mappa a tenda è caotica lo è anche la mappa logistica per $r=4$.

Si può dimostrare che la mappa a tenda è caotica. Essa è caratterizzata da due azioni: stiramento e piegatura. Lo stiramento è responsabile dell'allontanamento delle orbite (inizialmente molto vicine), caratteristica dei sistemi fortemente sensibili alle condizioni iniziali (caotici) mentre la piegatura assicura che le orbite siano confinate in $[0, 1]$ (che siano quindi limitate).

Di seguito sono mostrate le figure rispettivamente della mappa a tenda, la mappa a tenda iterata due volte e la figura che mostra le operazioni di stiramento e piegatura.

5.6 Studio della mappa logistica - Zona di Transizione

Consideriamo ora il caso in cui $3 \leq r \leq 4$ che rappresenta la zona in cui si verifica il meccanismo di passaggio dalla zona non caotica a quella caotica. Per tale scopo analizziamo la mappa iterata due volte M^2 osservando le seguenti figure

inserire figure

La figure (a) e (b) rappresentano rispettivamente il comportamento di M^2 per r poco minore di r e poco maggiore di r . Da esse si evince innanzitutto che M^2 è un polinomio di ordine 4 ed ha 3 estremi; inoltre il punto fisso di M lo è anche per M^2 . Si dimostra inoltre che un punto fisso instabile per M lo è anche per M^2 ; si ha infatti che se x_f è punto fisso instabile per M si verifica

$$|dM/dx|_{x=x_f} > 1.$$

Dal momento che

$$|dM^2/dx| = |dM/dx|_{M(x_f)}$$

ne segue che

$$|dM/dx|_{x_f} = (dM/dx)_{x_f}^2 > 1.$$

Dalle figure si possono individuare i punti fissi: essi sono dati dai punti d'intersezione della retta bisettrice $y \equiv M^2 = x$ con la curva rappresentativa della mappa. La figura (a) che rappresenta la mappa M^2 per r poco minore di 3 mostra quindi che in questo caso c'è un solo punto fisso e coincide con quello di M . Di conseguenza la mappa M^2 per $r > 3$ ha tre punti fissi, come mostra la figura (b), e che essi sono stabili. Uno di questi tre punti fissi lo è anche per M .

La figura (c) mostra il caso $r=3$. L'orbita è inizialmente di periodo 1 con un punto fisso; ad un certo punto in punto fisso diventa instabile; l'orbita si dirama ed appare un'orbita stabile di periodo 2. Tutte le traiettorie saranno attratte da quest'orbita di periodo due eccetto le orbite costituite dai punti fissi $x = 0$, $x = 1$, $x = 1 - 1/r$. Questo cambiamento è detto biforcazione con raddoppio di periodo.

La figura seguente mostra il comportamento delle mappe M^2 e M^4 , con lo stesso meccanismo visto per le mappe M e M^2 .

La mappa M^4 ha 8 punti fissi, di cui 4 sono punti fissi di M^2 ; l'orbita di periodo 4 è stabile fino ad un certo valore $r = r_3$ per il quale si ha raddoppio di periodo e questa nuova orbita di periodo 8 risulta stabile per $r_3 \leq r \leq r_4$ (si veda la seconda delle figure precedenti).

In generale ci sarà la comparsa di orbite di periodo crescente 2^m che risulteranno stabili per $r_m \leq r \leq r_{m+1}$ dando luogo al fenomeno detto cascata di biforcazioni, mostrato graficamente nella seguente figura rappresentante il diagramma delle biforcazioni per la mappa logistica

La successione delle r_m ha un punto di accumulazione dato dal seguente limite

$$r_\infty \equiv \lim_{m \rightarrow \infty} r_m = 3,5699456\dots$$

dove nell'intorno sinistro di r_∞ si accumulano orbite di periodo sempre più grande, mentre per $r > r_\infty$ il sistema diventa caotico. Consideriamo ora la successione di biforcazioni con raddoppio di periodo per $r \leq r_\infty$. La lunghezza dell'intervallo di r in cui le orbite di periodo 2^m sono stabili diminuisce secondo la legge

$$r_m = r_\infty - \text{cost} \times \delta^{-m} \text{ per } m \text{ grandi}$$

da cui

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{r_m - r_{m-1}}{r_{m+1} - r_m} = 4,669201\dots = \delta$$

dove δ è la costante di Feigenbaum ed è una costante universale. Essa vale per molti sistemi che hanno lo stesso comportamento della mappa logistica e tutte le equazioni alle differenze finite del primo ordine

$$x_n = f(x_{n-1}).$$

6 Introduzione all'Econofisica

Gli studi sui modelli matematici per i mercati finanziari fanno largo uso di strumenti matematici utilizzati in Fisica per lo studio dei fenomeni naturali. Un esempio è la Meccanica statistica: le analogie tra i sistemi fisici studiati con la meccanica statistica ed i sistemi rappresentativi dei mercati finanziari hanno indotto la comunità scientifica ad utilizzare tali strumenti per creare dei modelli attendibili. Di qui il nome Econofisica.

In questa sezione vengono presentati alcuni argomenti di econofisica, estratti da un lavoro che rappresenta un progetto di divulgazione che in futuro potrà essere pubblicato. Gli argomenti sono posti in maniera sequenziale: si parte dall'introduzione alla probabilità seguendo un percorso che conduce agli ultimi argomenti postati.

6.1 Probabilità: Introduzione

Nei problemi come quelli fisici nasce spesso l'esigenza di passare da una trattazione discreta ad una continua (come vedremo nel Random Walk). Ricordiamo innanzitutto il concetto di funzione. Una funzione è definita nel senso generico come segue

$$f : x \in A \longrightarrow y = f(x) \in B$$

ossia, dato un certo insieme valori che può assumere la variabile x l'applicazione di f su x genera un nuovo valore $y=f(x)$ che appartiene all'insieme B , ovvero l'insieme dei valori che può assumere y ; si dice quindi che f è una applicazione (sui valori di A) in B (che assume cioè valori contenuti in B). In base al tipo di valori degli insiemi A e B la funzione può essere a valori discreti o continua. Nel caso di sistemi aleatori, un evento da come risultato un valore probabile, ossia ad un evento possono corrispondere più risultati. Un esempio classico è il lancio del dado: ad un lancio (evento) possono corrispondere sei risultati (1,2,3,4,5,6) senza sapere con certezza quale di essi possa risultare. In questo caso il sistema è detto stocastico così come il processo. Ovviamente l'unica previsione che si può fare è di calcolare la probabilità con cui uno dei sei risultati può uscire; nel caso del dado, prima del lancio, la ogni numero ha probabilità di uscire, ossia è equiprobabile; ovviamente ci sono casi in cui un sistema presenta degli eventi non equiprobabili. In entrambe i casi la probabilità di un evento può essere definita come il rapporto tra il numero dei casi favorevoli (ossia del numero di casi in cui si verifica un evento) e il numero di casi possibili

$$P(\text{Evento}) = \frac{\text{casi favorevoli}}{\text{casi possibili}}.$$

Nel caso di eventi equiprobabili vi è un caso favorevole, e sei casi possibili: infatti la probabilità che esca il valore 1 (un caso caso favorevole) è $P(1) = \frac{1}{6}$; lo stesso vale per la probabilità che escano gli altri numeri. Stesso vale nel lancio di una moneta. Un caso non equiprobabile può essere il seguente: in una cesta vi sono 1000 palline di tre colori diversi e ne peschiamo 10, di cui 5 verdi, due rosse, tre azzurre. Le probabilità sono le seguenti

$$P(\text{verde}) = \frac{5}{10} = \frac{1}{2}, P(\text{rosso}) = \frac{2}{10} = \frac{1}{5}, P(\text{azzurro}) = \frac{3}{10};$$

è ovvio che in questo caso le probabilità variano al variare del numero di palline che peschiamo ed è chiaro come questa definizione risulta grossolana e non dà una stima corretta della probabilità di un evento. L'esigenza di dare una definizione rigorosa di probabilità ha portato a definirla come segue

$$P : E \in \Omega \longrightarrow P(E) \in \mathbf{R}$$

ossia è una funzione che associa ad un evento E appartenente all'insieme Ω , detto spazio degli eventi, un numero reale. Tale funzione deve soddisfare delle proprietà:

$P(E) \geq 0$ ossia la probabilità non può avere un valore negativo, al massimo è nulla

$P(\Omega) = 1$ è certo che si verifichi uno uno degli eventi; probabilità uno vuol dire certezza

$P(E_1 \cup E_2) = P(E_1) + P(E_2)$ ossia la funzione P è additiva: la probabilità che si verifichino due eventi contemporaneamente è uguale alla somma delle singole probabilità. Questo se E_1 e E_2 sono incompatibili

Da queste definizioni si evince che:

La somma delle probabilità dei singoli eventi di

$$\Omega$$

è uguale ad 1 $P(\Omega) = 1$

Se $P(E)$ è la probabilità che si verifichi E allora $1 - P(E)$ è la probabilità che non si verifica E $P(\bar{E}) = 1 - P(E)$

6.2 Probabilità Bernoulliana

In molti casi può capitare di dover calcolare la probabilità di un evento con la condizione che l'evento stesso possa ripetersi. Per meglio chiarire il concetto possiamo immaginare due casi opposti: il lancio del dado e il gioco della tombola. Nella tombola si pesca un numero dal sacco senza che venga rimesso dentro: inizialmente tutti i numeri hanno probabilità $\frac{1}{90}$ di uscire; successivamente all'uscita del primo numero ne rimangono 89 da pescare. Nel lancio del dado, se nel primo lancio esce il numero 1, nel secondo può nuovamente uscire il valore 1: il numero 1 quindi può ripetersi in ogni lancio. Questo è un caso di prove indipendenti, nel senso appena spiegato, la cui funzione di probabilità, detta Bernoulliana, è

$$P_k = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}$$

dove

n = numero di prove;

n = numero di successi;

p = probabilità dei successi k ;

$q = 1 - p$ probabilità che non si abbiano i successi k ;

il termine tra parentesi è detto binomio di Newton e vale

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

Possiamo chiarire il significato di questa espressione con un esempio. Effettuiamo il lancio del dado per 4 volte e vogliamo calcolarci la probabilità che

esca la faccia con il numero 2. In questo caso il valore di n è rappresentato dal numero di prove, ossia il numero di lanci: $n=4$; su quattro lanci il numero 2 può uscire 0, 1, 2, 3 o 4 volte per cui k , che rappresenta i successi, può assumere i valori appena scritti. La probabilità che si abbia un successo quindi è $1/6$ mentre la probabilità che non si abbia successo (che non esca il numero 2) è $q=1-p = 1 - 1/6 = 5/6$.

Quindi la probabilità di avere 0 successi (che il 2 esca zero volte) è (Si ricorda che $0! = 1$. Inoltre ogni numero elevato a zero vale 1)

$$P(k = 0) = \binom{4}{0} \left(\frac{1}{6}\right)^0 \left(\frac{5}{6}\right)^{4-0} = \frac{4 \times 3 \times 2 \times 1}{1 \times (4 \times 3 \times 2 \times 1)} 1 \times \left(\frac{5}{6}\right)^4;$$

La probabilità di avere 2 successi è invece

$$P(k = 2) = \binom{4}{2} \left(\frac{1}{6}\right)^2 \left(\frac{5}{6}\right)^{4-2} = \frac{4 \times 3 \times 2 \times 1}{2 \times 1 \times (2 \times 1)} \left(\frac{1}{6}\right)^2 \times \left(\frac{5}{6}\right)^2;$$

6.3 Probabilità condizionata e teorema di Bayes

Può spesso presentarsi il caso che la probabilità che si verifichi un evento, ad esempio A , è condizionata dal verificarsi di un altro evento B . E' il caso della probabilità condizionata che si indica $P(A/B)$. Se indichiamo con b i casi favorevoli al verificarsi di B e a sono i casi favorevoli al verificarsi di A e B contemporaneamente, allora $P(A/B) = \frac{a}{b}$.

Nel caso in cui il verificarsi di A sia la causa del verificarsi di una serie di eventi B_1, B_2, B_3, \dots , può venirci in mente, a posteriori, di voler calcolare la probabilità che la causa del verificarsi di A sia dovuta ad uno degli eventi B_i . Il teorema di Bayes ci dice quanto vale questa probabilità (la cui forma deriva da proprietà assiomatiche della teoria delle probabilità che qui sono tralasciate):

$$P(H_i/A) = \frac{P(H_i) \cdot P(A/H_i)}{\sum_{i=1}^{i=n} P(H_i) \cdot P(A/H_i)}$$

Il simbolo $\sum_{i=1}^{i=n}$ indica che bisogna sommare tutti i termini con l'indice i fino all'indice massimo $i=n$. Ad esempio, se gli eventi H_i sono tre allora $n = 3$ ed i avrà valori 1, 2, 3:

$$\sum_{i=1}^{i=n} P(H_i) \cdot P(A/H_i) = P(H_1) \cdot P(A/H_1) + P(H_2) \cdot P(A/H_2) + P(H_3) \cdot P(A/H_3)$$

Osservazioni importanti

Supponiamo di avere un sistema dado in cui gli eventi possibili sono sei, ossia con un lancio del dado possono uscire sei risultati, ognuno con probabilità di uscita $1/6$. Avremo quindi che in un lancio la probabilità di successo $k=1$ sarà $1/6$. La probabilità che esca uno dei sei risultati è banalmente 1. Questo perchè la somma delle probabilità di successo è (per via della seconda proprietà della definizione di funzione di probabilità)

$$P(\text{tot}) = 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} = \frac{6}{6} = 1.$$

La probabilità di un evento, quindi, rappresenta il peso che ha un successo k nell'insieme di tutte le probabili uscite. In generale, quindi

$$P(\text{tutti gli eventi}) = \sum_{i=1}^{i=n} k_i p_i,$$

dove k_i è l' i -esimo successo e p_i la rispettiva probabilità di riuscita.

Di conseguenza la probabilità che in un lancio del dado esca un numero inferiore a 4 è

$$P(\text{esce un numero inferiore a 4}) = 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}$$

6.4 Probabilità nel continuo

Fino ad ora abbiamo parlato di probabilità discreta, ossia di probabilità di eventi numerabili. I possibili risultati di un lancio del dado, infatti, sono numerabili. Tuttavia gli eventi possibili possono essere infiniti: basti pensare al valore del prezzo di un titolo azionario il cui valore può assumere valori infiniti. Date determinate condizioni possiamo chiederci: quale sarà il valore di un'azione tra 5 ore? A tale domanda possiamo dare infinite risposte, così come sono infiniti i valori che può assumere la variabile prezzo per cause indeterminate. Iniziamo ad andare leggermente più a fondo nel problema definendo la probabilità nel continuo per poter definire nella successiva sezione alcuni strumenti statistici utili per rispondere in prima approssimazione alla domanda che ci siamo posti pocanzi alla quale cerca risposta buona parte del mondo intero da molti anni a questa parte. Partiamo dalla formula del paragrafo precedente in relazione al lancio del dado

$$P(\text{esce un numero} < 4) = 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} + 1 \times \frac{1}{6} = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}.$$

Questa funzione è discreta. Il problema è adattarla al caso continuo. In questo caso la somma si trasforma in integrale:

$$\sum \rightarrow \int.$$

Dato una variabile aleatoria X , la probabilità che essa assuma un valore minore di un valore fissato K è

$$P(X \leq K) = \int_{-\infty}^K P(x) dx$$

mentre la probabilità che X assuma un valore compreso tra due valori fissati K_1 e K_2 sarà data da

$$P(K_{min} \leq X \leq K_{max}) = \int_{K_{min}}^{K_{max}} P(x) dx$$

In genere i valori K_{min} e K_{max} non hanno il valore di infinito; tuttavia il valore della probabilità al di fuori dell'intervallo $[K_{min}, K_{max}]$ si approssima a zero (questo lo si dimostra nella teoria matematica delle distribuzioni. Di solito gli estremi $\pm\infty$ si utilizzano per comodità matematica, per risolvere integrali particolari). L'integrando $P(x)$ viene detto densità di probabilità.

Grandezze importanti sono la media, la mediana e la varianza. Solitamente la probabilità nel continuo viene applicata quando si eseguono un grande numero di misure (misure di grandezze fisiche come le lunghezze, le energie di un particolare processo ma anche le misure dei prezzi nei titoli azionari). Nasce quindi la necessità di dare in media una stima di tali misure. La media di un insieme di misure è definita nel continuo come la somma di tutte le misure pesate dalla loro densità di probabilità

$$M = E(X) = \int xP(x)dx$$

mentre la mediana di X è quel valore M_e tale che

$$P(X_{M_e}) = \frac{1}{2}$$

ossia quel valore tale da dare una probabilità al 50% che si verifichi l'evento. Una volta calcolata la media è utile sapere di quanto le misure si scostano dal valore medio della grandezza che misuriamo, questo per capire quanto sia attendibile il valore medio calcolato e in alcuni casi, quanto siano attendibili le misure effettuate. Tale informazione è data dalla varianza, definita come

$$Var(X) = \sigma^2 = \int (x - M)^2 P(x)dx$$

ossia lo scarto della misura x dal valore medio M. Questa differenza è elevata alla potenza 2 per assicurare un valore positivo di tale differenza. Tuttavia si usa spesso la radice quadrata della varianza, grandezza detta deviazione standard, denotata con il simbolo σ che nello studio dei mercati indica la **volatilità** di un titolo; essa vale

$$\sigma = \sqrt{Var(X)}$$

In generale σ e M derivano da una grandezza chiamata momento di ordine n

$$M_n = E(M^n) = \int x^n P(x)dx;$$

la media quindi è il momento di ordine uno (n=1) mentre la varianza deriva dal momento di ordine 2 (n=2).

Il momento di ordine n=3 definisce il grado di simmetria della distribuzione dei valori misurati rispetto al valore medio mentre il momento di ordine n=4 dice quanti sono i valori di picco, ossia quei valori di massimo e minimo. Queste grandezze le vedremo meglio nel paragrafo in cui si parla delle distribuzioni di probabilità.

Osservazione

Anche nel caso discreto si possono definire le grandezze appena viste, in particolare

$$M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} x_i, \sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} (x_i - M)^2}$$

con n=numero misure.

Consideriamo infine il caso in cui le variabili aleatorie in esame sono due (o anche di più), X ed Y e vogliamo studiare la correlazione che c'è tra esse e quindi le misure che esse rappresentano. Valgono in questo caso le seguenti definizioni:

$$P(X_{min} \leq X \leq X_{max}; Y_{min} \leq Y \leq Y_{max}) = \int_{X_{min}}^{X_{max}} \int_{Y_{min}}^{Y_{max}} P(x, y) dx dy;$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} P(x, y) dx dy;$$

per X e Y saranno definite la media M_X e M_Y e la loro varianza σ_X e σ_Y e definiamo una nuova grandezza, la **covarianza**

$$Covar(x, y) = \sigma_{xy} = E(xy) - M_X M_Y$$

che nel caso in cui X=Y diventa la varianza della singola variabile σ_X^2 . Definiamo infine il coefficiente di correlazione

$$Cor(x, y) = \frac{Cov(x, y)}{\sigma_X \sigma_Y}$$

che misura il grado di correlazione che c'è tra le due variabili aleatorie.

6.5 Distribuzioni di Probabilità

Nel precedente paragrafo si è parlato delle misure e di come si distribuiscono attorno al valore medio. Il modo in cui si distribuiscono può variare e a seconda dei casi si possono definire delle funzioni dette distribuzioni di probabilità, tramite le quali è possibile calcolare la probabilità del loro manifestarsi e l'errore che si commette nel considerare attendibile questa ipotesi. Ci sono diverse funzioni di distribuzione, continue e discrete, ognuna delle quali si adatta ad un certo tipo di problema, o meglio di casistiche. Una distribuzione di probabilità molto popolare è la distribuzione di Gauss, soprattutto perchè appare in molti problemi statistici, nel campo della fisica e della matematica. Inoltre, come si vedrà a breve, esiste un teorema che afferma che sotto certe condizioni una serie di misure tende a distribuirsi come una Gaussiana. Tuttavia la Gaussiana appartiene ad un insieme più generale di funzioni di distribuzione, ossia le distribuzioni di Levy o Stabili, che hanno determinate proprietà di simmetria. Definiamo di seguito alcune delle più importanti funzioni di distribuzione, tralasciandone alcune.

Distribuzione uniforme

La distribuzione uniforme è una distribuzione discreta ed è così definita

$$P = \begin{cases} 0 & \text{se } x < a \\ \frac{1}{b-a} & \text{se } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{se } x > b \end{cases}$$

Questo vuol dire che ogni misura (evento, valore) che si trova tra

a

e

$$b$$

ha uguale probabilità, mentre al di fuori di tale intervallo la probabilità è nulla. Banalmente la media vale

$$M = 0$$

mentre

$$\sigma = \frac{(b-a)}{\sqrt{12}}.$$

Distribuzione binomiale

La distribuzione Binomiale rappresenta quei sistemi discreti in cui è applicabile la probabilità binomiale (le cui proprietà sono descritte nella sezione precedente) è definita come segue

$$P(n, k, p) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

con

$$M = np,$$

$$\sigma = \sqrt{np(1-p)}.$$

Quando il numero di prove n è molto grande (ossia $n \rightarrow \infty$) la distribuzione binomiale diventa

$$P = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-M)^2}{2\sigma^2}}$$

che, come vedremo, è una Gaussiana. Inoltre per probabilità di successo p molto piccole

$$p \ll 1$$

la distribuzione binomiale diventa una distribuzione di Poisson (descritta di seguito).

Distribuzione di Poisson

La distribuzione di Poisson è simile alla Bernoulliana con la differenza che si assume che una frazione di successi τ è proporzionale (e quindi dipendente) dal numero di successi, ossia

$$\tau = np.$$

Essa vale

$$P(k, n) = \binom{n}{k} \left(\frac{\tau}{n}\right)^k \left(1 - \frac{\tau}{n}\right)^{n-k}$$

che per $n \rightarrow \infty$ (n molto grande) diventa

$$P = \frac{\tau^k e^{-\tau}}{k!}.$$

Si ha per la Poissoniana

$$M = \sigma^2 = \tau.$$

Distribuzione gaussiana (normale) e distribuzione gaussiana standard

La distribuzione normale o gaussiana è definita come segue

$$N(M, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-M)^2}{2\sigma^2}}$$

che ha una forma caratteristica a campana: il picco rappresenta il valore medio mentre la sua larghezza è rappresentata dal valore di σ . Più piccolo è il valore di σ e più stretta è la campana, il che vuol dire che i valori della variabile x sono più vicini al valore medio M . Solitamente nelle analisi statistiche si utilizza la **distribuzione normale standard** che si ottiene dalla gaussiana effettuando la sostituzione $z = \frac{(x-M)}{\sigma}$.

Questa distribuzione ha un ruolo importante non solo nelle analisi statistiche, ma anche in particolari branche della matematica e soprattutto in vari campi della fisica (come vedremo nel caso del Random Walk). Inoltre c'è un importante teorema, detto teorema del limite centrale il quale afferma che la densità di distribuzione di probabilità di un insieme finito N di prove con media e varianza finita, tende a diventare una gaussiana man mano che N diventa sempre più grande $N \rightarrow \infty$.

Cenni alle distribuzioni stabili (o di Levy)

Una distribuzione stabile ha la proprietà seguente: la somma di due variabili stocastiche che si distribuiscono secondo una certa forma funzionale (ossia secondo una certa distribuzione di probabilità) dà come risultato una variabile che si distribuisce come le due sommate. In breve se x ed y si distribuiscono come una gaussiana allora anche $z=x + y$ si distribuisce come una gaussiana. Questa è una proprietà di invarianza nel senso che due grandezze che seguono una stessa legge matematica, se sommate, continuano a seguire la stessa legge. Un esempio pratico utile a spiegare meglio questo concetto è rappresentato dalle onde sonore. Esse seguono una certa legge matematica; se due onde vengono sommate, il risultato segue ancora la stessa legge matematica e come risultato si ha il fatto che il nostro orecchio riesce a distinguere due o più suoni diversi.

La distribuzione normale appartiene alla classe delle distribuzioni stabili. Tale classe di distribuzioni è detta di Levy per via del fatto che fu colui che studiò le loro proprietà. Per una trattazione più approfondita si rimanda alla sezione riguardante i frattali.

6.6 Processi Stocastici: Processo di Markov

Vogliamo ora descrivere il comportamento nel tempo delle variabili aleatorie, introdurremo quindi gli strumenti necessari a studiare più a fondo tali variabili che nel campo finanziario rappresentano i prezzi. Ciò viene fatto considerando tali evoluzioni temporali come processi stocastici. Seguendo un filo logico arriveremo a definire l'equazione di Black-Scholes.

Consideriamo un processo dipendente dal tempo $x(t)$. Possiamo pensare di effettuare delle misure di x in diversi istanti di tempo, per cui se $t_1, t_2, t_3, \dots, t_n$ sono istanti di tempo (in ordine crescente) in cui vengono misurati rispettivamente i valori (ad esempio la variabile x può rappresentare il valore che assume

un prezzo nel tempo per cui al tempo t_1 misuriamo il prezzo x_1 , e così via) $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ la densità di probabilità congiunta per tali valori può essere rappresentata da

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_n, t_n).$$

Ora immaginiamo di voler considerare alcuni degli n valori per cui vogliamo considerare una probabilità condizionata. Ad esempio, effettuiamo 6 misure e per 3 di esse vogliamo considerare la probabilità condizionata; scriveremo quindi

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3 / x_4, t_4; x_5, t_5; x_6, t_6)$$

In generale se effettuiamo n prove di cui k sono condizionate, scriveremo (riferendoci all'esempio appena esposto $k=3$ e $n=6$, quindi $k+1=4$, $k+2=5$)

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_k, t_k / x_{k+1}, t_{k+1}; x_{k+2}, t_{k+2}; \dots, x_n, t_n);$$

Il caso più semplice è quello in cui ogni misura (evento) non dipenda dalla precedente (ad esempio il valore x_2 non dipende dal valore x_1) allora per una proprietà delle probabilità si avrà che

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_n, t_n) = \prod_{i=1}^{i=n} P(x_i, t_i)$$

dove il simbolo \prod è chiamato *produttoria* ed indica il prodotto della funzione per ogni valore di i ; ad esempio se $n=2$ allora

$$\prod_{i=1}^{i=2} P(x_i, t_i) = P(x_1, t_1)P(x_2, t_2).$$

Cerchiamo ora di introdurre nel ragionamento un fattore che lo complicherrebbe; possiamo avere l'esigenza di considerare le misure effettuate dipendenti dal futuro ma non dal passato. Immaginiamo di voler trovare una legge stocastica al fine di studiare l'andamento del valore dei prezzi e di impostare il sistema in modo tale che il prezzo al tempo attuale, x_1 con $t_1 = 1$, influenzerà il prezzo che verrà misurato tra un minuto, x_2 con $t_2 = (t_1 + 1)$, con x_2 che non dipenderà dalla misura x_0 al tempo di partenza $t_0 = 0$.

Questa condizione inoltre la vogliamo estendere a tutti gli istanti di tempo successivi. Un simile processo stocastico è detto **processo di Markov** la cui densità di probabilità condizionata è rappresentata dalla seguente funzione

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_k, t_k / x_{k-1}, t_{k-1}; x_{k-2}, t_{k-2}; \dots) = P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots, x_k, t_k / x_{k-1}, t_{k-1})$$

che è comunque regolata da una condizione iniziale, ossia

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) = P(x_1, t_1 / x_2, t_2)P(x_2, t_2 / x_3, t_3).$$

Una condizione iniziale ha una importanza fondamentale per ogni processo descritto matematicamente, questo perchè nella soluzione di ogni problema che descrive un processo vi possono essere più di una soluzione, spesso anche infinite. La condizione iniziale aiuta a definire un particolare processo. Il problema delle condizioni iniziali è ancor più importante nei sistemi caotici (come vedremo più in avanti). Tramite la definizione di probabilità condizionata nel

continuo scriveremo quindi che la densità di probabilità $P(x_1, t_1/x_3, t_3)$ sarà data dall'integrale

$$P(x_1, t_1/x_3, t_3) = \int P(x_1, t_1; x_2, t_2/x_3, t_3) dx_2;$$

integrando la variabile x_2 toglie la dipendenza della funzione dalla stessa variabile. Tramite alcuni passaggi e utilizzando la definizione di processo di Markov si arriva all'equazione di Chapman-Kolmogorov

$$P(x_1, t_1/x_3, t_3) = \int P(x_1, t_1/x_2, t_2) P(x_2, t_2/x_3, t_3) dx_2$$

Questa equazione è il punto di partenza per molti processi basilari per una descrizione stocastica dei prezzi, dalla quale possono essere derivati l'equazione di Fokker-Plank che può essere considerata un'equazione del tutto generale che a seconda del valore di una sua costante, conduce all'equazione per il Moto Browniano ed il processo di Wiener (ma anche ad altre equazioni come quella del calore o l'equazione di un plasma). Questi processi appena citati sono spesso utilizzati in Fisica (in particolare nella branca denominata Meccanica Statistica) per descrivere processi diffusivi a livello molecolare, nei quali il gran numero di variabili in gioco rende indispensabile una descrizione statistica. Come vedremo alcune considerazioni che portano alla formulazione del Random Walk possono essere applicate anche all'andamento aleatorio dei prezzi e dal momento che dal Random Walk può essere derivata l'equazione del moto Browniano si pensò di applicare tale processo per la descrizione dell'andamento dei prezzi nei mercati finanziari.

Ritorniamo allora all'equazione di Chapman-Kolmogorov; se consideriamo la densità di probabilità condizionata $P(x, t/x_0, t_0)$ con x misura effettuata ad un qualunque istante di tempo t , dopo alcuni calcoli si arriva all'equazione di Fokker-Plank

$$\frac{\partial P(x, t/x_0, t_0)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t/x_0, t_0)}{\partial x^2} - C \frac{\partial P(x, t/x_0, t_0)}{\partial x}$$

dove la densità di probabilità è una Gaussiana

$$P(x, t/x_0, t_0) = \sqrt{2D(t-t_0)} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2D(t-t_0)}\right]$$

D e C possono essere dei valori costanti o delle particolari funzioni. Nel caso in cui sono costanti si ha che: se $A=0$ l'equazione di F-P descrive un moto Browniano mentre se $A=0$ e $D=1$ l'equazione di F-P descrive un processo di Wiener. Il coefficiente D è detto coefficiente di diffusione.

Il significato del simbolo $\frac{\partial}{\partial x}$ è quello di derivata parziale: quando vogliamo calcolare le variazioni nel continuo di una funzione utilizziamo l'operazione di derivazione che indica appunto una variazione del valore della funzione a seguito di una variazione della variabile da cui dipende. Tuttavia se la funzione dipende da più variabili bisogna indicare rispetto a quale di esse la funzione varia e quindi tale tipo di variazione la si effettua con l'operazione di derivata parziale. L'equazione di Fokker-Plank è una equazione differenziale alle derivate parziali; questa tipologia di equazioni mostra come varia la funzione (P nel nostro caso) a seguito delle variazioni simultanee delle variabili da cui dipende,

variazioni dette locali, in quanto il calcolo differenziale si riferisce a variazioni estremamente piccole delle funzioni. Le equazioni alle derivate parziali sono complicate da risolvere e, salvo casi eccezionali, alcune di esse vengono risolte numericamente con l'ausilio di calcolatori e supercalcolatori trascendendo quindi nel campo della Matematica computazionale. Questa esigenza di risoluzione numerica ha portato a nuove discipline come la finanza computazionale, la fisica computazionale, e così via, che studiano delle tecniche particolari per poter risolvere numericamente alcuni problemi riguardo sistemi governati da particolari equazioni.

6.7 Random Walk

Il problema della localizzazione di un elettrone è stato sempre il rompicapo dei fisici teorici. Il tanto citato principio d'indeterminazione afferma in buona sostanza che non è possibile conoscere contemporaneamente la posizione e la velocità di un elettrone e questo porta a non poter conoscere in modo deterministico il suo moto, il suo cammino nello spazio e nel tempo. A questo punto, fissando un punto di partenza e uno di arrivo ci sono infiniti cammini effettuabili dall'elettrone per arrivare a destinazione. Stesso problema si pose Brown quando volle descrivere il moto a zig-zag di una sospensione in un fluido (ad esempio un granello di sabbia o di polline in una vasca d'acqua), problema poi formalizzato da Einstein. Questi interrogativi hanno cercato risposta nella teoria del Random Walk (camminata aleatoria, anche detta dell'ubriaco).

Il Random Walk alla fine porta ad un'equazione di evoluzione nel tempo che descrive un processo di diffusione, equazione detta di Fokker-Plank. Allo stesso modo si può descrivere il processo di diffusione stocastico tramite un'altra equazione detta di Langevin (che è alla base di molti algoritmi computazionali): anch'essa porta ad un problema di diffusione descritto dall'equazione di Fokker-Plank. Questo tipo di processi è di grande importanza nei modelli matematici finanziari in quanto essi trovano molte affinità con i problemi descritti dal Random Walk o da un processo descritto dall'equazione di Langevin. Molti modelli computazionali applicati nello studio di fluidi tramite l'ausilio della teoria cinetica vengono applicati anche nel campo della finanza. Un esempio è il metodo di Monte Carlo che implementa proprio un'equazione di Langevin.

Il punto di partenza è considerare un'opportuna discretizzazione dello spazio. Dividiamo quindi lo spazio in tante caselle come se fosse una scacchiera, nella quale il punto che rappresenta la variabile da studiare può posizionarsi in un nodo di tale scacchiera. La distanza spaziale tra un nodo e l'altro la chiamiamo Δ mentre la distanza temporale tra un nodo e l'altro la chiamiamo ε . Siamo quindi passati da uno spazio continuo ad uno discreto. Immaginiamo che il punto si muova e che dopo N secondi si sia spostata di J caselle: saranno quindi passati $t = N\varepsilon$ secondi. Vogliamo ora calcolare la probabilità che il punto si trovi in J dopo N secondi, ossia $P(J, N)$; per fare ciò dobbiamo andare un po' più nello specifico.

Immaginiamo che il punto rappresentativo della grandezza da studiare parta dall'origine; sia p la probabilità che si muova verso destra e q la probabilità che si muova verso sinistra, con la ovvia condizione che la probabilità totale di uno spostamento in uno dei due versi sia $p + q = 1$. Un salto di ε che rappresenta un avanzamento temporale, comporta uno spostamento Δ verso un nodo di destra o sinistra. Se consideriamo

μ = spostamenti verso destra,
 ν = spostamenti verso sinistra
 J = numero di spostamenti netti effettuati dall'origine
 N = numero spostamenti totali

con

$$\begin{aligned}\mu - \nu &= J \\ \mu + \nu &= N\end{aligned}$$

varrà quindi

$$P(J, N) = \binom{N}{\mu} p^\mu (1-p)^\nu$$

Cerchiamo ora di capire cosa accade quando J ed N sono molto grandi, ossia $J \gg 1$ e $N \gg 1$, con la condizione $1 \ll J \ll N$. Senza perderci in calcoli lunghi e noiosi (si passa ai logaritmi, si applica la formula di Stirling, si effettua uno sviluppo in serie di Taylor, etc..) si arriva alla seguente

$$P(J, N) = \sqrt{\frac{2}{\pi N}} e^{-\frac{(J-\alpha)^2}{2N}}$$

dove $\alpha = N(p - q)$.

Si ottiene quindi una distribuzione di probabilità gaussiana con deviazione standard che è dell'ordine \sqrt{N} . E' come se avessimo una nube di punti rappresentativi la nostra grandezza che con il tempo si diffonde verso destra facendo allargare la campana (in quanto aumenta N e quindi la deviazione standard) e facendola conseguentemente abbassare.

Il passaggio al caso continuo si effettua tramite i seguenti passaggi:

si sostituisce $N = \frac{t}{\varepsilon}$;
 si sostituisce $J = \frac{x}{\Delta}$

Di conseguenza si ottiene

$$P(x, t) = \frac{P(J, N)}{2\Delta} = \frac{\varepsilon}{2\pi\Delta^2 t} e^{-\frac{(x-\alpha\Delta)^2}{N\Delta^2}}$$

Successivamente si fanno tendere a zero Δ e t tramite l'operazione di limite, con l'accortezza di mantenere $\frac{\varepsilon}{\Delta^2}$ un numero finito. Quindi:

$$N\Delta^2 = N2\varepsilon D = 2Dt$$

con

$D = \frac{\Delta^2}{2\varepsilon}$ coefficiente di diffusione;

$$\alpha\Delta = N(p - q) \sim \varepsilon\varepsilon^{1/2}(p - q)$$

quindi quando si effettua il limite, la differenza tra p e q deve essere piccola altrimenti α a tempi alti andrebbe ad ∞ ; inoltre il numero di spostamenti verso destra deve essere più o meno simile al numero di spostamenti verso sinistra. Quindi

$$\alpha\Delta = N(p - q) = ct$$

dove

$$c = \frac{\Delta}{\varepsilon}(p - q).$$

In definitiva si ha

$$P(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi\Delta t}} e^{-\frac{(x-ct)^2}{2\Delta t}}$$

che è una gaussiana che nel tempo si sposta con velocità c.

Tramite alcuni accorgimenti matematici si arriva all'equazione di Fokker-Plank

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - c \frac{\partial P}{\partial x}$$

che descrive la diffusione della probabilità P.

È importante notare che in un certo senso tra la variazione spaziale e quella temporale c'è una proporzionalità del tipo $\Delta x \sim \sqrt{\Delta t}$ (si dice che Δx è di ordine $\sqrt{\Delta t}$).

6.8 Considerazioni sul Random Walk e moto Browniano

Dalle considerazioni appena fatte si evince come il Random Walk possa essere utilizzato come modello per lo studio di un processo stocastico che nel tempo si 'diffonde'. Se il punto nello spazio corrisponde ad un prezzo di un titolo possiamo considerare le sue variazioni come una camminata aleatoria, nel senso che il suo valore oscilla all'avanzare del tempo. Si può quindi pensare che il valore del prezzo diffonde nel verso positivo del tempo, o meglio ancora, la densità della probabilità che il valore del prezzo diffonde nel tempo secondo un Random Walk. Come si è visto infatti, la densità di probabilità è una gaussiana, ossia una curva a forma di campana il cui picco rappresenta il valore medio del prezzo. Con il tempo la campana può spostarsi, abbassarsi, allargarsi e questo equivale a dire che il valore medio del prezzo può variare insieme alla sua deviazione standard (lo scarto dei prezzi dal valore medio del prezzo). Il Random Walk, formalizzazione del moto Browniano, viene utilizzato nello studio del PRICING dei prodotti finanziari, effettuato numericamente effettuando cioè simulazione con elaboratori elettronici. Tali simulazioni vengono effettuate sulla base di modelli computazionali, ossia modelli matematici elaborati ad hoc per poter essere implementati con linguaggi di programmazione. Uno di questi modelli, che tra l'altro utilizza il Random Walk, è il Metodo di Monte Carlo. Osserviamo ancora, per non entrare in confusione, che la grandezza di cui si calcola la diffusione di probabilità è stata indicata con x; essa varia nel tempo ed è banalmente dipendente dal tempo x(t). In ambito finanziario la variabile è il prezzo del titolo,

per cui essa la denoteremo con S e quindi sarà funzione del tempo $s(t)$. In generale il moto Browniano possiamo identificarlo nel modo seguente (utile nelle applicazioni computazionali)

$$s(t) = \eta(t)t + \sigma W(t)$$

dove W può essere un Random Walk o processo di Wiener, η il drift percentuale o tasso di rendimento atteso e σ la volatilità in percentuale ($\eta = 0$ e $\sigma = 1$ rappresentano un processo di Wiener). La variazione del prezzo azionario ha quindi una componente deterministica che varia cioè con il tempo, e una variazione stocastica $W(t)$. In questo modo il processo deterministico viene studiato aggiungendo una componente di disturbo (o rumore) che funge da perturbazione, per l'appunto $W(t)$. Solitamente quando si studiano sistemi non deterministici (stocastici o caotici) si considera per il sistema in esame una legge in cui il processo deterministico è affetto da perturbazione. In fisica delle particelle, ad esempio, l'interazione tra particelle viene studiata considerando termini perturbativi, così come in fluidodinamica si studiano i fenomeni turbolenti considerando leggi mediate nel tempo e affette da perturbazioni o fluttuazioni. Il Random Walk viene spesso utilizzato nelle simulazioni fluidodinamiche di sospensioni in moto in un fluido. Nel caso specifico

$$s(t) = \eta(t)t + \sigma W(t)$$

si studia il rendimento del prezzo azionario $\eta(t)$ nel tempo aggiungendo allo studio una perturbazione $\sigma W(t)$ variabile nel tempo che racchiude in prima approssimazione tutte le cause che possano generare oscillazioni al valore del prezzo $s(t)$. In questo processo la variabile aleatoria può assumere valori negativi, cosa che va in contrasto con il sistema finanziario dove i prezzi sono positivi. E' quindi conveniente utilizzare il moto Browniano geometrico che ridefinisce la variabile aleatoria come segue

$$s(t) \rightarrow S(t) = e^{s(t)}$$

questo perchè la funzione esponenziale è una funzione il cui argomento (l'esponente) può assumere valori positivi e negativi ma come risultato dà un valore positivo (si dice che la funzione è positiva). Spesso si utilizzano questi accorgimenti nel caso è possibile non cambiare la natura del sistema in esame. Un altro accorgimento può essere il passaggio ai logaritmi per un sistema descritto da un esponenziale o una potenza,allo scopo di linearizzare i comportamenti e studiare meglio il sistema stesso.

Ritornando al processo formalizzato dalla formula precedente, possiamo dire che $W(t)$ è un processo continuo descritto da variabile discreta. Di conseguenza non avrebbe senso definire una variazione $\frac{dW}{dt}$. Questa considerazione è importante quando si definiscono equazioni differenziali che descrivono il sistema. Dal momento che noi vogliamo arrivare all'equazione di Black-Scholes che è un'equazione differenziale, è opportuno risolvere i non sensi e problemi di natura concettuale matematica. Negli articoli successivi si tratteranno gli argomenti che servono per ovviare a questi inconvenienti.

6.9 Equazione differenziale stocastica ed integrale stocastico

Vediamo ora come attraverso opportuni schemi matematici si arriva a leggi matematiche utili per lo studio dei mercati finanziari. In particolare sarà evidenziata l'importanza del lemma di Ito e dell'integrale stocastico (integrale di Ito) per il fatto che conducono ad una forma particolare delle equazione che spiegano l'evoluzione dei prezzi dei titoli, utile per lo studio di essi. Questi accorgimenti matematici hanno l'importanza di dare un senso alla forma matematica delle leggi oggetto di studio; in mancanza di essi le equazioni apparirebbero a prima vista accettabili ma un'analisi più approfondita mostra delle falle che porterebbero a degli errori grossolani di stima.

Equazione Stocastica

La legge del moto Browniano può essere scritta in forma differenziale

$$ds(t) = \mu dt + \sigma dW(t)$$

ossia una forma che esplica le variazioni locali di s .

Consideriamo un processo descritto dalla funzione $G(s,t)$, dipendente quindi da una variabile stocastica s e da una deterministica t . Vogliamo ora esprimere le variazioni locali della funzione F al variare delle sue variabili: questo lo si può fare facendo il differenziale di F . Senza perderci in calcoli, il differenziale di F è

$$dG(s, t) = \frac{\partial G}{\partial s} ds + \frac{\partial G}{\partial t} dt + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2} (ds)^2;$$

ricordiamo da quanto detto nel moto Browniano che c'è una proporzionalità tra s e t : in particolare i calcoli mostrano che $(ds)^2 \approx \sigma^2 dt$. Sostituendo questa espressione nel differenziale di G si ha

$$dG(s, t) = \frac{\partial G}{\partial s} ds + \frac{\partial G}{\partial t} dt + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2} dt$$

che rappresenta il Lemma di Ito la cui importanza la vedremo a breve. Facciamo un'altra sostituzione: essendo ds un moto Browniano, possiamo sostituire ad esso la sua espressione

$$ds(t) = \mu dt + \sigma dW(t),$$

per cui, dopo una raccolta a fattore comune (sostituisco ds e raggruppo tutti i termini con dt) ne consegue che

$$\left[\eta \frac{\partial G}{\partial s} + \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 G}{\partial s^2} \right] dt + \sigma \frac{\partial G}{\partial s} dW(t).$$

Se la funzione G rappresenta un moto Browniano geometrico $G = S(t) = e^{s(t)}$ si avrà che:

$$\frac{\partial S}{\partial s} = S(t)$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial s^2} = S(t)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

per cui applicando il lemma di Ito si ottiene

$$dS(t) = \left(\eta + \frac{\sigma^2}{2} \right) S dt + \sigma S dW(t).$$

L'utilità di questa conclusione è che la soluzione è facilmente ottenibile; inoltre possiamo facilmente passare da un moto Browniano geometrico ad uno aritmetico. Infatti essendo S un moto Browniano geometrico $S(t) = e^{s(t)}$, possiamo effettuare un suo logaritmo per ottenere il moto Browniano aritmetico $\ln(S(t)) = s(t)$; d'altro canto il differenziale del logaritmo ci da

$$\frac{d \ln(S(t))}{dS} = \frac{1}{S} \equiv ds \Rightarrow \frac{dS}{S} = ds.$$

Nell'equazione differenziale quindi si può passare da un moto browniano geometrico ad uno aritmetico dividendo ambo i membri per S :

$$ds \equiv \frac{dS(t)}{S} = \left(\eta + \frac{\sigma^2}{2} \right) dt + \sigma dW(t)$$

Integrale stocastico

L'equazione differenziale stocastica può essere risolta tramite processo di integrazione. Per le stesse ragioni riguardanti la positività di $s(t)$ e per altre considerazioni matematiche è opportuno considerare un particolare integrale. Solitamente nei corsi di matematica finanziaria, di analisi matematica, etc., si studia un particolare tipo di integrale, ossia l'integrale di Riemann o di Peano. Nonostante all'atto pratico non si notano queste differenze è opportuno definire altri tipi di integrale che abbiano determinate proprietà che assicurano che l'operazione di integrazione di leggi differenziali stocastiche derivino da assunzioni ben poste. Senza entrare nei dettagli e perderci in altre formule pesanti (utili nel caso si voglia implementare numericamente una legge) si può dire che esiste un particolare integrale, l'integrale di Ito che assolve a tutti i problemi matematici di natura stocastica.

6.10 Equazione di Black-Scholes

Disponendo di tutti gli strumenti matematici opportuni possiamo derivare l'equazione classica di Black-Scholes. La situazione classica è la seguente: calcolarci una legge di evoluzione per uno strumento derivato il cui valore dipenda da dal prezzo di un titolo azionario $S(t)$ e dal tempo t . Prima di tutto bisogna fare delle assunzioni:

- il prezzo di un'azione $S(t)$ che segue la legge del moto Browniano geometrico;
- denotiamo con $O(S(t),t)$ il prezzo di una opzione o di un altro strumento derivato il cui valore dipenda da dal prezzo $S(t)$ e dal tempo t ;
- il mercato è ideale, ossia non vi sono costi di transazione, tasse e altre restrizioni dovute alla vendita;
- in un certo intervallo di tempo in cui c'è variazione, non deve esserci rischio;
- durante l'esistenza dell'opzione non deve esserci distribuzione di dividendi.

Possiamo allora utilizzare il lemma di Ito per $O(S(t),t)$, ottenendo

$$\left[\eta S \frac{\partial O}{\partial S} + \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{\sigma^2}{2} S^2 \frac{\partial^2 O}{\partial S^2} \right] dt + \sigma \frac{\partial O}{\partial S} dW(t).$$

A questo punto possiamo costruire un Portfolio che elimini il termine stocastico (che rappresenta le fluttuazioni), ossia un portfolio costituito da un'opzione cosiddetta short $-O$ e da titoli azionari acquistati $\frac{\partial O}{\partial S} S$ cosicchè il valore del portfolio sarà

$$Pf = -O + \frac{\partial O}{\partial S} S$$

la cui variazione in un tempo continuo dt sarà

$$dPf = -dO + \frac{\partial O}{\partial S} dS.$$

Inoltre, considerando il mercato privo di arbitraggi, il guadagno derivante dal portfolio investito in un asset senza rischio sarà $dPf = rPfdt$. Combinando insieme le equazioni precedenti si arriva, dopo le opportune semplificazioni, alla formula di Black-Scholes

$$\frac{\partial O}{\partial t} + rS \frac{\partial O}{\partial S} + \frac{\sigma^2}{2} S^2 \frac{\partial^2 O}{\partial S^2} = rO$$

che è un'equazione differenziale alle derivate parziali. La sua forma è la stessa per l'equazione del calore (derivabile dall'equazione di Fokker-Plank) in una delle sue varianti, che descrive un processo di diffusione. Data la natura matematica tale equazione è risolvibile analiticamente solo in casi del tutto particolari; in casi contrari si risolve numericamente mediante algoritmi computazionali come il metodo di Monte Carlo o applicando opportuni schemi numerici come ad esempio il metodo alle differenze finite, tecnica basilare utilizzata in fluidodinamica computazionale atta a discretizzare equazioni come quella di Black-Scholes in modo tale da poterla implementare con un linguaggio di programmazione. Data la natura dell'equazione di Black-Scholes (equazione differenziale alle derivate parziali di tipo parabolico) è opportuno specificare le condizioni iniziali e/o al contorno: questo per identificare in modo univoco la soluzione dell'equazione. Bisogna quindi stabilire i valori iniziali delle grandezze che evolvono, ad un tempo iniziale $t = t_o$ e un tempo finale $t = T$. E' opportuno inoltre osservare una cosa importante che evidenzia l'importanza di una soluzione numerica per il problema: dal momento che $dPf = rPfdt$ vale per tempi brevi dt (assenza di rischio per tempi brevi) bisogna implementare una condizione che faccia variare il portfolio di copertura in modo tale da renderlo libero da rischio in ogni intervallo di tempo.

7 Chi Sono

Fisico teorico con un background di studi in fisica delle particelle, teoria del modello standard, cosmologia e meccanica statistica, finalizza i suoi studi nella modellistica numerica/computazionale per la fluidodinamica, lavorando sull'implementazione di nuovi schemi numerici per rendere più stabile il modello Lattice Boltzmann Model (derivante dal noto algoritmo Cellular Automata). Si interessa parallelamente alle teorie di quantitative finance e teorie affini cercando un nesso con le teorie non lineari, teorie perturbative e path integral.

Successivamente presta alcune consulenze numeriche come freelance per l'ottimizzazione di diversi modelli di simulazione numerica nell'ambito di ricerca e sviluppo industriale.

Dal 2009 si occupa di ricerca e innovazione nell'ambito dell'*Earth Observation* e *Remote Sensing* presso la *Geotec Srl*, per lo sviluppo di tecniche e procedure di elaborazione di dati LIDAR, ottici Multispettrali ed Iperspettrali, e dati SAR da piattaforma satellitare, focalizzando l'attenzione su quelli provenienti dalla Costellazione Cosmo Sky-Med, missione Italiana. Di particolare rilevanza è l'attività di ricerca svolta in Geotec, in collaborazione con l'Agenzia Spaziale Italiana, per lo studio e l'implementazione di tecniche radargrammetriche, l'utilizzo su dati Cosmo Sky-Med e la loro integrazione con tecniche Interferometriche (InSAR, PSInSAR).

Le attività svolte riguardano la scrittura di progetti di ricerca e sviluppo industriale, sviluppo di soluzioni numeriche ed implementazione delle stesse, per l'elaborazione di dati e per l'immagine processing, ottimizzazione dei processi produttivi mediante implementazione di applicativi ad hoc.

Parallelamente svolge di tanto in tanto attività di ricerca personali nel campo numerico e saltuariamente svolge come freelance l'attività di Webmaster.

SITO WEB
www.nicolastella.it

8 Bibliografia