Lo schema LEAP-FROG per le EQUAZ. di HAMILTON

Si vogliano integrare numericamente le EQUAZIONI di HAMILTON (si parla a volte di FLUSSO HAMILTONIANO)

$$\begin{cases} \dot{\phi}_i = \dfrac{\partial H}{\partial \pi_i} \\ \dot{\pi}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial \phi_i} \end{cases}$$

con le $\{\phi_i, \pi_i\}$ VARIABILI CONIUGATE (HAMILTONIANE). Ci farà comodo mettere le masse a 1 e scrivere $H(\{\phi_i\},\{\pi_i\}) = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2} + V(\{\phi_i\})$

La struttura stessa delle equazioni di Hamilton ci consentirà di ricavare uno schema numerico con la semplicità (e lo scarso onere computazionale) dello schema di Eulero, ma che garantisce accuratezza di ordine superiore!

Scriviamo per prima cosa gli sviluppi in serie (troncati ad $O(\varepsilon^3)$) delle soluzioni del flusso al tempo $\tau+\varepsilon$ (ε è il nostro passo di integrazione temporale) in funzione delle soluzioni al tempo τ

$$(*) \quad \phi_i(\tau+\varepsilon) = \phi_i(\tau) + \varepsilon\,\dot{\phi}_i(\tau) + \frac{\varepsilon^2}{2}\ddot{\phi}_i(\tau) + O(\varepsilon^2) \qquad \left(\dot{\phi}_i = \frac{d}{dt}\phi(t)\ldots\right)$$

$$(**) \quad \pi_i(\tau+\varepsilon) = \pi_i(\tau) + \varepsilon\,\dot{\pi}_i(\tau) + \frac{\varepsilon^2}{2}\ddot{\pi}_i(\tau) + O(\varepsilon^3)$$

Vogliamo ora valutare le quantità che entrano in queste relazioni, segnatamente $\dot{\phi}_i$, $\ddot{\phi}_i$, $\dot{\pi}_i$, $\ddot{\pi}_i$. Non è difficile notare come esse siano fissate univocamente dalle equazioni di Hamilton, ovvero

$$\dot{\phi}_i = \frac{\partial H}{\partial \pi_i} = \pi_i$$

$$\ddot{\phi}_i = \dot{\pi}_i = -\frac{\partial H}{\partial \phi_i} \qquad \text{(i.e. 3 su 4 seguono immediatamente dalle equaz. di Hamilton)}$$

Ci rimane da valutare $\ddot{\pi}_i$, che in forma chiusa segue come (chain rule...)

$$\ddot{\pi}_i = -\sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial\phi_i \partial\phi_j}\dot{\phi}_j = -\sum_j \frac{\partial^2 H}{\partial\phi_i\partial\phi_j}\pi_j$$

Poiché peró in $(**)$ dobbiamo valutare a ordine fissato $O(\varepsilon^3)$, possiamo anche scrivere (prendo il rapporto incrementale alla scala ε ...)

$$\ddot{\pi}_i = \frac{d}{dt}\left(-\frac{\partial H}{\partial\phi_i}\right) = -\frac{1}{\varepsilon}\left(\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon) - \frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau)\right) + O(\varepsilon)$$

Sostituisco quanto ottenuto per $\dot{\phi}_i$ e $\ddot{\phi}_i$ in $(*)$

$$(*) \quad \phi_i(\tau+\varepsilon) = \phi_i(\tau) + \varepsilon\,\pi_i(\tau) - \frac{\varepsilon^2}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau) + O(\varepsilon^2)$$

$$= \phi_i(\tau) + \varepsilon\left(\pi_i(\tau) - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau)\right) + O(\varepsilon^2)$$

dove (NOTA BENE) $\quad \pi_i(\tau) - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau) \equiv \tilde{\pi}_i(\tau+\frac{\varepsilon}{2})$ nel senso della soluzione nello SCHEMA di EULERO

Sostituisco ora quanto ottenuto per $\dot{\pi}_i$ e $\ddot{\pi}_i$ in $(**)$

$$(**) \quad \pi_i(\tau+\varepsilon) = \pi_i(\tau) - \varepsilon\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau) - \frac{\varepsilon}{2}\left(\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon) - \frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau)\right) + O(\varepsilon^3)$$

che posso riorganizzare (sommo a entrambi i membri $-\frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon)$ ...)

$$\left(\pi_i(\tau+\varepsilon) - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon)\right) = \left(\pi_i(\tau) - \frac{\varepsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau)\right) - \varepsilon\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon) + O(\varepsilon^3)$$

i.e. $$\tilde{\pi}_i(\tau+\tfrac{3}{2}\varepsilon) = \tilde{\pi}_i(\tau+\tfrac{\varepsilon}{2}) - \varepsilon\frac{\partial H}{\partial\phi_i}(\tau+\varepsilon) + O(\varepsilon^3)$$

con la stessa notazione di sopra per $\tilde{\pi}_i(\tau+\frac{\varepsilon}{2})$

Qual è la conclusione?

Posso pensare al seguente schema <u>ESATTO a meno di ORDINI $O(\varepsilon^3)$</u>

$$
(!)\quad \begin{cases} \phi_i(\tau+\varepsilon) = \phi_i(\tau) + \varepsilon\, \pi_i\left(\tau+\frac{\varepsilon}{2}\right) & (*) \\[2ex] \pi_i\left(\tau+\frac{3}{2}\varepsilon\right) = \pi_i\left(\tau+\frac{\varepsilon}{2}\right) - \varepsilon\, \dfrac{\partial H}{\partial \phi_i}(\tau+\varepsilon) & (**) \end{cases}
$$

che posso intendere così:

1) lo schema pare formalmente Eulero (e ne ha la "leggerezza" computazionale...), MA ...

2) le ϕ_i e le π_i procedono SFALSATE (inseguendosi come nel salto di un ranocchio... LEAP FROG...) ...

3) e infatti al membro di dx di $(*)$ la ϕ_i è valutata a τ, la π_i a $\tau+\frac{\varepsilon}{2}$, mentre a membro di dx di $(**)$ la π_i è valutata a $\tau+\frac{\varepsilon}{2}$, mentre la $\frac{\partial H}{\partial \phi_i}$ (funzione delle $\{\phi_i\}$) è valutata a $\tau+\varepsilon$.

Va da sé che dovremo partire con un "mezzo passo" (di ampiezza $\frac{\varepsilon}{2}$) nelle π_i, per poi avanzare come in (!), fino a un ultimo "mezzo passo" per le π_i, ad arrivare al tempo finale con ϕ_i e π_i appaiate.

Graficamente ...