

Relazioni di Laboratorio di Fisica Computazionale

Luca Cassia - [MAT. 728341]

Spring 2012

Indice

1	Integrazione Numerica	2
1.1	Newton-Cotes	2
1.2	Quadrature Gaussianhe	3
1.3	Monte Carlo	3
1.4	Esempi	3
2	Algoritmo Metropolis	5
2.1	L'Oscillatore Armonico Quantistico	5
2.2	Azione e Termalizzazione	5
2.3	Autocorrelazione	7
2.4	Correlazione	7
2.5	Calcolo di ΔE	7
2.6	Calcolo dell'Elemento di Matrice	7
3	Metodo Runge-Kutta per Equazio- ni Differenziali Ordinarie	10
3.1	Il Pendolo Caotico	11
3.2	Oscillatore di Van Der Pol	11
3.3	Attrattore di Lorenz	13
4	Metodo implicito	14
4.1	Equazione di Schrödinger	15

Capitolo 1

Integrazione Numerica

In analisi numerica, l'integrazione numerica consiste in una serie di metodi che stimano il valore di un integrale definito, senza dover calcolare la primitiva della funzione integranda. In questa sezione si illustrano alcuni dei principali metodi deterministici e non.

1.1 Newton-Cotes

Le regole di quadratura di Newton-Cotes sono formule che consistono nel valutare l'integrando in punti equispaziati dell'intervallo di integrazione.

Si assume che il valore di una funzione $f : [a, b] \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sia noto nei punti x_i , per $i = 0, \dots, n$ tali che

$$x_i = a + \left(\frac{b-a}{n} \right) i$$

La formula di Newton-Cotes di grado n si ottiene interpolando f nei punti x_i con i polinomi della base di Lagrange, e integrando la polinomiale risultante, $L(x)$, nell'intervallo $[a, b]$.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b L(x) dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i) \ell_i(x) \right) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i(x) dx}_{w_i}$$

dove gli $\ell_i(x)$ sono i polinomi di Lagrange così definiti

$$\ell_i(x) := \prod_{\substack{0 \leq j \leq n \\ j \neq i}} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

$$\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$$

La formula di Newton-Cotes assume così la semplice forma di media dei valori $f(x_i)$ pesati sui coefficienti w_i (indipendenti da f)

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

Si dimostra che l'errore sulla stima di f dato dall'interpolazione polinomiale è

$$E(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{i=0}^n (x - x_i)$$

per un certo $\xi \in [a, b]$ dipendente da x . Non avendo tuttavia alcuna informazione su come individuare il punto ξ in genere si effettua solo una stima del limite superiore sull'errore $E(x)$ per ξ tale che $f(\xi) = \max_{x \in [a, b]} f(x)$.

Al primo ordine dell'approssimazione Newton-Cotes la formula si riduce al cosiddetto metodo dei "trapezi":

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + \underbrace{\frac{1}{2} \int_a^b f''(\xi(x))(x-a)(x-b)}_{E_1}$$

mentre al secondo ordine non è altro che la regola di Simpson:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{3} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] + \underbrace{\frac{1}{6} \int_a^b f'''(\xi(x))(x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b)}_{E_2}$$

1.2 Quadrature Gaussian

La regola di quadratura Gaussiana a n -punti è un metodo di integrazione numerica costruito in modo tale da fornire un risultato esatto per polinomi di grado inferiore a $2n$, attraverso una scelta appropriata di punti x_i e pesi w_i , per $i = 0, \dots, n$. Sul dominio di integrazione convenzionale $[-1, 1]$ la regola è così formulata

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

1.3 Monte Carlo

1.4 Esempi

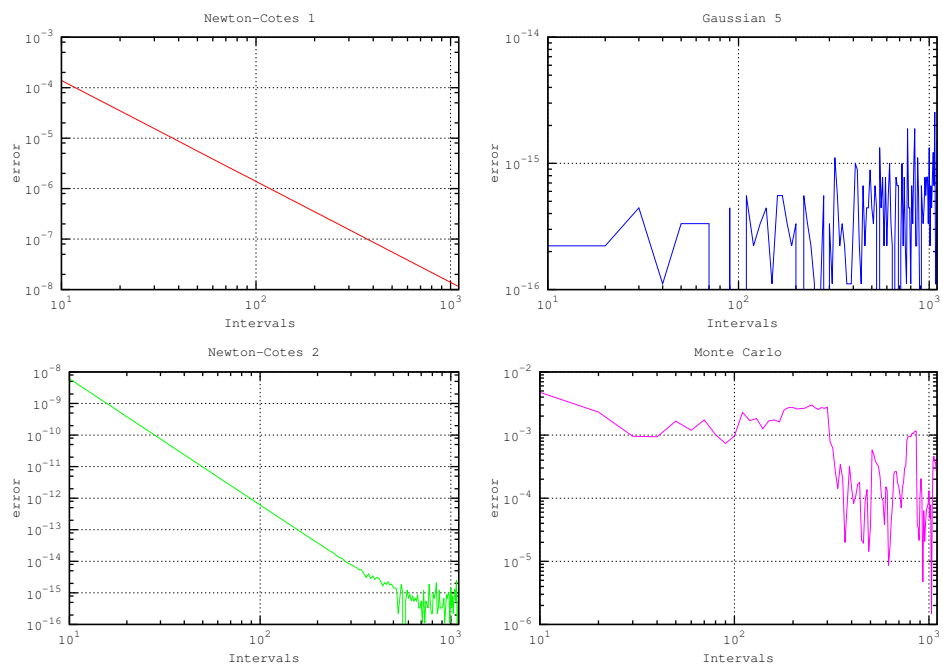


Figura 1.1: Errore calcolato

Capitolo 2

Algoritmo Metropolis

Il Metropolis è l'algoritmo più influente fra quelli appartenenti alla classe dei metodi Monte Carlo. Supportato da una profonda teoria, questo algoritmo costituisce uno strumento fondamentale per la scienza della computazione.

In questa sezione si propone di sviluppare un algoritmo Metropolis per simulare un oscillatore armonico quantistico e confrontare i risultati numerici con la teoria.

2.1 L'Oscillatore Armonico Quantistico

Il sistema è costituito da una particella che si muove in uno spazio unidimensionale e in un reticolo temporale finito di passo a e lunghezza N con condizioni di periodicità al contorno. La particella inoltre interagisce con un potenziale armonico della forma $V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$.

La relazione che si vuole verificare è quella per il correlatore delle variabili l -esima e k -esima

$$\langle X_l X_k \rangle = 2|\langle \tilde{E}_0 | \hat{x} | \tilde{E}_1 \rangle|^2 \exp \left\{ -\frac{Na}{2} (\tilde{E}_1 - \tilde{E}_0) \cosh \left[a \left(\frac{N}{2} - |l - k| \right) (\tilde{E}_0 - \tilde{E}_1) \right] \right\}.$$

Nel caso in esame l'insieme delle variabili x_t del sistema viene rappresentato da un array monodimensionale `x[i]` di `double`, dove l'indice `i` indica la posizione nel reticolo temporale, e dove si è posto $x_N \equiv x_0$.

2.2 Azione e Termalizzazione

Inizializzando il vettore della configurazione con numeri casuali è necessario lasciare del tempo al sistema per portarsi allo stato di equilibrio, dove, per l'ipotesi di ergodicità, tutte le configurazioni possibili sono equiprobabili. Tale processo, denominato termalizzazione, richiede di norma non più di 500 cicli di metropolis, eseguiti i quali sarà possibile estrarre le configurazioni con la giusta distribuzione di probabilità. Vi sono due modi di porre le condizioni iniziali:

- Azione “fredda” : le variabili sono inizializzate a zero.
- Azione “calda” : le variabili sono inizializzate a valori diversi da zero.

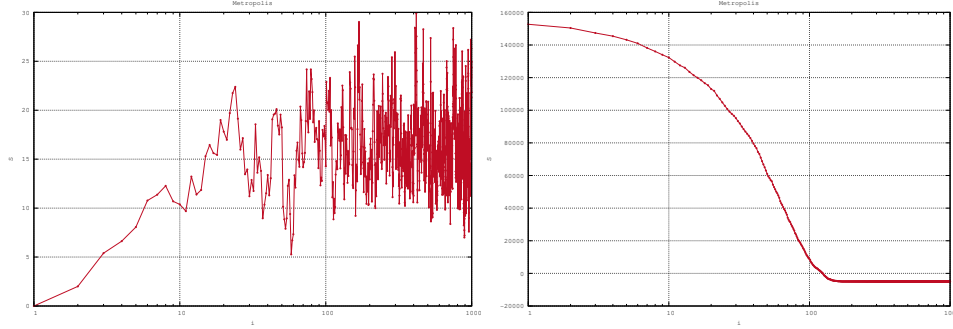


Figura 2.1: Azione Fredda e Calda

Per il calcolo dell'azione euclidea si usa la formula

$$S = a \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{L}(x_i, x_{i+1})$$

dove

$$\mathcal{L}(x_i, x_{i+1}) = \frac{m}{2} \left(\frac{x_i - x_{i+1}}{a} \right)^2 - \frac{1}{2} V(x_i) - \frac{1}{2} V(x_{i+1})$$

Per calcolare il $\Delta S = S' - S$ si può tenere presente il fatto che ad ogni estrazione solo una variabile di sistema viene modificata e quindi tutti i termini delle due sommatorie che non contengono quella variabile si elidono nella differenza. Pertanto si utilizza la formula ridotta

$$\begin{aligned} \Delta S_i &= a[\mathcal{L}(x_{i-1}, x'_i) + \mathcal{L}(x'_i, x_{i+1}) - \mathcal{L}(x_{i-1}, x_i) - \mathcal{L}(x_i, x_{i+1})] \\ &= M[(x_i - x'_i)(x_{i+1} + x_{i-1}) + (x_i'^2 - x_i^2)] + V(x'_i) - V(x_i) \end{aligned}$$

Il codice corrispondente è dove le variabili **M** e **W** corrispondono alla massa e alla pulsazione riscalate del fattore a mentre la y argomento della funzione `ds()` corrisponde alla nuova variabile estratta x'_i . Si noti che le condizioni di periodicità al contorno del reticolo sono implementate attraverso l'algebra modulo N sugli indici del vettore **x**.

Il ciclo di termalizzazione viene eseguito all'interno del `main()`: La funzione `metropolis()` esegue uno sweep sul vettore **x** delle variabili di sistema aggiornandole una alla volta con probabilità $\min(1, e^{-\Delta S_i})$, e restituendo infine la variazione di azione totale $\Delta S = \sum \Delta S_i = \sum_{i=0}^{N-1} \Delta S_i$. La variabile x'_i è estratta con una distribuzione piatta in un'intorno sferico di x_i di raggio D .

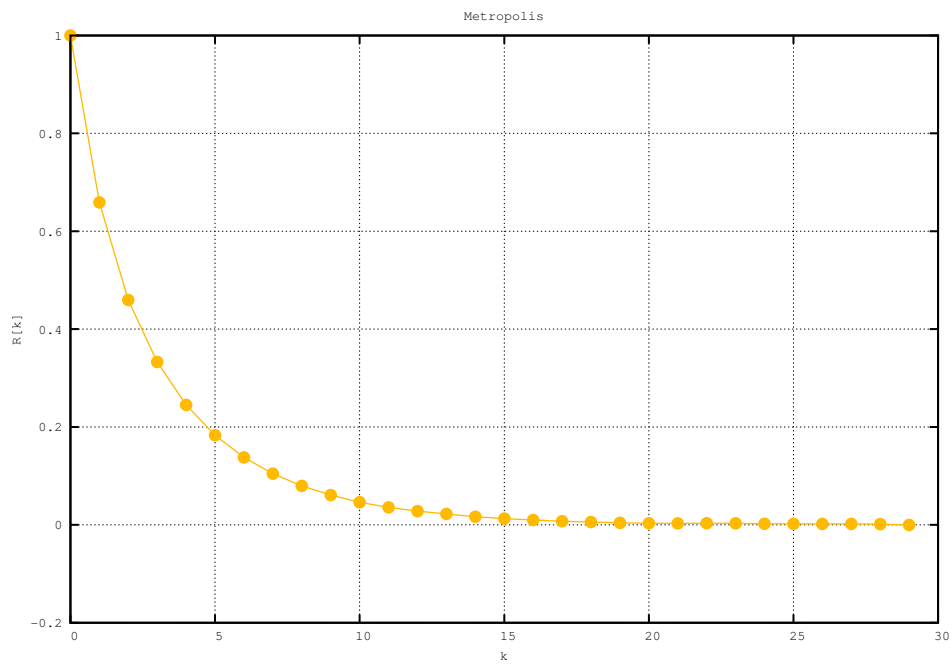


Figura 2.2: Autocorrelazione

2.3 Autocorrelazione

2.4 Correlazione

2.5 Calcolo di ΔE

2.6 Calcolo dell'Elemento di Matrice

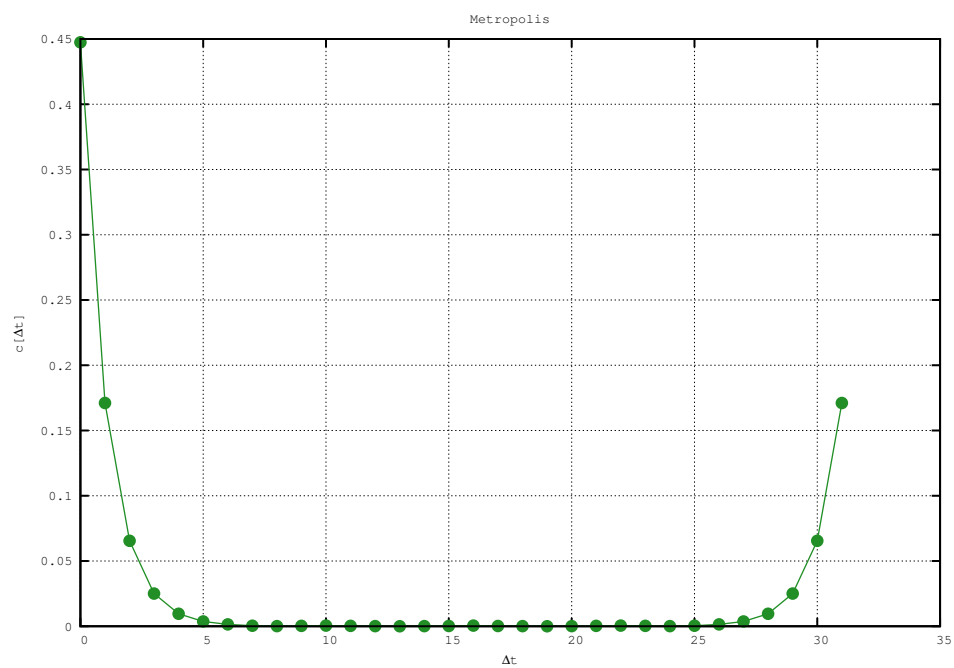


Figura 2.3: Correlazione

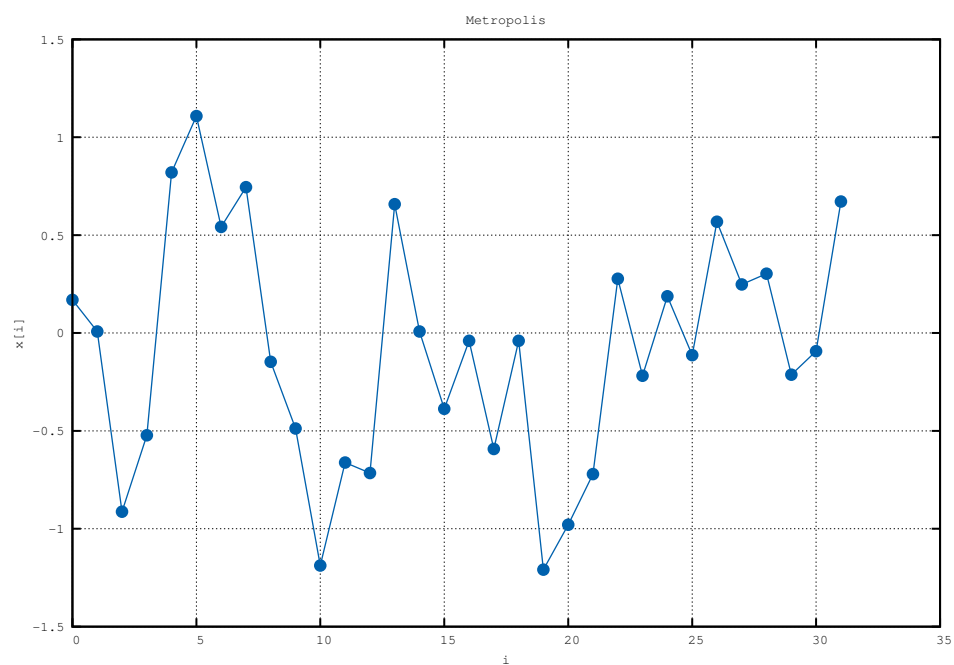


Figura 2.4: Configurazione

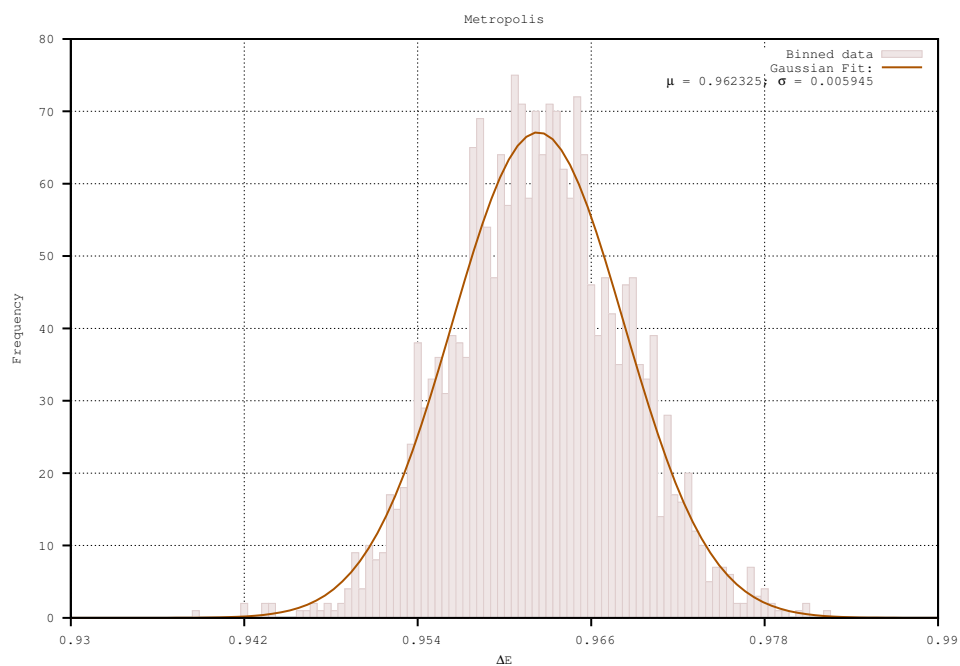
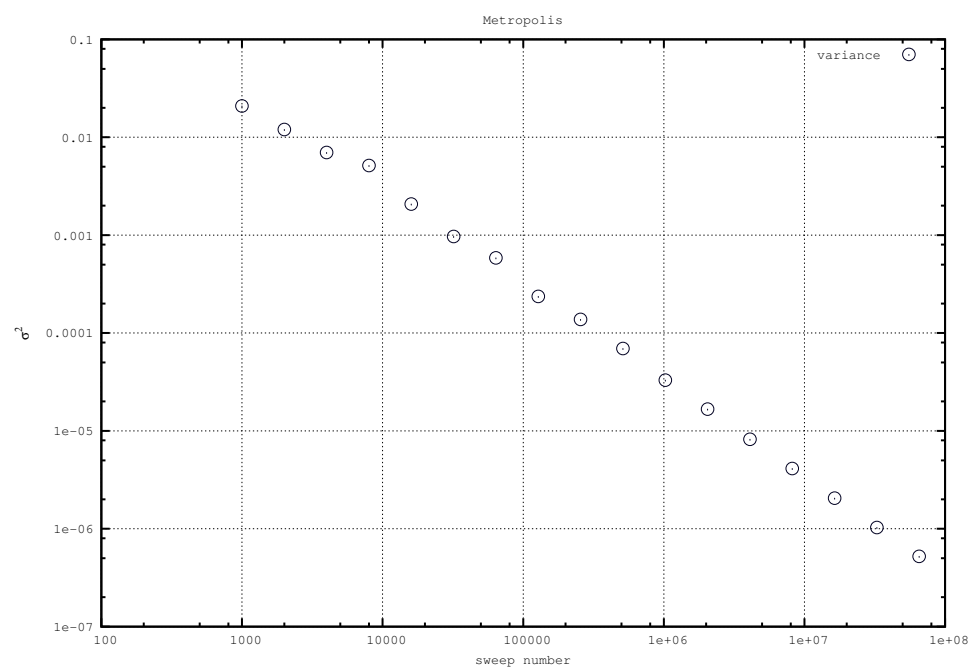


Figura 2.5: Istogramma

Figura 2.6: Varianza di ΔE

Capitolo 3

Metodo Runge-Kutta per Equazioni Differenziali Ordinarie

In analisi numerica i metodi Runge-Kutta sono una famiglia di metodi iterativi impliciti ed espliciti per la risoluzione approssimata di equazioni differenziali ordinarie. Il più comune di questi metodi è il cosiddetto “RK4” o anche Runge-Kutta del quarto ordine.

Sia dato il problema di Cauchy

$$\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0.$$

Si assume che il tempo sia discretizzato in istanti t_n equidistanziati di un intervallo h .

Il metodo RK4 per questo problema è allora dato dalle seguenti equazioni:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ t_{n+1} &= t_n + h \end{aligned}$$

dove y_{n+1} è l'approssimazione RK4 di $y(t_{n+1})$, e

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, y_n), \\ k_2 &= hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1), \\ k_3 &= hf(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2), \\ k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3). \end{aligned}$$

Il valore della funzione y all'istante t_{n+1} è uguale quindi al suo valore all'istante t_n incrementato della media ponderata di quattro incrementi k , dove ogni incremento è il prodotto della dimensione dell'intervallo h ed una stimata pendenza specificata dalla funzione f .

- k_1 è l'incremento basato sulla pendenza di f all'estremo sinistro dell'intervallo, calcolato in y_n (metodo di Eulero);

- k_2 è l'incremento basato sulla pendenza nel punto medio dell'intervallo, calcolato in $y_n + \frac{1}{2}k_1$;
- k_3 è ancora l'incremento basato sulla pendenza nel punto medio, calcolato però in $y_n + \frac{1}{2}k_2$;
- k_4 è l'incremento basato sulla pendenza all'estremo destro dell'intervallo, calcolato in $y_n + k_3$.

Si nota dalla formula per y_{n+1} che peso maggiore viene assegnato all'incremento al centro dell'intervallo. Inoltre, se $f = f(t)$ cioè non dipende da y , il metodo RK4 si riduce alla regola di integrazione di Simpson.

RK4 è un metodo del quarto ordine e quindi l'errore ad ogni step è dell'ordine di h^5 , mentre l'errore totale accumulato è dell'ordine di h^4 .

3.1 Il Pendolo Caotico

Il sistema che si intende simulare è quello dell'oscillatore caotico forzato di equazione

$$\ddot{\theta} = \underbrace{\frac{g}{R}}_1 \sin(\theta) - \underbrace{\frac{k}{m}}_q \dot{\theta} + \underbrace{\frac{f}{mR}}_b \cos(\omega t).$$

È possibile rielaborare l'equazione precedente in un sistema di equazioni differenziali del primo ordine come di seguito

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \phi \\ \dot{\phi} = \sin(\theta) - q\phi + b \cos(\omega t) \end{cases}$$

ed applicare ora la formula del metodo RK4 ad entrambe le equazioni.

Rappresentando la traiettoria del sistema nello spazio delle fasi si ottiene

3.2 Oscillatore di Van Der Pol

Analogamente al caso dell'oscillatore caotico, si applica il metodo RK4 all'equazione del pendolo di Van Der Pol, che in questo caso è

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0$$

dove μ rappresenta l'intensità dello smorzamento. Il sistema associato è

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} - x \end{cases}$$

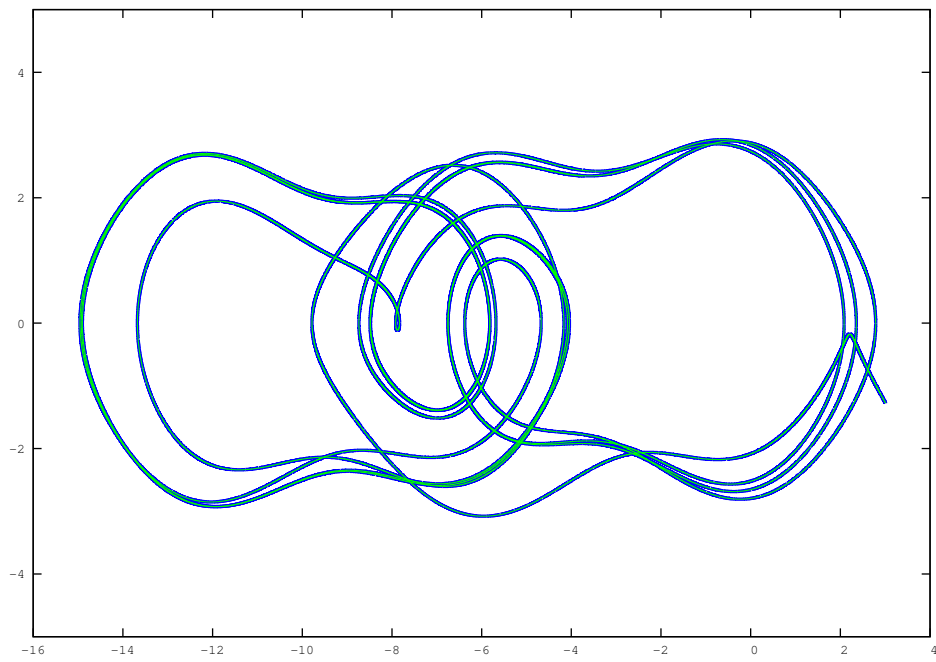


Figura 3.1: Traiettorie dell'oscillatore per $q = 0.3$, $b = 1.4$, $\omega = 0.6667$

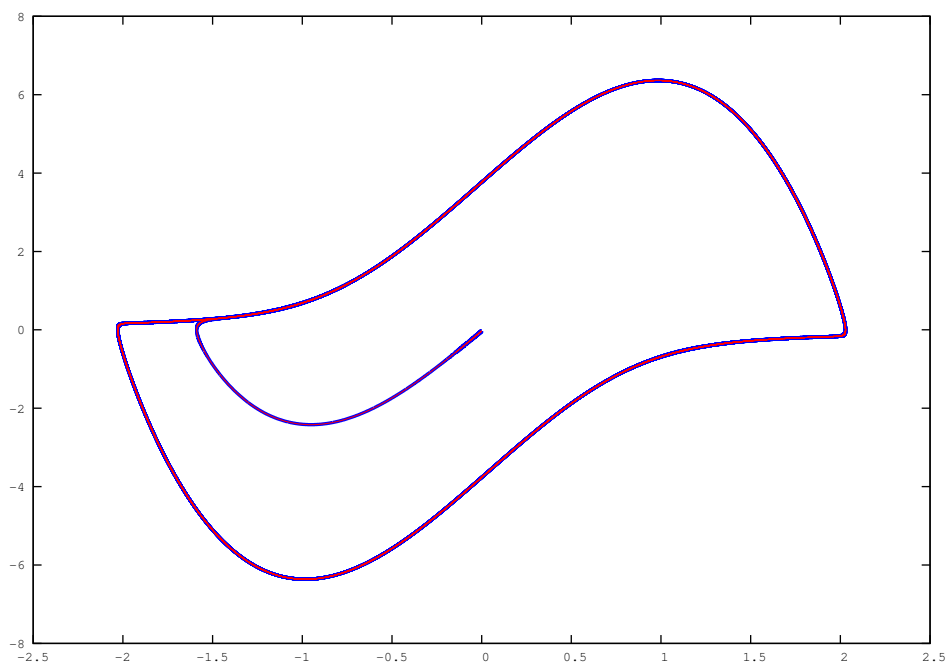


Figura 3.2: Traiettorie dell'oscillatore per $\mu = 4$

Anche in questo caso si può osservare un ciclo limite nello spazio delle fasi del sistema, ovvero una traiettoria chiusa verso la quale il sistema è portato ad evolvere.

3.3 Attrattore di Lorenz

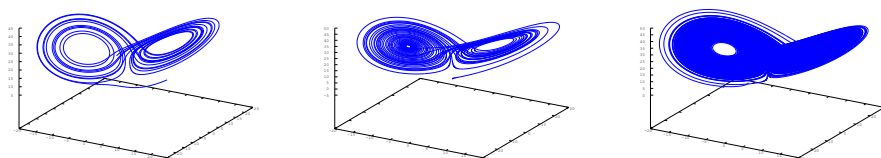


Figura 3.3: Sistema di Lorenz in tre dimensioni

Capitolo 4

Metodo implicito

Per sistemi di equazioni alle derivate parziali (PDE) esistono altri metodi oltre a quelli RK. In questa sezione si illustra e implementa il cosiddetto metodo implicito per risolvere equazioni agli operatori lineari.

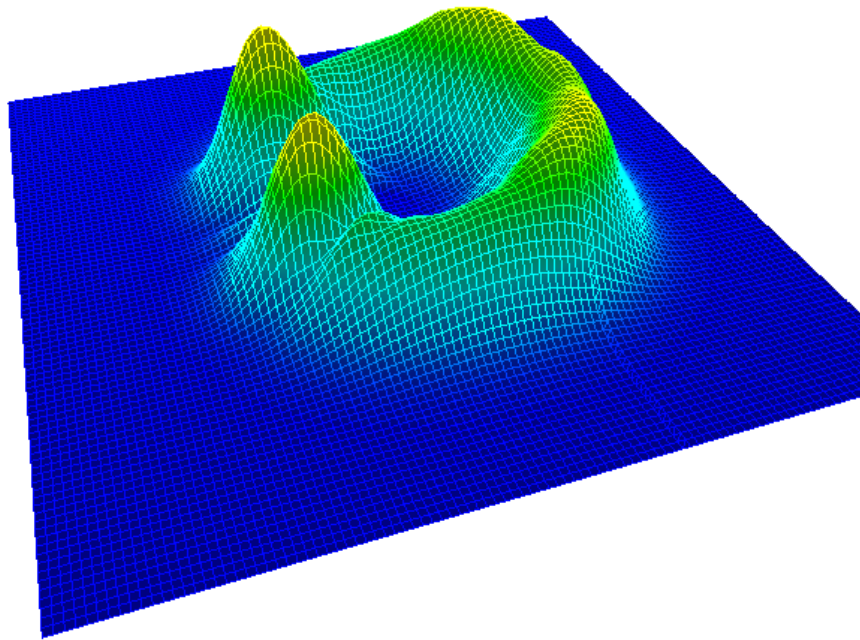


Figura 4.1: Scattering di un pacchetto gaussiano con una buca di potenziale

4.1 Equazione di Schrödinger

L'equazione che si intende risolvere è l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, t) + V(x) \psi(x, t)$$

A tal fine si discretizza lo spazio in modo tale che $x = na$ con $n = 0, \dots, N-1$ ed a passo del reticolo spaziale. $\psi(x, t)$ diventa quindi un vettore di valori complessi $\psi_n(t)$. Si pongono inoltre condizioni di periodicità al contorno di modo che $\psi_N \equiv \psi_0$.

Con questa discretizzazione si sostituisce

$$\nabla^2 \psi(x) \rightarrow \frac{\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n}{a^2}$$

pertanto l'equazione diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n}{a^2} + V_n \psi_n = \sum_m A_{n,m} \psi_m$$

La soluzione dell'equazione è la funzione esponenziale

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t\right) \psi(0)$$

dove $U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} A t\right)$ rappresenta l'evolutore temporale del sistema. Sviluppando ora $U(t)$ intorno all'unità per $t \rightarrow 0$ e trascurando gli ordini superiori in t si ottiene la formula approssimata

$$\psi(t_0 + t) = \psi(t_0) - \frac{i}{\hbar} A t \psi(t_0)$$

Questa prima approssimazione tuttavia porta all'insorgere di numerosi problemi dovuti al fatto che l'iterazione del precedente passaggio non rispetta la condizione di unitarietà dell'operatore evolutore temporale. Bisogna quindi ricorrere ad una strategia più astuta.

Il **metodo implicito** consiste nell'approssimare l'operatore esatto $U(t)$ attraverso la formula

$$\psi(t + dt) = \left(1 + \frac{i}{2\hbar} A dt\right)^{-1} \left(1 - \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t)$$

Utilizzando il fatto che A è Hermitiano, è facile dimostrare che l'operatore della precedente formula è unitario proprio come $U(t)$. Per implementare questo algoritmo iterativo è necessario risolvere ad ogni step il sistema lineare

$$\left(1 + \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t + dt) = \left(1 - \frac{i}{2\hbar} A dt\right) \psi(t)$$

Infine si moltiplicano entrambi i membri dell'equazione per l'aggiunto dell'operatore a primo membro, in modo tale da ottenere

$$(1 + \frac{1}{4\hbar^2} A^2 dt^2) \psi(t + dt) = (1 - \frac{i}{2\hbar} A dt)^2 \psi(t)$$

dove ora $(1 + \frac{1}{4\hbar^2} A^2 dt^2)$ è Hermitiano e si può quindi risolvere rispetto a $\psi(t + dt)$ utilizzando il *Conjugate Residual Method*.

L'idea che sta alla base di questo metodo è che se in un intervallo di tempo dt la funzione $\psi(t)$ evolve in $\psi(t + dt)$, allora facendo evolvere $\psi(t)$ in avanti nel tempo per $\frac{dt}{2}$ e $\psi(t + dt)$ indietro nel tempo sempre di $\frac{dt}{2}$ le due funzioni dovranno coincidere.