MECCANICA CLASSICA (SPAZIO DELLE FASI)

$$\dot{A} = \{A, H\} = \frac{\partial A}{\partial q^i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q^i} \quad , \quad A = A(q, p)$$

$$\dot{A} = L A \quad , \quad L = \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q^i} - \frac{\partial H}{\partial q^i}\frac{\partial}{\partial p_i}$$

operatore Liouvilliano

(Hamiltonian vector field)

E' una equazione lineare

$$\Rightarrow \quad A_t = e^{tL} A_0$$

In particolare, se $A = q$ o $A = p$:

$$\begin{cases} q_t = e^{tL} q \\ p_t = e^{tL} p \end{cases}$$

Si trascurino gli indici d'ora in poi (oppure $n = 2$)

La trasformazione $\begin{cases} q \to q_t \equiv Q \\ p \to p_t \equiv P \end{cases}$

è canonica (o simplettica) : $\{Q,P\}_{q,p} = 1$

[Se $n \geq 2$: $\{Q^i, Q^j\}_{q,p} = 0 = \{P_i, P_j\}_{q,p}$, $\{Q^i, P_j\}_{q,p} = \delta^i{}_j$]

Di conseguenza:

$$L = L_q + L_p = L_Q + L_P$$

$$L_q = \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}$$

$$L_p = -\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p}$$

$$L_Q = \frac{\partial H}{\partial P}\frac{\partial}{\partial Q}$$

$$L_P = -\frac{\partial H}{\partial Q}\frac{\partial}{\partial P}$$

N.B.: $L_q \neq L_Q$, $L_p \neq L_P$

Le eq. del moto sono generalmente non banali perchè

$$[L_q, L_p] \neq 0 \implies e^{tL} \neq e^{tL_q} e^{tL_p}$$

Gli algoritmi simplettici per le ODE della meccanica classica si basano sull'idea di OPERATOR SPLITTING

$t = n\tau$ $\qquad$ $e^{tL} = (e^{\tau L})^n$

N.B.: entrambi generano trasformazioni simplettiche

se $n \to \infty$, $\tau \to 0$ $\qquad$ $e^{\tau L} \approx e^{\tau L_q} e^{\tau L_p} \approx e^{\tau L_p} e^{\tau L_q}$

a meno di $O(\tau^2)$

Si assuma $H = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$ per semplicità, per cui

$$L_q = p\frac{\partial}{\partial q}, \quad L_p = a(q)\frac{\partial}{\partial p}, \quad a(q) = -V'(q)$$

è una traslazione su q!

Symplectic Euler 1

$$e^{\tau L} q \simeq e^{\tau L_q} e^{\tau L_p} q = e^{\tau L_q} q = q + \tau p$$

$$e^{\tau L} p \simeq e^{\tau L_q} e^{\tau L_p} p = e^{\tau L_q}\left(p + \tau a(q)\right)$$

$$= p + \tau a(q + \tau p)$$

La trasformazione

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} q + \tau p \\ p + \tau a(q + \tau p) \end{pmatrix}$$ è canonica

Controlliamo ....

$$Q = q + \tau p, \quad P = p + \tau a(q + \tau p)$$

$$\{Q, P\}_{q,p} = \{q, p\}_{q,p} + \tau \{q, a(q+\tau p)\}_{q,p} + \tau^2 \{p, a(q+\tau p)\}_{q,p}$$

$$= 1 + \tau^2 a'(q+\tau p) - \tau^2 a'(q+\tau p) = 1$$

OK

Symplectic Euler 2:

$$e^{\tau L} q \simeq e^{\tau L_p} e^{\tau L_q} q = e^{\tau L_p}(q + \tau p) = q + \tau(p + \tau a(q))$$

$$e^{\tau L} p \simeq e^{\tau L_p} e^{\tau L_q} p = e^{\tau L_p} p = p + \tau a(q)$$

Visto che il primo step è simplettico

lo sarà anche il secondo e così via:

$$SE1 : \begin{cases} q_{n+1} = q_n + \tau p_n \\ p_{n+1} = p_n + \tau a(q_n + \tau p_n) \end{cases}$$

$$SE2 : \begin{cases} q_{n+1} = q_n + \tau p_n + \tau^2 a(q_n) \\ p_{n+1} = p_n + \tau a(q_n) \end{cases}$$

$SE1 \longleftrightarrow SE2 \Longrightarrow$ controllo degli errori!

τ abbastanza piccolo che $|SE1 - SE2| <$ tolleranza

SE è molto crudo. In particolare

$$\left(e^{\tau L_q} e^{\tau L_p}\right)^{-1} = e^{-\tau L_p} e^{-\tau L_q} \neq e^{-\tau L_q} e^{-\tau L_p}$$

Ma si consideri:

$$e^{\frac{1}{2}\tau L_q} e^{\tau L_p} e^{\frac{1}{2}\tau L_q} \equiv e^{\tau \tilde{L}(\tau)}$$

allora

$$\left[e^{\tau \tilde{L}(\tau)}\right]^{-1} = e^{-\frac{1}{2}\tau L_q} e^{-\tau L_p} e^{-\frac{1}{2}\tau L_q} = e^{-\tau \tilde{L}(-\tau)}$$

ma per definizione: $\left[e^{\tau \tilde{L}(\tau)}\right]^{-1} = e^{-\tau \tilde{L}(\tau)}$

quindi

$$\tilde{L}(\tau) = \tilde{L}(-\tau) = L + O(\tau^2)$$

e

$$e^{\tau \tilde{L}(\tau)} = e^{\tau L}\left[1 + O(\tau^3)\right]$$

Si ottiene così l'algoritmo di Verlet, detto anche algoritmo leap-frog: (N.B: sono due!)

V1 : $e^{\frac{\tau}{2}L_q} e^{\tau L_p} e^{\frac{\tau}{2}L_q}$

$$\begin{cases} q_{n+1/2} = q_n + \frac{1}{2}\tau p_n \\ p_{n+1} = p_n + \tau\, a(q_{n+1/2}) \\ q_{n+1} = q_n + \tau p_n + \frac{1}{2}\tau^2 a(q_{n+1/2}) \end{cases}$$

symplectic mid-point

V2 : $e^{\frac{\tau}{2}L_p} e^{\tau L_q} e^{\frac{\tau}{2}L_p}$

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + \tau p_n + \frac{1}{2}\tau^2 a(q_n) \\ p_{n+1} = p_n + \frac{1}{2}\tau\left[a(q_n) + a(q_{n+1})\right] \end{cases}$$

symplectic trapezoid

È solo l'inizio di una lunga storia ....

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{CAMPBELL - BAKER - HAUSSDORF} \\[1em] e^{A} e^{B} = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\cdots}\end{array}}$$

N.B.: si può dimostrare che $\hat{L}(\tau)A = \{A, \tilde{\hat{H}}(\tau)\}$

quindi $$\tilde{\hat{H}}(\tau) = H + \tau^2 H_2 + \tau^3 H_3 + \cdots$$

$H_2, H_3, \ldots$ sono smooth se H lo è, quindi assumono valori limitati su traiettorie limitate $\Rightarrow \langle \hat{H} \rangle \approx \langle H \rangle$