

Modelli e Metodi Numerici della Fisica

G. Turchetti

Dipartimento di Fisica Astronomia Università di Bologna

giorgio.turchetti@unibo.it

Anno accademico 2017-2018

Indice

Capitolo	Introduzione	1
Capitolo 1	Ricorrenze	8
Capitolo 2	Sistemi dinamici, stabilità , biforcazioni	32
Capitolo 3	Interpolazione polinomiale	72
Capitolo 4	Metodi di quadratura	90
Capitolo 5	Sistemi di equazioni lineari	108
Capitolo 6	Approssimazione e interpolazione razionale	119
Capitolo 7	Equazioni di evoluzione e sistemi meccanici	140
Capitolo 8	Integrazione numerica di equazioni differenziali	165
Capitolo 9	Equazioni di Hamilton	182
Capitolo 10	Integratori simplettici	197
Capitolo 11	Modelli hamiltoniani	215
Capitolo 12	Indicatori dinamici	232
Capitolo 13	Elementi di statistica	252
Capitolo 14	Processi stocastici	260
Capitolo 15	Elementi di teoria cinetica	282
Capitolo 16	Corda elastica e limite del continuo	288
Capitolo 17	Dinamica dei continui	293
Capitolo 18	Integrazione di equazioni alle derivate parziali	306
Capitolo 19	Teoria classica dei campi	356
Capitolo 20	Equazioni di campo per i fluidi	364
Capitolo 21	Elementi di fisica dei plasmi	374
Capitolo	Bibliografia	385

Introduzione

Nel corso si affronta lo studio dei principali modelli per i sistemi dinamici classici e dei metodi numerici che ne consentono l'analisi quantitativa. Possiamo operare una prima distinzione tra i sistemi a pochi gradi di libertà, come quelli trattati nel corso di Meccanica Analitica, e quelli con molti gradi di libertà, per i quali si sviluppano dei metodi di approssimazione che conducono alla teoria cinetica ed alle equazioni per i mezzi continui elastici, per i fluidi e per i plasmi. È infatti soltanto in questo limite che si ottengono equazioni analiticamente trattabili almeno nel caso di una unica dimensione spaziale. Un altro modo per affrontare i sistemi con un gran numero di particelle identiche consiste nel considerare l'evoluzione di una singola particella approssimando la interazione con le rimanenti tramite una forza fluttuante ed una resistente. Si ottiene equazione del moto stocastica, a cui si associa una equazione di evoluzione per la densità di probabilità nello spazio delle fasi. Le equazioni per i fluidi consentono di descrivere sistemi geofisici come l'atmosfera e l'oceano e di sviluppare modelli climatici. Quando le forze sono a lungo raggio, come quelle gravitazionali o elettromagnetiche, una particella non sente solo l'effetto degli urti delle particelle vicine, ma anche il campo generato da quelle lontane, che soddisfa le equazioni di Poisson o di Maxwell. Le equazioni di Liouville per una singola particella e per i campi vanno risolte in modo autoconsistente. Questa descrizione si applica ai fasci di particelle cariche negli acceleratori, ai plasmi confinati ed ai sistemi astrofisici.

Sistemi a pochi gradi di libertà

Il sistema più semplice è dato dalla particella che si muove su di una retta sotto l'azione di una forza posizionale.

$$\dot{x} = v \quad m\dot{v} = -V'(x)$$

L'integrale primo della energia $H = mv^2/2 + V(x)$ determina in questo caso le orbite nello spazio delle fasi e consente di ottenere la legge oraria integrando una equazione del primo ordine per separazione delle variabili. Anche il moto di un punto nello spazio è riconducibile ad un problema unidimensionale in presenza di simmetrie. È il caso del campo centrale in cui si può scrivere l'equazione per il moto radiale grazie alla conservazione della energia e del momento angolare, conseguenze della invarianza per traslazione temporale e per rotazione spaziale. I sistemi generici non sono in generale integrabili poiché non possiedono un numero di integrali primi indipendenti pari al numero di gradi di libertà. I sistemi integrabili sono riconducibili a sistemi periodici con frequenze dipendenti dalle condizioni iniziali. Introdotte le variabili angolo e azione (ϕ, \mathbf{j}) le equazioni del moto si presentano nella forma

$$\frac{d\phi}{dt} = \omega(\mathbf{j}) \quad \frac{d\mathbf{j}}{dt} = 0$$

Tali sistemi sono geometricamente equivalenti a moti circolari uniformi. Su ciascun piano di fase (x_k, p_k) l'orbita è una circonferenza $x_k^2 + p_k^2 = 2j_k$ con fase $\phi_k = \omega_k t$. In sistemi come il pendolo sono presenti punti di equilibrio instabile e lo spazio delle fasi è suddiviso in più regioni di moto integrabile. Quando si perturba un sistema integrabile si osserva l'insorgere di orbite *caotiche* in prossimità dei punti di equilibrio instabile. Questa

transizione si osserva ad esempio nel pendolo se facciamo oscillare il punto di sospensione. La descrizione per un sistema in cui la forza dipende periodicamente dal tempo con periodo T si semplifica se si considera l'orbita nello spazio delle fasi a una successione di tempi che sono multipli interi $t = nT$ del periodo T . Si ha in questo caso un'orbita discreta che, nel caso di un sol grado di libertà, si visualizza agevolmente come una successione di punti nel piano delle fasi. La natura regolare o caotica dell'orbita si caratterizza considerando la separazione di due orbite con punti iniziali vicini, che cresce linearmente nel primo caso, esponenzialmente nel secondo.

Dal punto di vista numerico i sistemi a pochi gradi di libertà si studiano integrando le equazioni del moto ed esaminandone le soluzioni nello spazio delle fasi. È importante stimare l'errore introdotto dall'integratore, che dipende dal passo temporale e dall'algoritmo scelto. Un errore è introdotto anche dal round off, che dipende alla precisione finita con cui vengono rappresentati i numeri reali in un calcolatore.

Il comportamento di un sistema, le cui orbite sono valutate numericamente, è caratterizzato dalla divergenza di orbite vicine, cui si associa l'esponente massimo di Lyapounov, e dalla perdita di memoria della condizione iniziale, valutabile tramite il decadimento della correlazione definita da

$$C(n) = \langle f(x_n)g(x) \rangle - \langle f \rangle \langle g \rangle$$

dove $x_n = x(nT)$. L'annullarsi della correlazione per n grande significa che il punto iniziale x e in punto x_n dell'orbita diventano variabili statisticamente indipendenti. Si noti che le medie sono fatte su un insieme invariante dello spazio delle fasi cui l'orbita appartiene. Nelle regioni di moto integrabile la divergenza delle orbite è al più lineare ossia proporzionale a n mentre le correlazioni decadono al più come $1/n$. Nelle regioni di moto caotico le orbite divergono esponenzialmente con n mentre le correlazioni decadono esponenzialmente con n . La presenza di un debole rumore nei sistemi integrabili causa una divergenza con legge di potenza per le orbite ed un decadimento esponenziale delle correlazioni mentre in un sistema caotico determina una divergenza esponenziale delle orbite ed un decadimento superesponenziale delle correlazioni. Si noti che la divergenza in questo caso si valuta prendendo non la distanza ma lo scarto quadratico medio della deviazione dall'orbita imperturbata. L'effetto del round off in un sistema integrabile è simile a quello di una perturbazione stocastica se esso è sufficientemente complesso dal punto vista computazionale. Ad esempio in coordinate azione angolo il round off non causa divergenza mentre in coordinate cartesiane causa una divergenza lineare come una perturbazione stocastica di uguale ampiezza. In un sistema caotico l'effetto del rumore e del round off sono simili ossia la divergenza delle orbite è sempre esponenziale.

Sistemi a molti gradi di libertà

I sistemi di N particelle sono descritti da un Hamiltoniano H_N somma della energia cinetica, del potenziale per l'interazione a due corpi e del potenziale di eventuali forze esterne. Il comportamento per N grande dipende natura delle forze interne. Se queste sono a corto raggio si hanno solo urti che portano ad una distribuzione di equilibrio di tipo maxwelliano. Se le forze interne sono a lungo raggio, come quelle elettrostatiche o gravitazionali, all'effetto delle collisioni a breve distanza si somma un contributo di

campo medio dovuto alle particelle lontane, che soddisfa l'equazione di Poisson. In questo caso all'equazione di Liouville per la funzione di distribuzione nello spazio delle fasi di una singola particella occorre aggiungere l'equazione di Poisson. Un modo fenomenologico per trattare la dinamica di particelle con interazioni a corto raggio consiste nel sostituire l'effetto delle collisioni con una forza impulsiva aleatoria ed una resistente. La prima descrive l'effetto delle collisioni mentre la seconda rappresenta la resistenza del mezzo, che limita le fluttuazioni di energia consentendo di raggiungere una condizione di equilibrio.

Algoritmi e modelli

Gli algoritmi discreti sono sviluppati per la soluzione numerica di tutti i problemi di evoluzione sia deterministica sia stocastica. La evoluzione continua nel tempo viene sostituita da una evoluzione su piccoli intervalli temporali. Per i sistemi con struttura spaziale continua, che non siano corpi rigidi, la soluzione approssimata delle equazioni di campo si ottiene discretizzando anche le coordinate spaziali. Il passaggio inverso dal discreto al continuo si ottiene tramite la interpolazione, di solito relizzata con basi polinomiali. Le ricorrenze e la interpolazione sono anche alla base degli algoritmi che consentono di trovare gli zeri una funzione o di calcolarne l'integrale in un intervallo assegnato.

Nella **prima parte** (capitoli 1-5) si analizza la stabilità dell'equilibrio nei sistemi dinamici a tempo continuo o discreto ed i suoi cambiamenti al variare di un parametro. Si analizza quindi la convergenza di una ricorrenza ad un punto fisso e la sua rapidità. In particolare si analizzano la convergenza lineare e quadratica. Un esempio significativo di convergenza quadratica è fornito dal metodo di Newton per trovare gli zeri di una funzione. Tra gli algoritmi di base per l'approssimazione numerica vengono presi in esame l'interpolazione, i metodi di quadratura e quelli per la soluzione per sistemi. Per l'approssimazione di funzioni oltre oltre agli sviluppi in serie di Taylor si considerano quelli in frazione continue.

La **seconda parte** (capitoli 6-10) è dedicata alle equazioni differenziali. Vengono introdotti il metodo di Eulero e Runge-Kutta fornendo una stima dell'errore globale. Per l'oscillatore armonico si esamina la stabilità dei vari schemi. Si richiamano quindi le nozioni di base sui sistemi hamiltoniani e sulle trasformazioni canoniche. Si presenta la teoria perturbativa come strumento per lo studio dei sistemi quasi integrabili e si introducono gli esponenti di Lyapunov per analizzare i sistemi con regioni di moto caotico. Utilizzando le serie di Lie si sviluppano i metodi espliciti di integrazione simplettica, che sono applicabili quando l'hamiltoniano si scrive come somma di due hamiltoniani ciascuno esplicitamente integrabile. Per sistemi unidimensionali si propone un metodo basato sulla integrazione numerica della legge oraria che conserva esattamente l'energia e può essere usato per il calcolo del periodo.

I metodi di integrazione numerica vengono applicati a modelli meccanici significativi quali il pendolo variabile, il corpo rigido, il problema dei tre corpi ristretto, il modello di Hénon-Heiles. Modelli per il moto di una particella in un acceleratore o in un dispositivo a confinamento magnetico vengono analizzati costruendone la mappa di Poincaré e se ne fornisce una versione semplificata costruita dalla mappa di Hénon e dalla mappa standard.

Come esempio di sistemi non hamiltoniani che presentano moti caotici si presentano il modello di Lorenz, per moti convettivi in atmosfera, ed il sistema delle doppia dinamo per il geomagnetismo.

La **terza parte** (capitoli 11-12) riguarda la evoluzione di sistemi soggetti a forze fluttuanti, descritta da equazioni differenziali stocastiche. Dopo brevi richiami di statistica si introduce la passeggiata aleatoria e la equazione di Langevin ottenuta dalla prima tramite un opportuno limite. A partire dalla equazione di continuità stocastica si deriva la equazione Fokker-Planck per la densità di probabilità. Soluzioni esplicite delle equazione di Langevin e Fokker-Planck sono ottenute nel caso lineare ove le distribuzioni di probabilità sono di tipo Gaussiano.

Un modello importante è quello di un punto soggetto ad un potenziale, una forza dissipativa ed una forza fluttuante perché la equazione di Fokker-Planck presenta una soluzione di equilibrio data dalla distribuzione di Maxwell-Boltzmann. Quando il potenziale è nullo si determina analiticamente la legge di rilassamento all'equilibrio. Un modello significativo è quello del potenziale a doppia buca in cui si possono calcolare le probabilità di transizione secondo la teoria di Kramer.

La **quarta parte** (13-16) riguarda le equazioni per i mezzi continui che sono descritti da equazioni alle derivate parziali. Partendo da un modello di N particelle in un volume unitario che interagiscono con forze repulsive a corto raggio, si può costruire il limite in cui $N \rightarrow \infty$ mantenendo costante il cammino libero medio $(NR^2)^{-1}$ dove $\sigma = \pi R^2$ è la sezione d'urto. In questo limite la funzione di distribuzione di singola particella soddisfa la equazione di Boltzmann, su cui si fonda la teoria cinetica. Se l'interazione è a lungo raggio oltre agli urti, dovuti alle particelle vicine con una particella data, occorre tener del campo medio esercitato su questa dalle particelle lontane. Nel limite $N \rightarrow \infty$ la frequenza degli urti si annulla, la particella sente solo l'effetto del campo medio e la funzione di distribuzione di particella singola soddisfa la equazione di Vlasov. Partendo dalla di distribuzione nello spazio delle fasi determinata dalle equazioni cinetiche, si passa alla descrizione fluida considerando i primi momenti nello spazio degli impulsi dati dalla densità spaziale, la velocità media e dal tensore degli sforzi. Si ottengono in tal modo la equazione di continuità e la equazione di Navier-Stokes su cui si fonda meccanica dei fluidi. La meccanica dei continui propone le stesse equazioni ma il tensore degli sforzi va specificato in modo fenomenologico. Per i mezzi elastici le equazioni si possono ottengono a partire da catene di oscillatori armonici o anarmonici.

Le equazioni che descrivono il mezzo continuo si presentano quindi come sistemi di equazioni alle derivate parziali. Nel caso lineare le equazioni del secondo ordine si classificano in ellittiche, paraboliche ed iperboliche a seconda del tipo di conica ad esse associata. Tutte vanno corredate di condizioni al contorno e per le ultime due vanno anche specificate le condizioni iniziali, trattandosi di equazioni di propagazione. Per la soluzione di equazioni ellittiche si propongono il metodo spettrale, il metodo alle differenze finite ed il metodo variazionale degli elementi finiti riconducendo in ogni caso il problema alla soluzione di un sistema di equazioni algebriche lineari.

Per le equazioni paraboliche il metodo spettrale conduce a sistemi di equazioni differenziali ordinarie lineari, il metodo alle differenze finite ad una ricorrenza di cui si studia agevolmente la stabilità utilizzando lo sviluppo di Fourier discreto quando si impongano condizioni al contorno periodiche. Per le equazioni iperboliche si considerano, l'equazione di avvezione e quella delle onde proponendo ancora il metodo spettrale e quello alle differenze finite. Tra i vari schemi alle differenze finite risultano stabili quelli che soddisfano la condizione CFL ($c\Delta x/\Delta t$ dove c è la velocità di propagazione del segnale). L'analisi di Fourier applicabile quando le condizioni al bordo sono periodiche consente di ricavare il fattore di dissipazione e la dispersione dello schema numerico. Le equazioni di avvezione non lineare possono presentare soluzioni che non sono ad un sol valore e corrispondono alla generazione di un'onda d'urto. Come esempio si considera la equazione di Burger nel limite di viscosità nulla.

Nella **quinta parte** (capitoli 17-19) si considera una formulazione variazionale sia lagrangiana, sia hamiltoniana delle teorie di campo classico e si propongono alcuni modelli fisicamente significativi. In questo ambito il teorema di Nöther stabilisce la relazione tra simmetrie e leggi di conservazione. La formulazione hamiltoniana può essere sviluppata utilizzando coordinate non canoniche e dopo un richiamo al caso finito dimensionale si mostra come alcune equazioni fluide siano riconducibili a questo tipo di formulazione.

Come esempio di dinamica non lineare per un fluido si considera la equazione di Burger, per la quale il metodo di Cole-Hopf consente di ottenere la soluzione analitica. Un altro esempio significativo di equazioni per i fluidi geofisici sono quelle dette di shallow water che si applicano quando l'altezza della colonna di fluido è piccola rispetto alla sua estensione orizzontale. Nel caso unidimensionale un opportuno sviluppo porta alla equazione Korteweg de Vries che presenta soluzioni d'onda non lineare di tipo solitonico.

Si considera infine il plasma nella descrizione fluida introducendo i parametri di base: raggio di Debye, frequenza di plasma, indice di rifrazione. Si accenna al meccanismo di accelerazione di elettroni e di ioni nella interazione di un impulso elettromagnetico (laser) con un plasma trasparente ed opaco rispettivamente .

Per concludere si analizza il modulo base di un acceleratore costituito da una coppia quadrupoli. Nel caso di una struttura periodica si ricavano le funzioni ottiche e la frequenza di betatrone. Si accenna infine agli effetti collettivi di carica spaziale dovuti alla repulsione Coulombiana, e alle instabilità introdotte da termini non lineari quali un sestupolo.