ODE Newton: $F_i = m_i a_i \quad i=1,2,\dots,N$

Problema N-body: soluzione solo numerica in generale

$$X(t+\Delta t) = X(t) + \dot{X}(t)\Delta t + \frac{1}{2!}\ddot{X}(t)\Delta t^2 + \frac{1}{3!}\dddot{X}(t)\Delta t^3 + \dots$$

Troncamento dello sviluppo per piccoli tempi ("Euler")

- non invertibile nel tempo
- non conserva il volume dello spazio di fase
- soffre di drift in energia

Alternativa: **algoritmo di Verlet**

$$X(t+\Delta t) = X(t) + \dot{X}(t)\Delta t + \frac{1}{2!}\ddot{X}(t)\Delta t^2 + \frac{1}{3!}\dddot{X}(t)\Delta t^3 + \frac{1}{4!}\ddddot{X}(t)\Delta t^4 + \ldots$$

$$X(t-\Delta t) = X(t) - \dot{X}(t)\Delta t + \frac{1}{2!}\ddot{X}(t)\Delta t^2 - \frac{1}{3!}\dddot{X}(t)\Delta t^3 + \frac{1}{4!}\ddddot{X}(t)\Delta t^4 + \ldots$$

sommando...

$$X(t+\Delta t) + X(t-\Delta t) = 2X(t) + \ddot{X}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4)$$

or

$$\boxed{X(t+\Delta t) \approx 2X(t) - X(t-\Delta t) + \ddot{X}(t)\Delta t^2}$$

Per capire perchè Verlet è migliore,
usiamo Lagrange invece di Newton

Lagrangiana: $\mathcal{L}(\mathbf{r}(t)) = T_{\rm cin} - U_{\rm pot}$

Per esempio, $\mathcal{L}(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i \mathbf{r}_i^2 - U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$

Azione : $S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt\, \mathcal{L}(\mathbf{r}(t))$

principio di minima azione o di
Maupertuis o di Hamilton

Dato un sistema meccanico che si evolve seguendo una famiglia di traiettorie **r**(t) tali che $\mathbf{r}(t_0)=\mathbf{r}_0$ e $\mathbf{r}(t_1)=\mathbf{r}_1$,

*la **vera** traiettoria **R**(t) è quella che rende stazionaria l'azione.*

Cioè: se consideriamo una traiettoria **r**(t) vicina a **R**(t),

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{R}(t) + \delta\mathbf{r}(t)$$

la variazione dell'azione rispetto alla traiettoria è nulla:

$$\frac{\delta S}{\delta \mathbf{r}(\mathbf{t})} = 0 \qquad \forall t$$

Specificamente, la stazionarietà dell'azione implica che la traiettoria obbedisce le equazioni di Lagrange della meccanica analitica,

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

cioè per esempio, se $\mathcal{L} = m\dot{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{r})$

$$m\dot{\mathbf{r}} + \frac{dU}{d\mathbf{r}} \Rightarrow m\mathbf{a} = -\frac{dU}{d\mathbf{r}} \equiv \mathbf{F}$$

Vediamo cosa succede imponendo la stessa condizione all'azione discretizzata ...

$$S = \int_{t_0}^{t_1} dt\, L(t)$$

Versione discretizzata:

$$S_{discrete} = \Delta t \sum_{i=0}^{i_{max}} L(t_i)$$

$$L(t_i) = T(t_i) - U(t_i)$$

per una coordinata in una dimensione,

$$L(t_i)\Delta t = \frac{1}{2} m\Delta t \frac{(X_{i+1} - X_i)^2}{\Delta t^2} - U(X_i)\Delta t$$

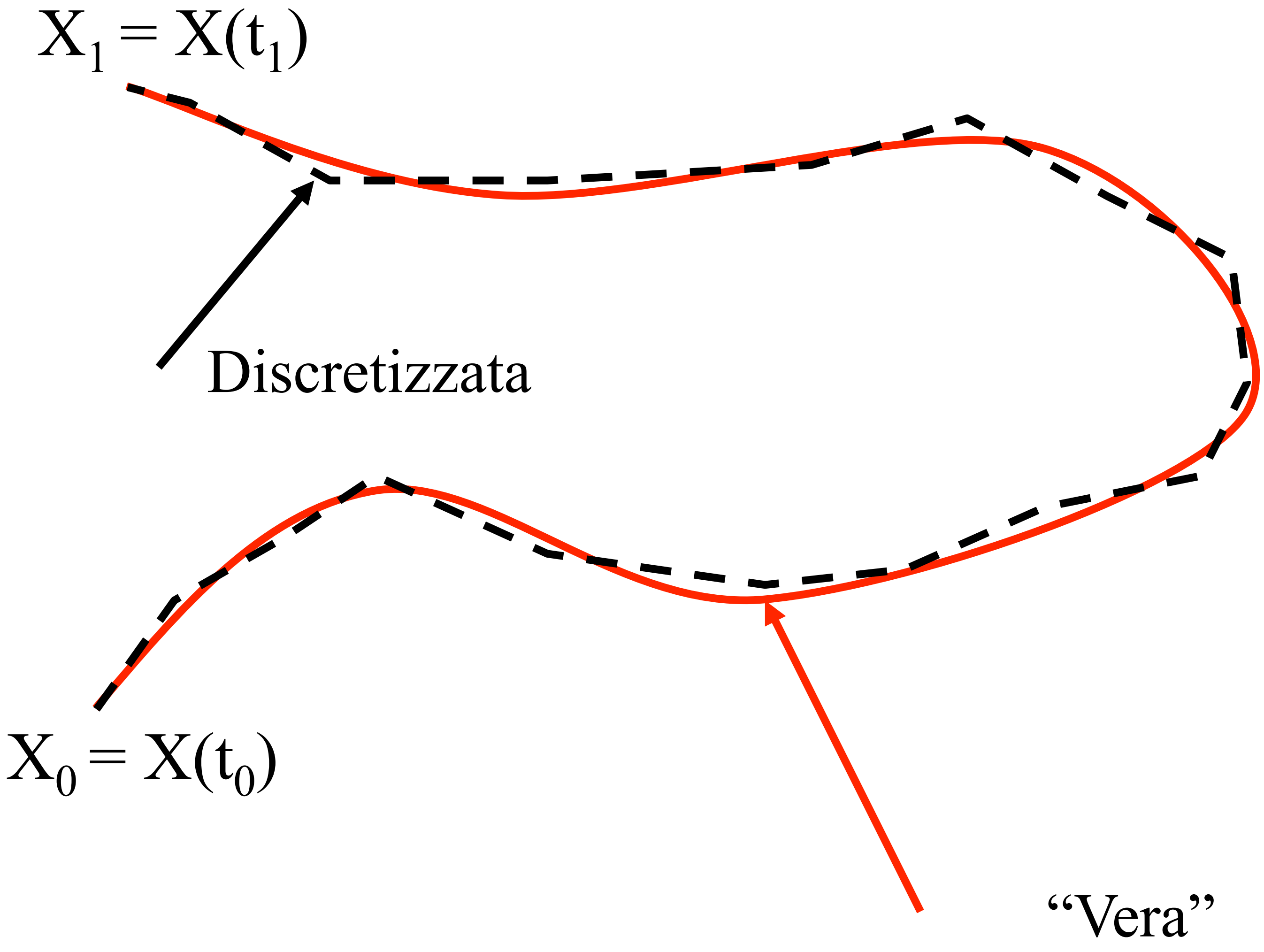
Quindi l'azione discretizzata è

$$S_{discrete} = \sum_{i=1}^{i_{max}} \left(\frac{m(X_{i+1} - X_i)^2}{2\Delta t} - U(X_i)\Delta t \right)$$

L'estremo per piccole variazioni di traiettoria si ottiene imponendo

$$\frac{\partial S_{discrete}}{\partial X_i} = 0 \qquad (\forall i)$$

Risultato: shadowing della traiettoria vera
da parte di quella discretizzata



$$\frac{\partial S_{discrete}}{\partial X_i} = \frac{\partial}{\partial X_i}\sum_{i=1}^{i_{max}}\left(\frac{m(X_{i+1} - X_i)^2}{2\Delta t} - U(X_i)\Delta t \right)$$

$$\frac{\partial S_{discrete}}{\partial X_i} = \frac{- m(X_{i+1} - X_i) + m(X_i - X_{i-1})}{\Delta t} - \Delta t \frac{\partial U(X_i)}{\partial X_i}$$

And hence:

$$0 = \frac{m}{\Delta t}\left(2X_i - X_{i+1} - X_{i-1} - \frac{\Delta t^2}{m}\frac{\partial U(X_i)}{\partial X_i} \right)$$

$$0 = \left(2X_i - X_{i+1} - X_{i-1} - \frac{\Delta t^2}{m} \frac{\partial U(X_i)}{\partial X_i} \right)$$

cioè, surprise surprise, Verlet:

$$X_{i+1} = 2X_i - X_{i-1} + \frac{\Delta t^2}{m} F(X_i)$$

L'algoritmo di Verlet deriva dal principio di azione estremale.

Le traiettorie Verlet soddisfano le condizioni temporali al contorno della traiettoria reale.

NB: tutto questo si applica ai sistemi meccanici.
Ci si aspetta comunque che Verlet funzioni bene anche per ODE che con la meccanica non c'entrano.

Ne risulta che Verlet è

- time reversible
- conserva il volume dello spazio di fase

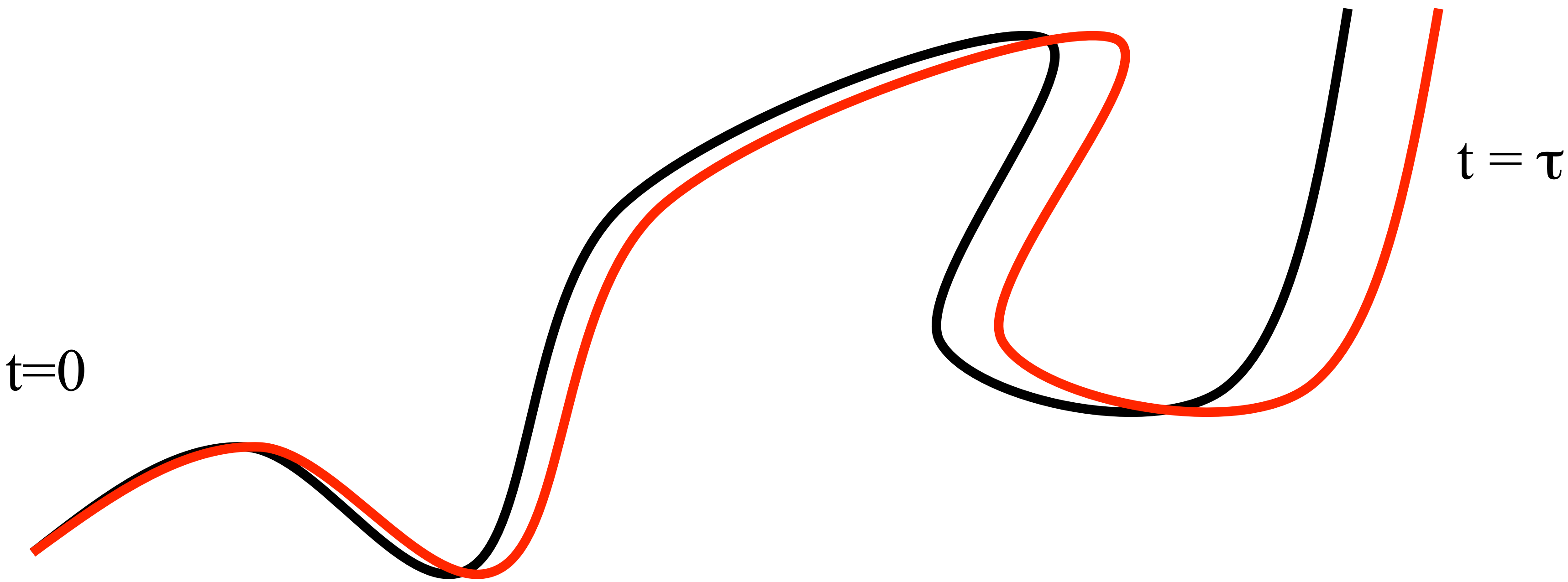
  (cioe`: è *simplettico*)
- non soffre di drift in energia

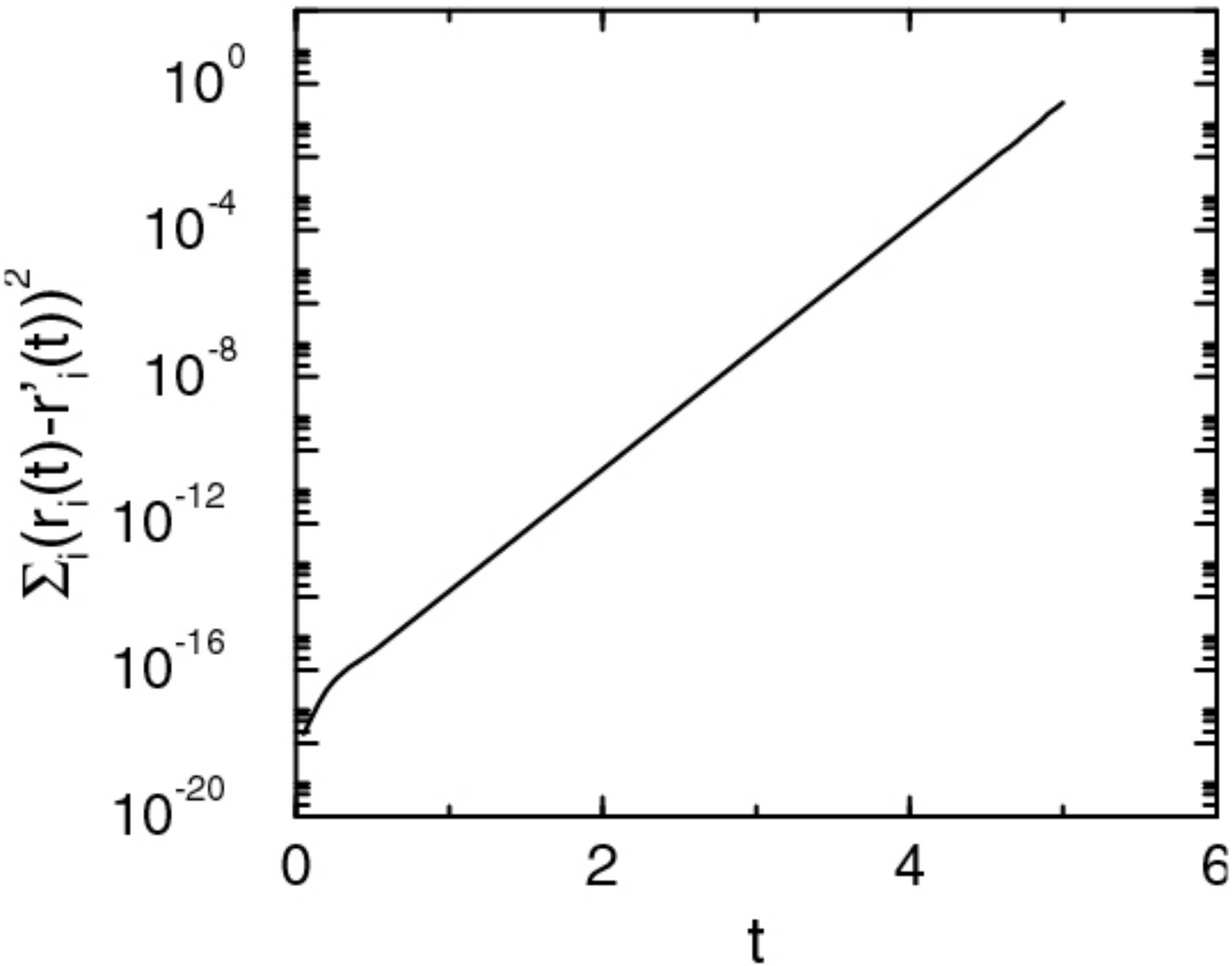
Ulteriori considerazioni (avanzato)

La dinamica di un sistema dinamico a molti corpi non-patologico è caotica, ovvero è soggetta all'instabilità di Lyapunov:

Traiettorie con condizioni iniziali diverse

divergono esponenzialmente per tempi lunghi





10^{0}
10^{-4}
10^{-8}
10^{-12}
10^{-16}
10^{-20}
$\Sigma_i(r_i(t)-r'_i(t))^2$
0
2
4
6
t

Shadow theorem
(ipotesi, in realtà)

Algoritmi "buoni" generano traiettoria "vicina" a una traiettoria reale del sistema many-body.

Le traiettorie di Verlet, essendo associate all'azione estremale, sono traiettorie "shadow".