

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Dipartimento di Matematica

Corso di Laurea in Fisica

Anno Accademico 2015/2016

TESI DI LAUREA

**Teorema di Morse e punti coniugati: eventi
rari e transizioni**

LAUREANDO: Leonardo Masci
MATRICOLA: 1071169

RELATORE: Kurt Lechner
CORRELATORE: Franco Cardin

Indice

1	Introduzione	1
2	L'indice di Morse e i punti coniugati	3
2.1	Minimo nel calcolo delle variazioni e punti coniugati	3
2.1.1	Formulazione Hamiltoniana	3
2.1.2	Costruzione della sottovarietà Lagrangiana	4
2.1.3	Teorema dei punti coniugati	6
2.2	Indice di Morse	7
2.2.1	Caso infinito-dimensionale	8
2.2.2	Indice di Morse nel Calcolo delle Variazioni	8
2.3	Teorema dell'indice di Morse	8
2.3.1	Struttura di \overline{H}_0^1	9
2.3.2	Risultato principale	12
3	Eventi rari e transizioni	13
3.1	Eventi rari in dinamica molecolare	13
3.1.1	La riduzione ACZ in dinamica molecolare	15
3.1.2	Punti coniugati ed eventi rari	16
3.2	Direzioni di instabilità in un sistema di reazione-diffusione	17
3.2.1	Riduzione finito-dimensionale	19
3.2.2	Teorema di Morse per PDE ellittiche	21
A	Appendice: Elementi di geometria simplettica e teoria dell'integrale invariante di Poincaré-Cartan	22
A.1	Trasformata di Legendre e disuguaglianza di Young	22
A.2	Geometria simplettica e integrale invariante di Poincaré-Cartan	22
B	Appendice: Elementi di Calcolo Variazionale in H^1	24
C	Appendice: la riduzione finito-dimensionale esatta	25
C.1	Riduzione ACZ	26
C.1.1	Parametrizzazione del problema variazionale	26
C.1.2	Partizione di \mathcal{H}_0	26
C.1.3	Teorema fondamentale	27
C.1.4	Riduzione finito-dimensionale	28
C.2	Riduzione ed indice di Morse	29

1 Introduzione

Nella meccanica classica, la formulazione variazionale è di importanza fondamentale. Una volta data la Lagrangiana del sistema e fissati due punti nello spazio delle configurazioni, le traiettorie fisiche del sistema sono le traiettorie che stazionarizzano il funzionale azione, ovvero le sue curve critiche. L'informazione di rendere stazionario il funzionale azione però non porta con sé il carattere della curva stazionaria: può essere minimo o sella dell'azione.

Un calcolo mostra che, data una Lagrangiana meccanica tale che l'azione sia un funzionale almeno C^2 e per tempi sufficientemente brevi, le curve che stazionarizzano l'azione sono sempre minimi per essa. Questo carattere di minimo può decadere per tempi più lunghi: se q_0 indica il punto corrispondente all'istante iniziale lungo la curva critica $q(t)$ che stazionarizza il funzionale azione, è possibile incontrare un punto \bar{q}_1 oltre il quale la minimalità del funzionale azione cessa. Questo punto è detto *punto coniugato* al punto iniziale q_0 . Precisamente, se t' indica un tempo precedente l'istante t_1 al quale si presenta il primo punto coniugato \bar{q}_1 , il principio variazionale per lo stesso funzionale azione, ristretto all'intervallo $[t_0, t']$ propone una curva stazionaria che è minimo per l'azione. Tale fenomeno, a partire da \bar{q}_1 , si può riproporre più volte per dei punti $\bar{q}_2, \bar{q}_3 \dots$: anche questi verranno chiamati punti coniugati al punto iniziale q_0 , o semplicemente *punti coniugati*.

La presenza di punti coniugati al punto iniziale è in stretta corrispondenza con un invariante topologico delle curve, detto *indice di Morse*.

L'indice di Morse è definito a partire da una forma bilineare $\beta : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ su uno spazio vettoriale V . Se $V^- := \{v \in V \mid \beta(v, v) < 0\} \cup \{0\}$ indica lo *spazio negativo* della forma β , allora l'indice di Morse di β è $M(\beta) = \dim V^-$. In questo senso l'indice di Morse conta il numero di autovalori negativi della forma bilineare. Nel caso del calcolo delle variazioni si può definire l'indice di Morse di una curva che stazionarizza l'azione come l'indice di Morse dell'Hessiano dell'azione, valutato sulla curva stazionaria in esame.

Il teorema dell'Indice di Morse nel Calcolo delle Variazioni garantisce che il numero di punti coniugati al punto iniziale lungo una curva stazionarizzante l'azione corrisponde esattamente all'indice di Morse della stessa, e risulta essere finito [1].

La finitezza dell'indice di Morse supporta fortemente l'idea che sia possibile mettere in atto un meccanismo di riduzione finito-dimensionale del problema variazionale. Più precisamente si possono ottenere le stesse informazioni passando dall'intero spazio delle curve tra due punti ad un opportuno sottospazio finito-dimensionale di questo. In pratica per trovare le traiettorie stazionarizzanti l'azione secondo questo metodo, si può risolvere un sistema con un numero finito, se pur elevato, di equazioni, invece di risolvere il problema variazionale completo. Questa riduzione finito-dimensionale mantiene varie proprietà del sistema di partenza, tra le quali l'indice di Morse e anche il fatto che sia formulabile tramite un principio variazionale. Si parla in questo caso di riduzione finito-dimensionale *esatta*.

La riduzione finito-dimensionale esatta si presta bene alle applicazioni: è impiegata per trovare "percorsi reattivi" in sistemi complessi che esibiscono buche di potenziale separate da alte barriere di potenziale, detti *eventi rari*. Questa fenomenologia è stata messa in evidenza, ad esempio, da un gruppo di chimico-fisici di Zurigo [5, 7, 6, 8]. Mantenendo invariato l'indice di Morse, si può anche studiare la minimalità della traiettoria simulata per l'azione.

Una riduzione finito-dimensionale simile (ma *non* esatta) è messa in atto per analizzare un modello di termodinamica di non-equilibrio, cioè una equazione di reazione-diffusione non-lineare. Se (Ω, g) è una varietà Riemanniana chiusa di dimensione n , Δ è il suo operatore di

Laplace-Beltrami, analogo su varietà del Laplaciano in \mathbb{R}^n , e $w : \mathbb{R} \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t}(t, x) = \Delta w(t, x) - f(w(t, x)), & x \in \Omega \\ w|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases} \quad (1.0.1)$$

La riduzione non esatta applicata a tale equazione mantiene comunque varie proprietà del sistema. Innanzitutto si nota che la 1.0.1 può essere messa in forma di *equazione L^2 -gradiente*. Questo significa che, detto \mathcal{H} lo spazio di Hilbert nel quale si prendono le w (ad esempio lo spazio di funzioni H^1), si può trovare un funzionale $J : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ con il quale l'equazione 1.0.1 è equivalente a risolvere

$$\left\langle \frac{\partial w}{\partial t}, h \right\rangle = -\partial J[w]h \quad \forall h \in \mathcal{H} \quad (1.0.2)$$

dove $\langle \cdot, \cdot \rangle$ è il prodotto scalare di \mathcal{H} e $\partial J[w]$ è il funzionale lineare dato dalla derivata di Gateaux di J , detta anche variazione di J , applicato al vettore $h \in \mathcal{H}$.

Risulta dunque che la riduzione dell'equazione mantiene questa forma di tipo gradiente: la riduzione di 1.0.2 è un'equazione finito-dimensionale

$$\frac{du}{dt} = -\nabla W(u) \quad (1.0.3)$$

dove $W : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ e $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^M$, con M finito.

Inoltre il meccanismo della riduzione è lo stesso di quella esatta; si è dunque sicuri che almeno l'indice di Morse degli equilibri rimanga invariato. Questo evidenzia che le direzioni di instabilità del sistema coincidono con quelle del ridotto: utilizzando tale schema di riduzione per simulare la dinamica del sistema completo, si può investigare con successo la stabilità delle sue soluzioni, a partire da quelle del suo ridotto.

2 L'indice di Morse e i punti coniugati

Per stabilire se una curva che stazionarizza l'azione sia minimo per essa, bisogna ricavare delle condizioni sulla Lagrangiana e sulla curva. Queste condizioni si ricavano nel contesto della geometria simplettica, con la formulazione Hamiltoniana del problema, in particolare con la teoria dell'integrale invariante di Poincaré-Cartan e la disuguaglianza di Young.

Nel contesto del calcolo variazionale in H^1 si sviluppa la teoria di Morse per sistemi meccanici e si dimostra un teorema di importanza fondamentale per le applicazioni: il numero di punti coniugati di una curva, dunque il numero delle ostruzioni alla sua minimalità, è uguale al suo indice di Morse.

2.1 Minimo nel calcolo delle variazioni e punti coniugati

L'elaborazione degli strumenti necessari per la dimostrazione del risultato principale sui punti coniugati è trattata nell'appendice A.

La ricetta per determinare se una traiettoria fisica sia minimo per il funzionale azione è la seguente:

- Si traduce il problema Lagrangiano in un problema Hamiltoniano tramite la trasformata di Legendre. Sarà dunque necessaria la coercitività locale del \dot{q} -Hessiano della Lagrangiana per garantire che la trasformata di Legendre sia diffeomorfismo globale.
- Si costruisce una sottovarietà Lagrangiana attorno al sollevamento della curva che si sta analizzando nel fibrato cotangente dello spazio delle configurazioni del sistema. Si costruirà tale sottovarietà in modo che sia trasversale alle fibre del fibrato cotangente: questo garantisce che la proiezione di fibrato di questa sottovarietà Lagrangiana sia un intorno aperto nello spazio delle configurazioni, attorno al grafico della curva in esame.
- Si valuta l'integrale invariante di Poincaré-Cartan su arbitrarie curve attorno alla curva critica contenute nella sottovarietà Lagrangiana. Tramite la disuguaglianza di Young si riesce a concludere se la curva sia minimo per l'azione o meno.

2.1.1 Formulazione Hamiltoniana

Sia Q una varietà differenziabile di dimensione n . Siano $(\varphi = (q^1, \dots, q^n), U)$, $(\tilde{\varphi} = (\tilde{q}^1, \dots, \tilde{q}^n), \tilde{U})$ due carte locali di Q che si intersecano e che trivializzino il fibrato tangente. Siano $\chi : \pi^{-1}(U) \rightarrow U \times \mathbb{R}^n$ e $\tilde{\chi} : \pi^{-1}(\tilde{U}) \rightarrow \tilde{U} \times \mathbb{R}^n$ le trivializzazioni locali. Allora, su $V = U \cap \tilde{U}$ esiste una mappa di transizione $g : V \times \mathbb{R}^n \rightarrow GL(n, \mathbb{R})$ tale che $\chi \circ \tilde{\chi}(P, v) = (P, g(P)v) \forall P \in V$, e nel caso del fibrato tangente questa è data dalla Jacobiana del "cambiamento di coordinate" $g_j^i(P) = \frac{\partial q^i}{\partial \tilde{q}^j}(P)$. Sia $F : TQ \rightarrow \mathbb{R}$. La presenza di questa mappa di transizione lineare rende lecita la nozione di \dot{q} -Hessiana di F . Infatti detta $F''_{hk}(q, \dot{q}) = \frac{\partial^2 F}{\partial \dot{q}^h \partial \dot{q}^k}(q, \dot{q})$ la \dot{q} -Hessiana di F nella carta φ e analogamente definita $\tilde{F}''_{ij}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}})$, vale

$$\tilde{F}''_{ij}(\tilde{q}, \dot{\tilde{q}}) = g_i^k g_j^h F''_{hk}(q, \dot{q}) \quad (2.1.1)$$

L'Hessiana quindi si trasforma come un tensore covariante sotto cambiamento di carta locale. D'ora in poi dunque non si specificherà la carta locale nella quale si sviluppa la teoria.

Si consideri un sistema con spazio delle configurazioni Q e Lagrangiana $L : \mathbb{R} \times TQ \rightarrow \mathbb{R}$. Si richiede che la \dot{q} -Hessiana della Lagrangiana soddisfi la *coercitività locale*:

$$\exists k > 0 \text{ t.c. } \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}(t, q, \dot{q}) \lambda^i \lambda^j \geq k \|\lambda\|^2 \forall (t, q, \dot{q}) \forall \lambda \in \mathbb{R}^n \quad (2.1.2)$$

Questo è sempre soddisfatto da Lagrangiane meccaniche.

Fissati due punti nello spazio delle configurazioni, si prendano le soluzioni alle equazioni di Eulero-Lagrange tra le curve in $H^1([0, T]; Q)$ che hanno come estremi questi due punti. Questo è lo spazio affine \mathcal{H} . Si vuole determinare quando una di queste soluzioni è minimo per il funzionale azione

$$\begin{aligned} J : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ q(\cdot) &\longmapsto J[q(\cdot)] = \int_{[0, T]} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Si consideri dunque una particolare soluzione delle equazioni di Eulero-Lagrange di L , sia $[0, T] \ni t \mapsto q(t) \in Q$. Avendo richiesto la convessità dell'Hessiano di L , è lecito passare alla formulazione Hamiltoniana tramite la trasformata di Legendre. Si avrà che

$$L(t, q, \dot{q}) \xrightarrow{\text{Legendre}} H(t, q, p) \quad (2.1.4)$$

e si rende autonomo il sistema definendo $\mathbf{H}(q^\alpha, p_\beta) = p_0 + H(t, q^i, p_j)$. La sollevata della curva $q(\cdot)$ che stazionarizza l'azione in $\mathbf{H}^{-1}(0) \subset T^*Q = T^*(\mathbb{R} \times Q)$ è data da:

$$[0, T] \ni t \mapsto \gamma(t) = \left(t, q(t), -H(t, q(t), p(t)), p(t) \right) \quad (2.1.5)$$

Le equazioni che riguardano l'evoluzione di t sono

$$\begin{cases} \dot{t} = 1 \\ \dot{p}_0 = -\frac{\partial H}{\partial t} \end{cases} \quad (2.1.6)$$

e dunque per semplificare la notazione possiamo ignorare questo grado di libertà (è banale) e porre $[0, T] \ni t \mapsto x(t) = (q(t), p(t)) \in T^*Q$ come parametrizzazione della curva critica.

2.1.2 Costruzione della sottovarietà Lagrangiana

Si costruisce dunque una sottovarietà Lagrangiana attorno a γ . A tal fine si utilizza una tecnica standard, detta *delle caratteristiche*, solitamente impiegata per la risoluzione "geometrica" dell'equazione di Hamilton-Jacobi. Tale tecnica consiste nell'ottenere la sottovarietà come unione di soluzioni, dette caratteristiche, delle equazioni di Hamilton dell'Hamiltoniana definente il problema, al variare del parametro evolutivo t . Sottoporremo la sottovarietà così ottenuta a delle richieste che garantiscano la sua adeguatezza a stabilire se γ sia minimo. Tali condizioni sono: che la sottovarietà sia un intorno aperto di γ e, condizione fondamentale, che la sottovarietà sia trasversale alle fibre della varietà base Q , ossia se $\pi : T^*Q \rightarrow Q$ è la proiezione di fibrato canonica e $\Lambda \xrightarrow{\iota} T^*Q$ la sottovarietà, allora $\pi \circ \iota$ è un diffeomorfismo. Questo garantisce che ad un punto $q \in Q$ corrisponda un solo punto $k \in \Lambda$.

Sia B^n la palla n -dimensionale. Si cerca quindi una parametrizzazione del tipo

$$\begin{aligned} [0, T] \times B^n \ni (t, v) &\xrightarrow{\iota} \iota(t, v) = x(t) + f(t, v), \text{ e } f(t, 0) = 0 \forall t \implies \\ \Lambda_{n+1} &= \left\{ \iota(t, v) \mid (t, v) \in [0, T] \times B^n \right\} \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

(una "striscia" attorno γ) tale che per ogni $v \in B^n$ fissato, $\iota(\cdot, v)$ risolva le equazioni di Hamilton, ed il suo grafico sia trasversale alle fibre. Per questa ultima richiesta, poiché si è interessati ad ottenere un intorno aperto della curva critica, basta imporre che gli spazi tangenti alla sottovarietà siano sempre trasversali alla varietà base solo lungo la curva critica.

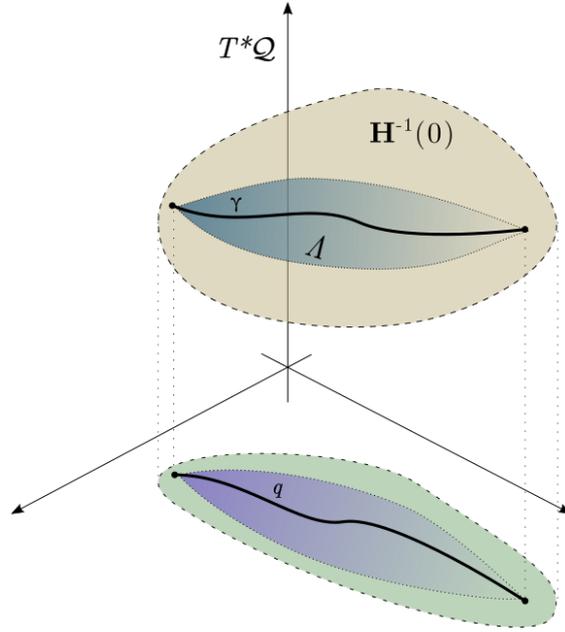


Figura 1: Disegno schematico della sottovarietà Lagrangiana in $\mathbf{H}^{-1}(0)$

Si noti innanzitutto che la parametrizzazione potrà essere scomposta nelle due parti

$$\iota(t, v) = \left(q(t) + Q(t, v), p(t) + P(t, v) \right) \quad (2.1.8)$$

Per quanto riguarda la determinazione di f quindi, si impone che la parametrizzazione restituisca caratteristiche, ovvero che risolva le equazioni di Hamilton:

$$\dot{x}(t) + \dot{f}(t, v) = \mathbb{J}\nabla H(t, x(t) + f(t, v)) \quad \forall v \in B^n \quad (2.1.9)$$

I vettori tangenti a questa varietà, $h(t, v)$, si possono ricavare ponendo

$$h(t, v) := \left. \frac{\partial f}{\partial \lambda}(t, \lambda v) \right|_{\lambda=0} \quad (2.1.10)$$

e scomponendo la dinamica sullo spazio tangente

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\dot{x}(t) + \dot{f}(t, \lambda v) \right] &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[\mathbb{J}\nabla H(t, x(t) + f(t, \lambda v)) \right] \implies \\ \dot{h}(t, v) &= \mathbb{J}\nabla^2 H(t, x(t))h(t, v) \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

si ottiene la condizione che determina i vettori tangenti, chiamata equazione alle variazioni. Condizioni iniziali naturali per la risoluzione del sistema non linearizzato sono

$$\text{C.I. del sistema completo: } Q(0, v) = 0, P(0, v) = v \quad (2.1.12)$$

(le caratteristiche devono partire tutte dallo stesso punto da cui parte γ altrimenti non si troverebbero nello stesso spazio di funzioni) e si traducono in condizioni per il sistema linearizzato, richiamando che $h = (h_q, h_p) = \left(\frac{\partial Q}{\partial v}(t, 0)v, \frac{\partial P}{\partial v}(t, 0)v \right)$:

$$\text{C.I. del sistema linearizzato: } h_q(0, v) = 0, h_p(0, v) = v \quad (2.1.13)$$

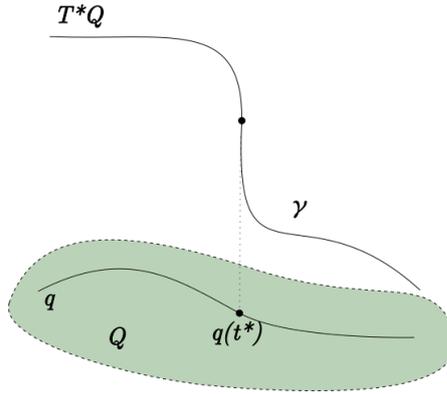


Figura 2: Un punto coniugato

Ora si deve imporre che le caratteristiche siano trasversali. Dovendo essere trasversale, la mappa $\pi \circ \iota$ deve avere rango del differenziale massimo. Questo si traduce nel richiedere che la mappa

$$\Lambda_{n+1} \ni (t, v) \mapsto (t, Q(t, v)) \in \mathcal{Q} \quad (2.1.14)$$

abbia rango del differenziale massimo lungo la curva critica $x(\cdot)$:

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial t}(t, v) \Big|_{v=0} & \frac{\partial Q}{\partial v}(t, v) \Big|_{v=0} \end{pmatrix} \neq 0 \quad \forall t \in]0, T[\quad (2.1.15)$$

Per $v = 0$, $f(t, 0) = 0$ e dunque anche $Q(t, 0) = 0 \quad \forall t$. Dunque $\frac{\partial Q}{\partial t} \Big|_{v=0} \equiv 0$. Perciò la condizione di rango massimo si traduce nel richiedere che

$$\det \frac{\partial Q}{\partial v}(t, v) \Big|_{v=0} \neq 0 \quad \forall t \in]0, T[\quad (2.1.16)$$

Si noti che, per come sono definite le h_q , la 2.1.16 implica che affinché la sottovarietà sia trasversale, l'equazione linearizzata non può ammettere soluzioni con le q -componenti nulle per ogni $v \neq 0$. Avere un punto sulla traiettoria per il quale il sistema linearizzato ammetta soluzioni con le q -componenti nulle significa che la sottovarietà Lagrangiana non può essere trasversale, quindi il procedimento di test della minimalità è reso invalido. Punti in cui si perde la trasversalità sono indice della non-minimalità della curva: questo giustifica la

Definizione 2.1.1 (Punto coniugato). Nelle ipotesi e notazioni come sopra, se esiste $t^* \in]0, T[$ tale che $h_q(t^*) = 0$, ovvero $\ker \left\{ \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v}(t^*, 0) \right\}$ non è costituito dal solo 0, allora si dice che $q(t^*)$ è un *punto coniugato* a $q(0)$. La *molteplicità* del punto coniugato è $\dim \left\{ \ker \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v}(t^*, 0) \right\}$

2.1.3 Teorema dei punti coniugati

La presenza di un punto coniugato sulla curva critica è indice del fatto che la sua sollevata non sia trasversale alle fibre di \mathcal{Q} . Si è pronti a dimostrare il

TEOREMA 2.1.1 (Minimo e punti coniugati). *Sia $\mathcal{Q} = \mathbb{R} \times Q \equiv \mathbb{R}^{n+1}$ e $L : \mathbb{R} \times TQ \rightarrow \mathbb{R}$ la Lagrangiana del sistema. Poniamo*

$$\mathcal{H} = \left\{ q(\cdot) \in H^1([0, T], Q) \mid q(0) = q_0, q(T) = q_1 \right\} \quad (2.1.17)$$

Si supponga che la Lagrangiana sia regolare ed uniformemente \dot{q} -convessa. Si consideri una curva $q(\cdot) \in \mathcal{H}$ che stazionarizza il funzionale azione definito da L :

$$\begin{aligned} J[q(\cdot)] &= \int_{[0, T]} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt \implies \\ \partial J[q(\cdot)]h &:= \left. \frac{d}{d\mu} J[q + \mu h] \right|_{\mu=0} = 0 \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

Se la curva non ammette punti coniugati a $q(0)$, allora essa è un minimo locale per il funzionale azione nella topologia della convergenza uniforme.

Dimostrazione. Sotto le ipotesi del teorema si ricava, tramite la precedente trattazione, che è lecito sollevare la curva q ad una *unica* curva $(q(\cdot), p(\cdot))$ tale che il suo grafico $\gamma(t) = (t, q(t), -H(t, q(t), p(t)), p(t))$ sia una curva in $\mathbf{H}^{-1}(0)$. Avendo richiesto che non ci siano punti coniugati a $q(0)$, si può creare una sottovarietà aperta Lagrangiana che sia trasversale alle fibre di \mathcal{Q} . La trasversalità garantisce che la proiezione tramite π della sottovarietà sia ancora un intorno aperto Ω di $q(\cdot)$ e che le curve $\bar{\gamma}$ contenute nella sottovarietà Lagrangiana possano essere proiettate *in modo unico* in curve $\bar{q}(\cdot)$ contenute in Ω . Notare però che queste curve in generale non derivano dal sollevamento tramite la trasformazione di Legendre, perciò lungo di esse non vale l'uguaglianza nella relazione di Young.

Dal teorema di Poicaré-Cartan:

$$\int_{\bar{\gamma}} pdq - Hdt = \int_{\gamma} pdq - Hdt \quad \forall \bar{\gamma} \quad (2.1.19)$$

mentre dalla disuguaglianza di Young

$$\int_{\bar{\gamma}} pdq - Hdt \leq \int_{[0, T]} L(t, \bar{q}(t), \dot{\bar{q}}(t)) dt \quad (2.1.20)$$

pertanto

$$J[q(\cdot)] = \int_{[0, T]} L(t, q(t), \dot{q}(t)) \leq \int_{[0, T]} L(t, \bar{q}(t), \dot{\bar{q}}(t)) dt = J[\bar{q}(\cdot)] \quad (2.1.21)$$

che significa proprio che q è minimo locale per il funzionale azione. \square

2.2 Indice di Morse

Si è visto che la perdita di minimalità per una curva critica si ha in presenza di punti coniugati su di essa. In questa sezione si dà una caratterizzazione equivalente tramite l'introduzione dell'indice di Morse della traiettoria fisica.

Sia \mathcal{Q} una varietà differenziabile di dimensione n e $f : \mathcal{Q} \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione almeno \mathcal{C}^2 su di essa. Sia $P \in \mathcal{Q}$ un punto stazionario di f .

Definizione 2.2.1 (Indice di Morse). L'indice di Morse del punto stazionario P è la dimensione del sottospazio di $T_P \mathcal{Q}$ sul quale l'Hessiano di f è definito negativo. In carte locali:

$$M(P) = \dim \left\{ v \in T_P \mathcal{Q} \mid \frac{\partial^2 f}{\partial q \partial q}(v, v) < 0 \right\} \cup \{0\} \quad (2.2.1)$$

Un noto teorema di analisi, il test della derivata seconda, ci mostra che un punto stazionario è minimo locale se l'Hessiano è definito positivo. Questo vuol dire che nel caso finito-dimensionale l'indice di Morse di un minimo è nullo.

2.2.1 Caso infinito-dimensionale

Questa definizione può essere estesa a generici spazi normati affini. Infatti uno spazio normato affine porta con sé una nozione di derivata direzionale (la derivata di Gateaux) e di differenziale (il differenziale di Fréchet) di un funzionale reale.

Sia $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ uno spazio normato affine, e $J : X \rightarrow \mathbb{R}$. Essendo \mathcal{H} affine il suo fibrato tangente è banale e si decompone in $T\mathcal{H} = \mathcal{H} \times \mathcal{H}_0$ dove \mathcal{H}_0 è lo spazio vettoriale sottostante \mathcal{H} . Diciamo che $q \in \mathcal{H}$ è stazionario per J se la sua derivata di Gateaux in q lungo ogni $h \in \mathcal{H}_0$ è nulla. Vorremmo quindi estendere il concetto di indice di Morse per il punto stazionario q .

Visto che J è un funzionale reale, la derivata di Gateaux lungo un $h \in \mathcal{H}_0$ si può scrivere:

$$\partial J[q]h = \left. \frac{d}{d\mu} J[q + \mu h] \right|_{\mu=0} \quad (2.2.2)$$

Dunque è permesso anche definire un Hessiano del funzionale:

$$\partial^2 J[q](h, k) := \left. \frac{\partial^2}{\partial \mu \partial \nu} J[q + \mu h + \nu k] \right|_{\mu=\nu=0} \quad (2.2.3)$$

Si può in questo modo definire l'indice di Morse del punto stazionario q di J come nel caso finito dimensionale:

Definizione 2.2.2. Sia $q \in \mathcal{H}$ stazionario per J . L'indice di Morse di q è la dimensione del sottospazio di \mathcal{H}_0 sul quale $\partial^2 J[q](\cdot, \cdot)$ è definito negativo:

$$M(q) = \dim \{h \in \mathcal{H}_0 \mid \partial^2 J[q](h, h) < 0\} \cup \{0\} \quad (2.2.4)$$

2.2.2 Indice di Morse nel Calcolo delle Variazioni

Nel caso del Calcolo delle Variazioni si ha un funzionale reale, il funzionale azione, definito su uno spazio affine di curve fissate tra due punti. Lo spazio affine di curve più naturale, \mathcal{H} , è dato dalle (classi di) curve in $H^1([0, T]; \mathcal{Q})$ tra due punti fissati $q_0, q_1 \in \mathcal{Q}$. Lo spazio vettoriale sottostante \mathcal{H} , \mathcal{H}_0 , è dato dalle curve in H^1 che si annullano agli estremi 0 e T , le *variazioni*. È noto che le curve che rendono stazionaria l'azione sono le traiettorie fisiche che risolvono le equazioni di Eulero-Lagrange. Si può quindi parlare di indice di Morse della traiettoria fisica, che sarà quindi l'indice di Morse nel senso di spazio affine. Per i dettagli della formulazione variazionale in H^1 si veda l'appendice B.

In principio non è detto che l'indice di Morse sia finito. La struttura dello spazio di funzioni scelto e la natura del problema farà in modo che in effetti risulti finito.

2.3 Teorema dell'indice di Morse

Per questa trattazione si prendono Lagrangiane meccaniche, ovvero della forma

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} |\dot{q}|^2 - V(q) \quad (2.3.1)$$

Si può quindi esplicitare l'Hessiano dell'azione in termini di V . Un rapido calcolo mostra che

$$\partial^2 J[q](h_1, h_2) = \int_{[0, T]} \left[\dot{h}_1 \cdot \dot{h}_2 - \frac{\partial^2 V}{\partial q^i \partial q^j}(q) h_1^i h_2^j \right] dt \quad (2.3.2)$$

Prendendo le variazioni in un sottospazio denso in H_0^1 ,

$$\overline{H}_0^1 = \left\{ h \in H_0^1 \mid h \text{ è } C^1 \text{ a tratti} \right\} \quad (2.3.3)$$

si può specificare ulteriormente l'Hessiano integrando per parti, tenendo conto delle possibili finite discontinuità nelle derivate delle variazioni:

$$\begin{aligned} \text{Se } t_\ell \text{ è l' } \ell\text{-esimo punto di discontinuità di } \dot{h}, \Delta \dot{h}(t_\ell) &:= \lim_{\delta \rightarrow 0} [\dot{h}(t_\ell + \delta) - \dot{h}(t_\ell)] \Rightarrow \\ \partial^2 J[q](h_1, h_2) &= \sum_{\ell} \Delta \dot{h}_1(t_\ell) \cdot h_2(t_\ell) - \int_{[0, T]} \left[\ddot{h}_1 - \frac{\partial^2 V}{\partial q \partial q}(q) h_1 \right] \cdot h_2 dt \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Si noti che il termine in [...] nell'integrale corrisponde alla linearizzazione delle equazioni di Lagrange.

2.3.1 Struttura di \overline{H}_0^1

Definizione 2.3.1 (Curve Jacobi). Una curva h si dice Jacobi se risolve l'equazione linearizzata di Lagrange attorno ad una curva critica $q(t)$ per l'azione:

$$\ddot{h}(t) - V''(q(t))h(t) = 0 \quad (2.3.5)$$

Condizioni iniziali naturali per questo sistema di equazioni differenziali lineari sono

$$h(0) = u, \dot{h}(0) = v, (u, v) \in \mathbb{R}^{2n} \quad (2.3.6)$$

Le curve Jacobi danno una informazione importante sull'Hessiano dell'azione, in particolare sulla sua degenerazione:

Definizione 2.3.2 (Nullità dell'Hessiano). La nullità dell'Hessiano in q è lo spazio vettoriale composto dalle curve $h \in \overline{H}_0^1$ tali che

$$\partial^2 J[q](h, \bar{h}) = 0 \quad \forall \bar{h} \in \overline{H}_0^1 \quad (2.3.7)$$

Se l'Hessiano ha nullità non banale in q , allora si dirà che l'Hessiano è degenere in q .

Proposizione 2.3.1 (Struttura della nullità). *La nullità dell'Hessiano dell'azione in una curva che la stazionarizza è data da tutte e sole le curve Jacobi che si annullano agli estremi*

Dimostrazione. Se $[0, T] \ni t \mapsto h(t)$ è Jacobi allora è al minimo C^2 , perciò non ha discontinuità nella derivata prima, e dunque per ogni \bar{h}

$$\partial^2 J[q](h, \bar{h}) = \sum_{\ell} \underbrace{\Delta \dot{h}}_{\equiv 0} \cdot \bar{h} - \int_{[0, T]} \underbrace{[\ddot{h} - V''(q)h]}_{\equiv 0} \cdot \dot{\bar{h}} dt = 0 \quad (2.3.8)$$

Viceversa se h è nella nullità dell'Hessiano in q , si prenda

$$\bar{h}(t) = f(t) \left[\ddot{h}(t) - V''(q(t))h(t) \right] \quad (2.3.9)$$

dove f è una funzione regolare positiva che si annulla in corrispondenza di ogni discontinuità di \dot{h} . Allora

$$0 = \partial^2 J[q](h, \bar{h}) = \sum_{\ell} \Delta \dot{h}(t_{\ell}) \cdot \underbrace{\bar{h}(t_{\ell})}_{\equiv 0} - \int_{[0, T]} f(t) \left| \ddot{h} - V''(q)h \right|^2 dt \quad (2.3.10)$$

dunque h deve essere Jacobi. \square

Per dimostrare che l'indice di Morse è finito bisogna esplicitare la struttura di \overline{H}_0^1 . Sarà essenziale la seguente

Proposizione 2.3.2. *Per una Lagrangiana meccanica di azione $\int_{[0, T]} L(t, q(t), \dot{q}(t)) dt$, una curva critica $q(t)$ è minimo per l'azione a patto che si prenda $[0, T]$ sufficientemente piccolo. In particolare basta*

$$T \leq \sqrt{2m \left[\max_{t \in [0, T]} \left(\max |\text{spec } V''(q(t))| \right) \right]^{-1}} \quad (2.3.11)$$

dove $\text{spec } V''$ è lo spettro di V''

Dimostrazione. Si veda [2] \square

Quindi data una curva critica per l'azione $q(\cdot)$, esiste una suddivisione finita dell'intervallo $[0, T]$,

$$\tau_0 = 0 \leq \tau_1 \leq \dots \leq \tau_m = T \quad (2.3.12)$$

tale che ogni segmento della curva critica sia *minimo* per l'azione tra i punti $[q(\tau_{\alpha}), q(\tau_{\alpha+1})]$ sull'intervallo $[\tau_{\alpha}, \tau_{\alpha+1}]$. Questo significa precisamente che per ogni α , $q(\tau_{\alpha+1})$ non sia coniugato a $q(\tau_{\alpha})$. Si costruisce quindi un sottospazio di \overline{H}_0^1 corrispondente alla suddivisione $\{\tau_{\alpha}\}_{\alpha=0}^m$, costituito dalle curve Jacobi $h(\cdot)$ tali che

1. $h(0) = 0 = h(T)$
2. risolvano l'equazione linearizzata di Lagrange *anche* su ogni intervallo $[\tau_{\alpha}, \tau_{\alpha+1}]$ e siano C^{∞} su di essi
3. siano al minimo C^0 nei punti τ_{α}

Questo sottospazio lo si chiama $T_q\{\tau\}$.

Proposizione 2.3.3. $T_q\{\tau\}$ ha dimensione finita, precisamente $n(m-1)$.

Dimostrazione. Si considerino le equazioni di Hamilton per l'Hamiltoniana coniugata alla Lagrangiana del sistema tramite Legendre. È chiaro che le equazioni linearizzate delle prime sono uguali alla linearizzazione delle seconde. Perciò si prenda il flusso Hamiltoniano

$$\Phi^t(q_0 + u, p_0 + v) = \left(\hat{Q}(t, q_0 + u, p_0 + v), \hat{P}(t, q_0 + u, p_0 + v) \right) \quad (2.3.13)$$

In questo caso meccanico si ha necessariamente che

$$\hat{P} = \frac{d}{dt} \hat{Q} \quad (2.3.14)$$

e questo si riflette sulla linearizzazione, dando che la parte di momento coniugato delle h è proprio \dot{h} . Le curve Jacobi in $T_q\{\tau\}$ risolvono il problema linearizzato su $[\tau_\alpha, \tau_{\alpha+1}]$, e dunque sono date dal flusso linearizzato di Φ^t con $t \in [\tau_\alpha, \tau_{\alpha+1}]$:

$$\begin{pmatrix} h(t) \\ \dot{h}(t) \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v} & \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v} \\ \frac{\partial \hat{P}}{\partial u} & \frac{\partial \hat{P}}{\partial v} \end{array} \right) \Big|_{(t, q(\tau_\alpha), p(\tau_\alpha))} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (2.3.15)$$

Avendo richiesto che $q(\tau_{\alpha+1})$ non sia coniugato a $q(\tau_\alpha)$, necessariamente

$$\det \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v}(t, q(\tau_\alpha), p(\tau_\alpha)) \neq 0 \quad (2.3.16)$$

quindi è invertibile. Assegnati i dati iniziali (u_α, v_α) ad ogni sottointervallo, le soluzioni dell'equazione linearizzata che soddisfano $(h(\tau_\alpha), \dot{h}(\tau_\alpha)) = (u_\alpha, v_\alpha)$ sono uniche, infatti

$$\begin{pmatrix} u_{\alpha+1} \\ v_{\alpha+1} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial \hat{Q}}{\partial u} & \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v} \\ \frac{\partial \hat{P}}{\partial u} & \frac{\partial \hat{P}}{\partial v} \end{array} \right) \Big|_{(t, q(\tau_{\alpha+1}), p(\tau_{\alpha+1}))} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(t) & B(t) \\ \dot{A}(t) & \dot{B}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\alpha \\ v_\alpha \end{pmatrix} \quad (2.3.17)$$

e sono determinate da

$$\begin{cases} v_\alpha = B^{-1}(u_{\alpha+1} - Au_\alpha) \\ v_{\alpha+1} = \dot{A}u_\alpha + \dot{B}B^{-1}(u_{\alpha+1} - Au_\alpha) \end{cases} \quad (2.3.18)$$

dove le matrici sono valutate in $t = \tau_{\alpha+1}$. Quindi si genera tutto $T_q\{\tau\}$ con una curva per intervallo, dando

$$\dim T_q\{\tau\} = n(m-1) \quad (2.3.19)$$

□

In opposizione alla parte finito-dimensionale di \overline{H}_0^1 , si definisce la parte infinito-dimensionale

$$Q_q = \left\{ k(\cdot) \in \overline{H}_0^1 \mid k(\tau_\alpha) = 0 \right\} \quad (2.3.20)$$

e vale la seguente

Proposizione 2.3.4. 1. $\overline{H}_0^1 = T_q\{\tau\} \oplus Q_q$.

2. $T_q\{\tau\}$ e Q_q sono ortogonali rispetto alla forma bilineare definita da $\partial^2 J[q](\cdot, \cdot)$.

3. La restrizione di $\partial^2 J[q]$ a Q_q è definita positiva.

Dimostrazione. 1. Si prenda una $r \in \overline{H}_0^1$. Questa definisce $m-1$ vettori $r(\tau_\alpha)$, $\alpha = 1 \dots m-1$ che a loro volta definiscono relative curve Jacobi h_α tra $q(\tau_\alpha)$ e $q(\tau_{\alpha+1})$. Dunque è definito un unico vettore $h \in T_q\{\tau\}$ e dunque necessariamente un $k = r - h \in Q_q$.

2. Per ogni $h \in T_q\{\tau\}$ e $k \in Q_q$ si ha

$$\partial^2 J[q](h, k) = \sum_\alpha \Delta \dot{h}(\tau_\alpha) \cdot \underbrace{k(\tau_\alpha)}_{\equiv 0} - \int_{[0, T]} \underbrace{[\ddot{h} - V''(q)h]}_{\equiv 0} \cdot k dt = 0 \quad (2.3.21)$$

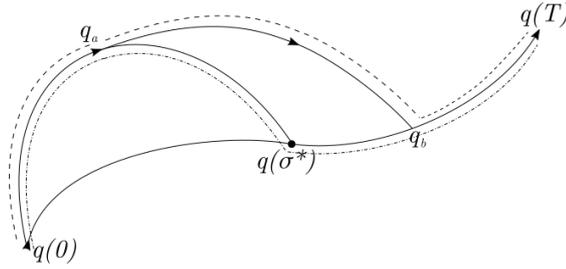


Figura 3: In trattini \hat{q} , in punti-e-trattini $\hat{q} + h_{s,\varepsilon}$

3. Si è presa la suddivisione dell'intervallo $[0, T]$ in modo da non avere mai gli estremi coniugati l'uno all'altro. Ma allora l'Hessiano dell'azione è semidefinito positivo su ogni segmento di curva tra due estremi della suddivisione, perciò è semidefinito positivo sulle Q_q . Dunque si supponga che per un $k \in Q_q \setminus \{0\}$ si abbia $\partial^2 J[q](k, k) = 0$. Allora presa una qualsiasi $r \in \overline{H}_0^1$ e decomposta nelle sue componenti su $T_q\{\tau\}$ e Q_q , rispettivamente r_T e r_Q , $\partial^2 J[q](k, r) = \partial^2 J[q](k, r_T + r_Q) = \partial^2 J[q](k, r_Q)$. Ma $\partial^2 J[q]$ è semidefinita positiva su Q_q , ed è un fatto ben noto che per una forma bilineare simmetrica semidefinita positiva un vettore di norma nulla è nel kernel della forma: basta prendere $g : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ simmetrica semidefinita positiva, considerare v t.c. $g(v, v) = 0$, prendere $c \in \mathbb{R}$ e scrivere

$$\begin{aligned} 0 \leq g(v + cw, v + cw) &= g(v, v) + 2cg(v, w) + c^2g(w, w) \Leftrightarrow \\ [g(v, w)]^2 - g(v, v)g(w, w) &\leq 0 \Leftrightarrow g(v, w) \equiv 0 \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

Ma il kernel di questa forma è proprio costituito dalle variazioni Jacobi. Infine l'unica variazione Jacobi in Q_q è lo zero, dunque $\partial^2 J[q]$ è definita positiva su Q_q □

2.3.2 Risultato principale

Quest'ultima proposizione ci assicura che solo le curve Jacobi in $T_q\{\tau\}$ contribuiscono all'indice di Morse della curva critica. Si è perciò ottenuta una stima a priori per l'indice: è di certo finito e non potrà essere più grande di $n(m - 1)$. Ora si è pronti a concludere con il

TEOREMA 2.3.1 (dell'indice di Morse). *L'indice di Morse di una curva critica per l'azione è esattamente il numero di punti coniugati all'estremo q_0 della curva, contati con la loro molteplicità.*

Dimostrazione. Sia $q(\cdot)$ la curva critica in questione. Si consideri la σ -famiglia di problemi variazionali

$$J_\sigma : \mathcal{H}_\sigma \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \sigma \in [0, T], \quad J_T = J \quad (2.3.23)$$

dove \mathcal{H}_σ è lo spazio delle curve in H^1 tra q_0 e $q(\sigma)$. Per \mathcal{H}_σ si prendano le variazioni sempre \overline{H}_0^1 (è denso in H_0^1 : ogni azione almeno continua si estende così immediatamente a H_0^1).

L'idea è questa: per σ piccoli, q è sempre minimo per J_σ , e dunque l'indice di Morse è costantemente nullo. Una volta raggiunto un punto coniugato a q_0 al tempo σ^* , si possono trovare esattamente $M = \dim \left\{ \ker \frac{\partial Q}{\partial v}(\sigma^*, 0) \right\}$ curve Jacobi indipendenti sulle quali si annulla $\partial^2 J[q]$; tramite queste si possono costruire altrettante curve nello spazio negativo, contribuendo dunque di M all'indice di Morse.

Sia dunque σ^* il tempo del primo punto coniugato. $\ker \frac{\partial \hat{Q}}{\partial v}(\sigma^*, 0)$ è non vuoto: siano $\{h^*\}$ le variazioni indipendenti non-nulle che lo costituiscono. Si ricordi che queste sono necessariamente curve Jacobi. Ad ognuna di queste si associa una variazione $h_s^* \in \overline{H}_0^1$ con $s > 0$ definita da $h_s^* = sh^*$. Lungo questa s -famiglia di variazioni si può fare uno sviluppo di Taylor dell'azione attorno alla curva critica:

$$\begin{aligned} J[q + h_s^*] &= J[q] + \underbrace{\frac{d}{ds} J[q + h_s^*] \Big|_{s=0}}_{=0 \text{ perché } q \text{ è critica}} s + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{d^2}{ds^2} J[q + h_s^*] \Big|_{s=0}}_{=0 \text{ perché } h^* \text{ è Jacobi}} s^2 + O(s^3) = \\ &= J[q] + O(s^3) \end{aligned} \quad (2.3.24)$$

Ora si consideri il problema variazionale definito dalla stessa azione ma tra i due punti

$$q_a = q(\sigma^* - \varepsilon) + sh^*(\sigma^* - \varepsilon), \quad q_b = q(\sigma^* + \varepsilon), \quad \varepsilon > 0 \quad (2.3.25)$$

Questo ammette curva critica che è un minimo per ε piccoli. Tale curva si può estendere ad una curva \hat{q} in \mathcal{H} semplicemente incollandola alla curva critica q per $t > \sigma^* + \varepsilon$. Denotando con $h_{s,\varepsilon} = \hat{q} - q$, si ha che $h_{s,\varepsilon}$ è una variazione in \overline{H}_0^1 (Figura 3). Si può quindi scrivere

$$J[\hat{q}] \stackrel{\text{Taylor}}{=} J[q] + \frac{1}{2} \partial^2 J[q](h_{s,\varepsilon}, h_{s,\varepsilon}) + O(\|h_{s,\varepsilon}\|^3) < J[q + h_s^*] = J[q] + O(s^3) \quad (2.3.26)$$

Se si prende $\varepsilon \approx s$ allora $O(\|h_{s,\varepsilon}\|^3) = O(s^3)$ e quindi si ha che necessariamente

$$\partial^2 J[q](h_{s,\varepsilon}, h_{s,\varepsilon}) < 0 \quad (2.3.27)$$

Potendo costruire una $h_{s,\varepsilon}$ per ogni h^* nella nullità, si ha che l'indice di Morse, nel passare attraverso il primo punto coniugato, salta da 0 a M .

Si conclude osservando che procedendo con i problemi variazionali con $\sigma > \sigma^*$, l'indice di Morse non può cambiare per l'ovvia continuità in σ , a meno che non si incontri un'altro punto coniugato, che contribuisce all'indice con la sua dimensione. \square

3 Eventi rari e transizioni

La teoria fin qui elaborata si fonda sulla conoscenza di una traiettoria che stazionarizzi l'azione. Nelle applicazioni la determinazione di questa traiettoria è spesso molto difficile. Si deve ricorrere a metodi approssimati per risolvere la dinamica. Se però si è interessati alla stabilità dei moti che si ricavano, è necessario un metodo ben mirato: per esempio, una riduzione che mantenga il carattere delle soluzioni. Una di queste riduzioni è la *riduzione finito-dimensionale esatta di Amann-Conley-Zehnder*, trattata in dettaglio nell'appendice C.

Nella presente sezione si applicano i risultati ottenuti nelle sezioni precedenti alla dinamica molecolare e ad un modello di termodinamica di non-equilibrio.

3.1 Eventi rari in dinamica molecolare

In molti sistemi complessi d'interesse in chimica, biologia e fisica, le superfici equipotenziali esibiscono dei minimi pronunciati, separati da alte barriere. In questi casi si osserva che la dinamica è caratterizzata da lunghi periodi di oscillazioni attorno ad un minimo, seguiti da bruschi salti, attraverso i quali si raggiungono altri minimi. Queste *transizioni* da minimo a minimo sono rare, ma cruciali, perché rappresentano cambiamenti importanti nel sistema, detti

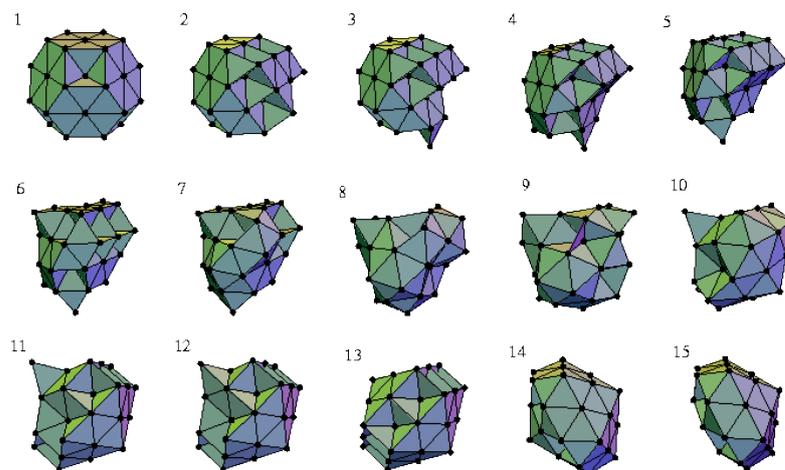


Figura 4: Esempio di evento raro: isomerizzazione di un cluster di 38 atomi, dallo stato ottaedrico allo stato icosaedrico. Tale transizione è stata trattata anche tramite l'algoritmo esposto nella sezione 3.1.1. Immagine presa da <http://doyle.chem.ox.ac.uk/jon/PhD2/node47.html>

eventi rari, come lo svolgersi di una reazione chimica o la modifica della conformazione di una molecola (Figura 4). Lo studio di questi eventi è spesso affrontato tramite metodi numerici e simulazioni della dinamica molecolare. Nei casi di maggiore interesse però la scala temporale e la corrugatezza della superficie equipotenziale, rendono le simulazioni troppo costose da un punto di vista computazionale.

Un approccio più economico introdotto in [5, 6] si ottiene se si considera l'aspetto variazionale del problema: per trovare la traiettoria che rappresenta l'evento raro, si studiano le traiettorie che connettono le due configurazioni di equilibrio, e se ne seleziona una che sia "fisica", ovvero stazionarizzi l'azione. Questo è, a tutti gli effetti, il problema variazionale tra due punti fissati considerato in precedenza.

La prima implementazione di un algoritmo numerico atto alla risoluzione di tale problema variazionale è fatta tramite una discretizzazione di arbitrarie traiettorie che connettono le configurazioni di equilibrio. Il funzionale azione viene poi valutato su queste traiettorie discretizzate, valutando anche un "funzionale costo" che misura la deviazione della traiettoria di prova dalla conservazione dell'energia; infatti, essendo discretizzate, non è detto che l'energia si conservi lungo di esse. Bisogna però osservare che questo approccio porta numerose difficoltà, tra le quali la minimizzazione incrociata del funzionale azione con il funzionale costo, e, più fondamentalmente, il fallimento dell'algoritmo in presenza di punti coniugati. Infatti per quanto visto nelle precedenti sezioni, se sulla traiettoria è presente un punto coniugato, questa non è più minimo per l'azione. In questo caso dunque non si può ottenere la traiettoria fisica minimizzando l'azione.

Un algoritmo più robusto, elaborato in [8], risolve queste difficoltà utilizzando lo schema di riduzione ACZ, utilizzato per trasformare il problema variazionale nella risoluzione di un sistema di equazioni e nella la ricerca del punto fisso di una contrazione. Tale algoritmo circumnaviga la difficoltà della minimizzazione, poiché non si basa su di essa. Nella prossima sezione verrà esposto tale algoritmo.

3.1.1 La riduzione ACZ in dinamica molecolare

Si consideri un sistema classico di n particelle con spazio delle configurazioni Q e Lagrangiana L di tipo meccanico:

$$L(q, \dot{q}) = T(\dot{q}) - V(q) \quad (3.1.1)$$

Si prenda l'Hessiano del potenziale limitato:

$$\sup_{q \in Q} V''(q) = C < +\infty \quad (3.1.2)$$

Siano $q_0, q_1 \in Q$ le configurazioni delle buche di potenziale, e $\mathcal{H} = \{q \in H^1([0, T]; Q) \mid q(0) = q_0, q(T) = q_1\}$. Come base di \mathcal{H}_0 si sceglie la base di Fourier, e si rappresenta \mathcal{H} tramite di essa:

$$\begin{aligned} \varphi_k &= \sqrt{\frac{2}{T}} \sin\left(\frac{kt}{T}\right) \implies \mathcal{H}_0 \ni h(t) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \langle h, \varphi_k \rangle \varphi_k = \sum_{k \in \mathbb{N}} h^k \varphi_k \\ \mathcal{H} \ni q(t) &= q_0 + (q_1 - q_0) \frac{t}{T} + \sum_{k \in \mathbb{N}} h^k \varphi_k = Q(t) + h(t) \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

si è scelto quindi un segmento congiungente q_0 a q_1 come punto fissato dello spazio \mathcal{H} . Fissata tale curva nello spazio \mathcal{H} , l'azione è un funzionale su \mathcal{H}_0 :

$$\begin{aligned} J : \mathcal{H}_0 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ h &\longmapsto J[h] = \tilde{J}[Q + h] = \int_{[0, T]} L\left(Q(t) + h(t), \dot{Q}(t) + \dot{h}(t)\right) dt \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Affinché si possa ridurre il problema variazionale definito da J , bisogna scegliere adeguatamente N :

Proposizione 3.1.1. *Nelle notazioni introdotte nell'appendice C, per $N \geq \lfloor \frac{T\sqrt{C}}{\pi} \rfloor$, dove $\lfloor x \rfloor$ indica il più grande intero non maggiore di x , ed ogni $\bar{u} \in \mathcal{U}_N$, l'operatore non-lineare*

$$F(\bar{u}, \cdot) := \mathbb{Q}_N \nabla J(\bar{u} + \cdot) : \mathcal{V}_N \rightarrow \mathcal{V}_N \quad (3.1.5)$$

è fortemente monotono.

Dimostrazione. Calcolo che si può trovare in [4] □

Questa è in effetti una stima di quante componenti di Fourier bisogna trattenere per mantenere sufficienti informazioni sulla traiettoria, a partire dalla scala temporale e il massimo dell'Hessiano del potenziale.

La riduzione quindi consiste nello stazionarizzare il funzionale azione "ridotto" $\mathcal{U}_N \cong \mathbb{R}^N \ni u \mapsto W(u) = J[u + \tilde{v}(u)] \in \mathbb{R}$, che, una volta espressa u in coefficienti di Fourier, $u = u^k \varphi_k$, consiste nel risolvere il sistema *algebrico*

$$\frac{\pi^2 k^2}{T^2} u^k = \left[\nabla V(Q + u + \tilde{v}(u)) \right]^k \quad \forall 1 \leq k \leq N \quad (3.1.6)$$

dove si somma con Q affinché l'argomento del potenziale sia in \mathcal{H} .

La riduzione è esatta quando si determina completamente \tilde{v} ; nelle applicazioni però la si può solo approssimare, non potendo reiterare il metodo di Newton all'infinito. La riduzione ACZ quindi viene impiegata nel seguente algoritmo per determinare una buona approssimazione della transizione tra due configurazioni di equilibrio:

- Si fissano i due punti q_0 e q_1 .
- Si sceglie una traiettoria “di partenza” ϱ_0 , che può essere una retta o una traiettoria approssimata ottenuta con altri metodi, come la discretizzazione. Il ruolo di questa traiettoria è di fornire dei coefficienti di Fourier iniziali per la risoluzione, in generale numerica, del sistema finito-dimensionale algebrico.
- Si stabilisce un cutoff N a partire da una stima del massimo dell’Hessiano del potenziale.
- Comincia la riduzione: si trattengono le prime N componenti di Fourier di ϱ_0 e si inseriscono nel sistema algebrico, che viene risolto numericamente. Se ne ricava l’insieme degli N coefficienti di Fourier della parte finito-dimensionale della traiettoria ridotta, che chiamiamo u_1 .
- Si esplicita \tilde{v} partendo da u_1 con il metodo di Newton. In pratica non si potrà ottenere la \tilde{v} con tutte le sue componenti di Fourier, ma se ne avranno solo fino ad un numero finito M . Si ottiene così una approssimazione della “coda”, v_1 .
- Si pone $\varrho_1 = u_1 + v_1$ e si reitera il processo da capo.

3.1.2 Punti coniugati ed eventi rari

Si consideri il problema analogo al problema variazionale trattato fin qui, ossia si consideri un sistema di Lagrangiana L e si cerchino le soluzioni alle sue equazioni di Eulero-Lagrange che “partano” da un punto q_0 con velocità iniziale \dot{q}_0 . Prendendo \dot{q}_0 come un parametro e variandolo, si ottiene una famiglia di curve che passano per q_0 . L’inviluppo di tale famiglia, se esiste, è una curva detta *caustica*. Il punto dove la caustica è tangente ad una traiettoria con \dot{q}_0 specificato si dice *fuoco cinematico*. Il fuoco cinematico ha una interpretazione dinamica: è il punto di intersezione tra due curve della famiglia che hanno velocità iniziali distanti di un infinitesimo. In questo senso, la presenza di un fuoco cinematico misura la sensibilità della traiettoria a variazioni della velocità iniziale. In [9] si dimostra che una curva che stazionarizza l’azione è minimo se non presenta fuochi cinematici. È dunque chiaro che i fuochi cinematici sono i punti coniugati sulla traiettoria. In effetti, seguendo la dimostrazione del teorema di Morse, si nota che quando si attraversa un punto coniugato si assiste alla nascita di un autovalore nullo nell’Hessiano dell’azione. Nello spazio delle traiettorie, si può seguire questa direzione “piatta” (come se fosse una direzione di “equilibrio”) per trovare nuove soluzioni che soddisfino le stesse condizioni iniziali (punto iniziale e finale), con velocità diverse.

Come visto in precedenza, sono le curve Jacobi a popolare la nullità dell’Hessiano dell’azione. Le curve Jacobi sono le curve che risolvono le equazioni linearizzate di Lagrange; devono quindi risolvere anche le equazioni linearizzate di Hamilton per lo stesso sistema, visto che la linearizzazione del flusso è il flusso della linearizzazione. Nelle notazioni della sezione 2.1.2, il test sulla trasversalità è

$$\mathcal{J} = \det \frac{\partial Q}{\partial v}(t, 0) \neq 0 \quad (3.1.7)$$

In questo senso le curve Jacobi misurano la sensibilità delle curve critiche a variazioni di momento iniziale: se una curva Jacobi ha un punto trasversale alle fibre, ovvero se è presente un punto coniugato sulla curva critica, una curva critica “vicina” la intersecherà nel fuoco cinematico, quindi nel punto coniugato. \mathcal{J} quindi può essere messo in relazione con la “densità di curve critiche” tra due punti fissati. Per fare questo viene introdotta la quantità $\mathcal{D} = \frac{1}{\mathcal{J}}$, detta *determinante di Van Vleck*, che diverge sui punti coniugati: infatti raggiunto un punto coniugato molte curve critiche lo connettono al punto iniziale. Il determinante di Van Vleck quindi diverge su traiettorie con indice di Morse non-nullo: lo si prende come densità di curve critiche.

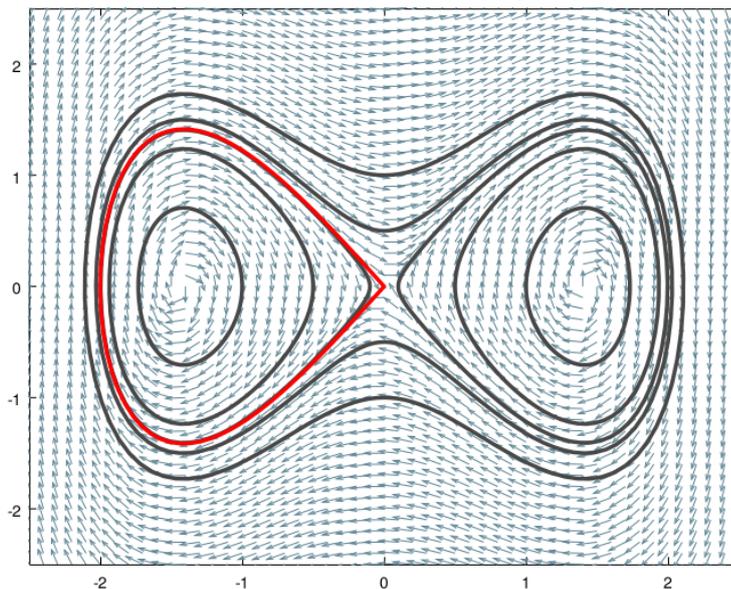


Figura 5: Ritratto in fase di un punto materiale in una doppia buca di potenziale. Il campo vettoriale è normalizzato.

In [7] il ruolo dell'indice di Morse nell'analisi degli eventi rari viene esplicitato considerando proprio questa densità di curve critiche rappresentata dal determinante di Van Vleck. Ad un evento raro, cioè una traiettoria *reattiva*, corrisponderà una *bassa* densità di curve critiche. Tale asserzione è sostenuta da numerose simulazioni svolte sempre in [7], e anche da un'argomentazione intuitiva: se si considera un punto materiale in una doppia buca di potenziale (figura 5), si osserva che le traiettorie vicine agli equilibri stabili presentano due punti coniugati a periodo. Lo stesso vale per le traiettorie più energetiche, che oscillano tra i due equilibri stabili. Tra le due però esistono delle traiettorie, le separatrici, che presentano un solo punto coniugato. Queste traiettorie non oscillano. In questo senso, l'indice di Morse misura il carattere oscillatorio della traiettoria. Considerando i sistemi che esibiscono eventi rari quindi, si avranno traiettorie vicine agli equilibri, che avranno carattere caotico e oscillatorio, dunque un alto indice di Morse, e traiettorie che “saltano” da una configurazione di equilibrio all'altra, oscillando poco e perciò con indice di Morse più basso. Gli eventi rari saranno composti di un periodo stabile oscillatorio in cui l'indice di Morse cresce (come nell'oscillatore armonico), seguito da una veloce transizione poco oscillatoria, nella quale l'indice di Morse non varierà di molto (come se la traiettoria fosse libera).

Si possono quindi caratterizzare gli eventi rari in due modi equivalenti: traiettorie con basso determinante di Van Vleck, o traiettorie con basso indice di Morse rispetto alle traiettorie caotiche ed oscillatorie attorno alle configurazioni di minimo stabili che vengono connesse dall'evento raro.

3.2 Direzioni di instabilità in un sistema di reazione-diffusione

In [10] si sviluppa un modello “fluidodinamico” *efficace* della termodinamica di non-equilibrio, chiamato *teoria delle fluttuazioni macroscopiche*. In tale teoria si considerano sistemi termodinamici in contatto con dei bacini termici e sottoposti a campi esterni. Tramite l'ipotesi di *equilibrio*

locale, si possono definire delle *variabili collettive*, come la densità di massa, carica, energia e le relative correnti. Se ne ricavano quindi le leggi di evoluzione temporale e la probabilità di osservare fluttuazioni macroscopiche.

In questa sezione si studia una semplificazione delle equazioni di evoluzioni che ne vengono ricavate, data dall'equazione di reazione-diffusione

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \Delta w - f(w), \quad x \in \Omega \quad (3.2.1)$$

dove (Ω, g) è una varietà Riemanniana chiusa, Δ è l'operatore di Laplace-Beltrami su Ω , definito a partire dalla connessione di Levi-Civita ∇ di Ω : $\Delta w = \text{tr}(\nabla^2 w)$. Si prenderanno le $w \in \mathcal{H} = \left\{ w \in H^1(\mathbb{R} \times \Omega; \mathbb{R}) \mid w|_{\partial\Omega} = 0 \right\}$. Le condizioni al contorno quindi sono già specificate dalla scelta dello spazio di funzioni.

Si noti innanzitutto che gli equilibri del sistema 3.2.1 soddisfano l'equazione di Poisson non-lineare

$$\Delta w = f(w) \quad (3.2.2)$$

Questa equazione ammette formulazione variazionale: infatti i punti critici del funzionale

$$J : \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{R} \\ w \longmapsto J[w] = \int_{\Omega} \left[\frac{\|\nabla w\|^2}{2} - \int_{w_0}^w f(\lambda) d\lambda \right] d\tau \quad (3.2.3)$$

riproducono le soluzioni dell'equazione di Poisson.

Per semplicità si assuma che $\exists V : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tale che $f(\lambda) = -\frac{dV}{d\lambda}(\lambda)$. In questo modo il funzionale azione è

$$J[w] = \int_{\Omega} \left[\frac{\|\nabla w\|^2}{2} + V(w) \right] d\tau \quad (3.2.4)$$

e la sua derivata di Gateaux lungo $h \in \mathcal{H}$ è data proprio da $\partial J[w]h = -\int_{\Omega} [\Delta w - V'(w)]h d\tau$, che in luce del teorema di rappresentazione di Riesz può essere visto come $\partial J[w]h = \langle \nabla J[w], h \rangle$, con $\nabla J[w] = V(w) - \Delta w$. Sotto tale identificazione il sistema 3.2.1 può essere visto come un sistema dinamico infinito-dimensionale di tipo gradiente.

$$\left\langle \frac{\partial w}{\partial t}, h \right\rangle = \langle -\nabla J[w], h \rangle \quad \forall h \quad (3.2.5)$$

Tale formulazione, detta *formulazione L^2 -gradiente*, può essere vista anche come *formulazione debole* del sistema originale.

Per definire l'indice di Morse di una soluzione \bar{w} dell'equazione 3.2.2 (equivalentemente, un equilibrio di 3.2.1) bisogna considerare la linearizzazione dell'equazione attorno \bar{w} ([11]):

$$Aw := \Delta w - \frac{\partial f}{\partial w}(\bar{w}) = 0 \quad (3.2.6)$$

L'operatore lineare A è autoaggiunto su \mathcal{H} . Il suo problema agli autovalori è

$$Aw_j = -\lambda_j w_j \quad (3.2.7)$$

L'indice di Morse di \bar{w} è definito come la dimensione del sottospazio massimale di \mathcal{H} su cui A è definito negativo.

Si noti che non c'è una formulazione variazionale per l'equazione di reazione-diffusione; parallelamente a questo, non si può ridurre l'equazione tramite la riduzione ACZ. Esistono riduzioni

esatte dell'equazione di reazione-diffusione, ma sono tali solo per intervalli di tempo brevi. Se si vuole conoscere il carattere delle soluzioni per tempi lunghi è necessario perdere l'esattezza della riduzione. Si svilupperà quindi una riduzione non esatta che mantenga la maggior parte delle proprietà del sistema originale.

3.2.1 Riduzione finito-dimensionale

Si può utilizzare l'analogo per PDE della riduzione ACZ sull'equazione 3.2.2. Essendo in questo caso \mathcal{H} uno spazio vettoriale, non ci sarà bisogno di riparametrizzare il funzionale azione.

Si consideri il problema agli autovalori dell'operatore di Laplace-Beltrami. Si cercano i vettori $\varphi_i \in \mathcal{H}$ tali che

$$\Delta\varphi_i = -\lambda_i\varphi_i, \quad i \in \mathbb{N}, \quad \lambda_i \in \mathbb{R} \quad (3.2.8)$$

L'operatore di Laplace-Beltrami è un operatore ellittico, quindi valgono varie proprietà per gli autovalori, in particolare che $0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$ e che le φ_i danno una base ortonormale di \mathcal{H} .

Si definiscano i proiettori \mathbb{P}_N e \mathbb{Q}_N a partire dalla base φ_i , ovvero

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_N : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{U}_N \\ w &\longmapsto u = \mathbb{P}_N w = \sum_i^N w^i \varphi_i \\ \mathbb{Q}_N : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{V}_N \\ w &\longmapsto v = (\mathbb{1} - \mathbb{P}_N)u \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Affinché il problema sia riducibile, l'operatore

$$\begin{aligned} F : \mathcal{U}_N \times \mathcal{V}_N &\longrightarrow \mathcal{V}_N \\ (u, v) &\longmapsto F(u, v) = \mathbb{Q}_N \nabla J[u + v] \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

deve essere fortemente monotono nella seconda entrata. La prima condizione da imporre è che il potenziale diverga all'infinito al massimo linearmente: deve esistere C tale che

$$\sup_{\lambda \in \mathbb{R}} |V''(\lambda)| = C < \infty \quad (3.2.11)$$

Infine bisogna dare una condizione su N . Innanzitutto si osservi che, una volta espresse le w nella base di autovettori di Δ , gli operatori di proiezione e il Laplaciano commutano. In particolare $(\mathbb{Q}_N \circ \Delta)|_{\mathcal{V}_N} = \Delta$. Quindi

$$\begin{aligned} &\langle \mathbb{Q}_N \nabla J[\bar{u} + v_2] - \mathbb{Q}_N \nabla J[\bar{u} + v_1], v_2 - v_1 \rangle = \\ &= \langle \mathbb{Q}_N \{V(\bar{u} + v_2) - V(\bar{u} + v_1)\} - \Delta(v_2 - v_1), v_2 - v_1 \rangle = \\ &\geq \int_{\Omega} C |\delta v|^2 d\tau - \int_{\Omega} \delta v \Delta(\delta v) d\tau = \sum_{j>N} (\lambda_j - C) |(v_2 - v_1)^j|^2 \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

Allora basta prendere N tale che $\lambda_{N+1} > C$, che esiste perché gli autovalori λ_j crescono con j , per avere che $\mu = 1 - \frac{C}{\lambda_{N+1}} = \min \left\{ \frac{\lambda_j - C}{\lambda_j} \mid j > N \right\} > 0$ soddisfa

$$\langle \mathbb{Q}_N \nabla J[\bar{u} + v_2] - \mathbb{Q}_N \nabla J[\bar{u} + v_1], v_2 - v_1 \rangle \geq \mu \sum_{j>N} \lambda_j |(v_2 - v_1)^j|^2 = \mu \|v_2 - v_1\|_{\mathcal{V}_N}^2 \quad (3.2.13)$$

che è esattamente la condizione di monotonia forte. Questo si può riassumere nella

Proposizione 3.2.1. *Per N tale che $\lambda_{N+1} > C$, l'operatore non-lineare*

$$\begin{aligned} F : \mathcal{U}_N \times \mathcal{V}_N &\longrightarrow \mathcal{V}_N \\ (u, v) &\longmapsto \mathbb{Q}_N \nabla J[u + v] \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

è fortemente monotono nella seconda entrata, per ogni $u \in \mathcal{U}_N$ fissato.

La riduzione dell'equazione di Poisson dunque consiste nel trovare i punti stazionari della funzione

$$\begin{aligned} W : \mathcal{U}_N \cong \mathbb{R}^{n_N} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ u &\longmapsto W(u) = \mathbb{P}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

una volta ricavata \tilde{v} dall'equazione $\mathbb{Q}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0$.

Una strategia di riduzione per l'equazione di reazione-diffusione è la seguente. Per $w \in \mathcal{H}$ si pone $w = u \oplus v \in \mathcal{U}_N \oplus \mathcal{V}_N$ e si scompone l'equazione di reazione-diffusione sulle due componenti:

$$\begin{cases} \mathbb{P}_N \frac{\partial w}{\partial t} = \mathbb{P}_N [\Delta w - V'(w)] \\ \mathbb{Q}_N \frac{\partial w}{\partial t} = \mathbb{Q}_N [\Delta w - V'(w)] \end{cases} \implies \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u - \mathbb{P}_N V'(u + v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \Delta v - \mathbb{Q}_N V'(u + v) \end{cases} \quad (3.2.16)$$

Se, invece che v , come “coda” si prende $\tilde{v}(u)$, si ottiene che il lato destro della prima equazione legge proprio $-\nabla W(u)$ mentre quello della seconda è identicamente nullo, per definizione. Prendere come coda la \tilde{v} ricavata dalla riduzione dell'equilibrio è giustificato dal fatto che l'evoluzione temporale si può trascurare per i modi “ad alta frequenza”; equivalentemente, la dipendenza temporale è codificata soprattutto nei modi a bassa frequenza del sistema. Questo è riflesso nel fatto che il sistema di ODE finito-dimensionale si otterrà trattenendo le prime N componenti della base di autovettori.

Il sistema diventa quindi

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = -\nabla W(u) \\ \Delta \tilde{v}(u) = \mathbb{Q}_N V'(u + \tilde{v}(u)) \end{cases} \quad (3.2.17)$$

Si noti che:

- Gli equilibri di $(3.2.17)_1$ sono in corrispondenza uno-ad-uno con gli equilibri di 3.2.1.
- La $(3.2.17)_2$ mantiene la struttura di sistema dinamico di tipo gradiente visto in 3.2.5.
- A sua volta $(3.2.17)_2$ è una equazione di Poisson non-lineare nell'incognita \tilde{v} , che può essere presa come l'equazione determinante \tilde{v} . Come osservato sopra, questa equazione non dipende dal tempo: le componenti ad alta frequenza sono state approssimate con le relative componenti stazionarie.
- L'indice di Morse delle soluzioni di $(3.2.17)_1$ è lo stesso delle soluzioni di 3.2.1. Questo è garantito dal fatto che si è usata la riduzione ACZ: ciò è dimostrato nella sezione C.2. Tale risultato è il punto saliente della riduzione. Infatti, nel sistema non ridotto, l'indice di Morse di un equilibrio indica il numero di direzioni *instabili* che si incontrano nell'equilibrio. In pratica, se un equilibrio ha indice di Morse nullo, è difficile che il sistema, partendo da una condizione iniziale vicino all'equilibrio, si allontani molto da questo; reciprocamente, se l'equilibrio ha indice di Morse non nullo, il sistema ha a disposizione delle *vie di fuga* che possono essere percorse per allontanarsi dall'equilibrio. Il numero di queste vie di fuga è esattamente l'indice di Morse.

Allo stesso modo, gli equilibri del sistema ridotto presentano direzioni instabili, contate dal relativo indice di Morse. Perciò, attorno agli equilibri, la dinamica del sistema ridotto è identica a quella del sistema infinito-dimensionale. Tale osservazione ha uno spirito termodinamico: si sono trovate delle variabili collettive che riproducono l'evoluzione di un sistema infinito-dimensionale.

3.2.2 Teorema di Morse per PDE ellittiche

In [11] si sviluppa un punto di vista symplettico delle PDE ellittiche. Tale punto di vista permette di formulare un analogo del teorema di Morse finito-dimensionale sviluppato nelle sezioni precedenti. Risulta che tale teorema ha la stessa interpretazione geometrica.

Per capire ciò, si costruisce uno spazio di Hilbert symplettico (\mathcal{H}, ω) , analogo infinito-dimensionale dello spazio delle fasi. Si considera poi la *Grassmanniana di sottovarietà Lagrangiane di Fredholm* (FLG), cioè l'insieme di sottovarietà Lagrangiane (ovvero isotrope per ω). La FLG contiene tutti gli spazi tangenti alle soluzioni della PDE in studio. Ad ogni soluzione si può associare una curva nella FLG, che descrive i suoi spazi tangenti al variare del parametro evolutivo. Le proprietà topologiche di questa curva si possono mettere in corrispondenza con le proprietà topologiche della soluzione, in particolare se ne può evincere la trasversalità alle fibre: in effetti, tramite la linearizzazione, si può definire l'analogo delle curve Jacobi. L'equazione definente le curve Jacobi induce un flusso nella FLG: è proprio il flusso dato dagli spazi tangenti alle soluzioni. Tramite questo si può definire l'analogo di un punto coniugato: se Λ_0 è la sottovarietà Lagrangiana corrispondente al punto iniziale della soluzione, definito il *ciclo di Maslov* di Λ_0 come $\mathcal{M}_{\Lambda_0} = \{\Lambda \in \text{FLG} \mid \Lambda \cap \Lambda_0 \neq \{0\}\}$, un punto coniugato al punto iniziale è un punto sulla soluzione il quale spazio tangente appartiene a \mathcal{M}_{Λ_0} . Quindi il fallimento della trasversalità si ha in corrispondenza di punti coniugati. Si può dare perciò, anche nel caso infinito-dimensionale, una interpretazione in termini di *oscillazioni* alla perdita di trasversalità. Infine si dimostra il teorema di Morse infinito-dimensionale: il numero di punti coniugati corrisponde all'indice di Morse della soluzione.

A Appendice: Elementi di geometria simplettica e teoria dell'integrale invariante di Poincaré-Cartan

Qui si riporta un breve riassunto di alcuni risultati classici necessari allo sviluppo della teoria di Morse e dei punti coniugati. Per trattazione completa si veda [2] ed [3].

A.1 Trasformata di Legendre e disuguaglianza di Young

Si consideri la varietà Q di dimensione n come spazio delle configurazioni del sistema. Si prenda una Lagrangiana $L : \mathbb{R} \times TQ \rightarrow \mathbb{R}$ il quale \dot{q} -Hessiano (nel senso specificato all'inizio della sezione 2.1.1) soddisfi la condizione di coercitività locale

$$\text{per qualche } k > 0, \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j}(t, q, \dot{q}) \lambda^i \lambda^j \geq k \|\lambda\|^2 \forall \lambda \in \mathbb{R}^n \forall (t, q, \dot{q}) \in \mathbb{R} \times TQ \quad (\text{A.1.1})$$

Allora i momenti coniugati $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}(t, q, \dot{q})$ definiscono un diffeomorfismo *globale*

$$\begin{aligned} \mathbb{R} \times TQ &\longrightarrow \mathbb{R} \times T^*Q \\ (t, q, \dot{q}) &\longmapsto (t, q, p(t, q, \dot{q})) \end{aligned} \quad (\text{A.1.2})$$

che si chiama Trasformata di Legendre. La trasformata di Legendre coniuga le equazioni di Eulero-Lagrange di L alle equazioni di Hamilton per l'Hamiltoniana

$$\begin{aligned} H : \mathbb{R} \times T^*Q &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (t, q, p) &\longmapsto H(t, q, p) := \sup_{\dot{q} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \dot{q}^j p_j - L(t, q, \dot{q}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.3})$$

dalla quale definizione discende immediatamente la

Proposizione A.1.1 (Disuguaglianza di Young).

$$\dot{q}^j p_j \leq L(t, q, \dot{q}) + H(t, q, p) \quad (\text{A.1.4})$$

per ogni t, q, \dot{q}, p . L'uguaglianza vale se e solo se gli p sono proprio i momenti coniugati alle q .

A.2 Geometria simplettica e integrale invariante di Poincaré-Cartan

Tramite la formulazione Hamiltoniana si può fornire un carattere più geometrico al problema. Il modello classico di spaziotempo è dato dalla varietà $\mathcal{Q} = \mathbb{R} \times Q$. Qui si illustra la struttura simplettica della varietà $T^*\mathcal{Q}$.

Si prendano come coordinate naturali su $T^*\mathcal{Q}$ le $(t, q^i; p_0, p_j) =: (q^\alpha, p_\beta)$. La struttura simplettica di $T^*\mathcal{Q}$ è generata dalla 1-forma di Liouville $\vartheta = p_\alpha dq^\alpha = p_0 dt + p_j dq^j$ che definisce la 2-forma chiusa e non-degenere $\omega = d\vartheta = dp_0 \wedge dt + dp_j \wedge dq^j$. La coppia $(T^*\mathcal{Q}, \omega)$ è dunque una varietà simplettica.

La forma simplettica classifica le sottovarietà di $T^*\mathcal{Q}$: saranno di interesse le sottovarietà Lagrangiane:

Definizione A.2.1 (Sottovarietà Lagrangiana). Una sottovarietà immersa $\Lambda_{n+1} \xhookrightarrow{\iota} T^*\mathcal{Q}$ si dice Lagrangiana quando $\dim \Lambda_{n+1} = \dim \mathcal{Q}$ e inoltre la 1-forma di Liouville ristretta ad essa è esatta:

$$d\vartheta|_{\Lambda_{n+1}} = 0 = \iota^* \omega \quad (\text{A.2.1})$$

Per esempio, il grafico in $T^*\mathcal{Q}$ del differenziale di una funzione regolare $S : \mathcal{Q} \rightarrow \mathbb{R}$ è una sottovarietà Lagrangiana: infatti

$$\begin{aligned} \Lambda_{n+1} &= \left\{ (q, p) \in T^*\mathcal{Q} \mid p = \frac{\partial S}{\partial q}, q \in \mathcal{Q} \right\} \implies \\ \dim \Lambda_{n+1} &= n + 1 = \dim \mathcal{Q}. \\ \omega|_{\Lambda_{n+1}} &= \left(dp_\alpha \wedge dq^\alpha \Big|_{\Lambda_{n+1}} = \frac{\partial^2 S}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} dp_\alpha \wedge dq^\beta \equiv 0 \right. \end{aligned} \quad (\text{A.2.2})$$

Il problema Hamiltoniano in questo contesto si traduce tramite sezioni del fibrato tangente $TT^*\mathcal{Q}$:

Definizione A.2.2 (Campo vettoriale Hamiltoniano). Una sezione $X : T^*\mathcal{Q} \rightarrow TT^*\mathcal{Q}$ si dice campo vettoriale Hamiltoniano se esiste una funzione $\mathbf{H} : T^*\mathcal{Q} \rightarrow \mathbb{R}$ tale che

$$\forall V \in TT^*\mathcal{Q}, \omega(X, V) = -d\mathbf{H}V \quad (\text{A.2.3})$$

Ciò significa semplicemente che il flusso di un campo vettoriale Hamiltoniano è dato dalle equazioni di Hamilton della relativa funzione Hamiltoniana. È importante notare che in questo schema è possibile dimostrare che un campo vettoriale Hamiltoniano è tangente ad ogni superficie Lagrangiana contenuta nell'insieme $\mathbf{H}^{-1}(0)$, dunque le curve integrali del campo Hamiltoniano “tessono” delle sottovarietà Lagrangiane se contenute in $\mathbf{H}^{-1}(0)$.

Non si considereranno sistemi in cui il tempo evolve non-linearmente sotto l'evoluzione del campo Hamiltoniano, dunque solo funzioni Hamiltoniane del tipo

$$\mathbf{H}(q^\alpha, p_\beta) = p_0 + H(t, q^i; p_j). \quad (\text{A.2.4})$$

dove H è l'Hamiltoniana del sistema non autonomo. In questo caso nell'insieme $\mathbf{H}^{-1}(0)$ vale $p_0 = -H(t, q^i; p_j)$. Si può quindi dare il principale

TEOREMA A.2.1 (Integrale invariante di Poincaré-Cartan). Sia Λ_{n+1} una sottovarietà Lagrangiana di $T^*\mathcal{Q}$ contenuta nel luogo $\mathbf{H}^{-1}(0) \subset T^*\mathcal{Q}$. Siano P_0, P_1 due punti su Λ_{n+1} di fibre su \mathcal{Q} rispettivamente $(t_0, q_0), (t_1, q_1)$. Siano γ_1, γ_2 due curve arbitrarie su Λ_{n+1} tra i due punti P_0, P_1 tali che $\gamma_1 \cup -\gamma_2$ sia il bordo di una superficie $\Sigma \subset \Lambda_{n+1}$. Allora

$$\int_{\gamma_1} pdq - Hdt = \int_{\gamma_2} pdq - Hdt \quad (\text{A.2.5})$$

Dimostrazione. Essendo in Λ_{n+1} , che è Lagrangiana, la 1-forma di Liouville è esatta, dunque per il teorema di Stokes

$$0 = \int_{\Sigma} d\vartheta = \int_{\partial\Sigma} \vartheta = \int_{\gamma_1} \vartheta - \int_{\gamma_2} \vartheta \quad (\text{A.2.6})$$

Ma visto che $\Lambda_{n+1} \subset \mathcal{H}^{-1}(0)$, $p_0 = -H(t, q^i, p_j)$ dunque per qualsiasi $\gamma \subset \Lambda_{n+1}$

$$\int_{\gamma} \vartheta = \int_{\gamma} p_i dq^i + p_0 dt = \int_{\gamma} p_i dq^i - H dt \quad (\text{A.2.7})$$

e si conclude. □

B Appendice: Elementi di Calcolo Variazionale in H^1

In questa sezione si fa riferimento a [2].

Nello sviluppo della teoria di Morse, si trattano sistemi meccanici classici, dove gli atti di moto $(q, \dot{q}) \in T\mathcal{Q}$ e \mathcal{Q} è una varietà differenziabile di dimensione n (eventualmente $n + 1$ nel caso di Lagrangiana dipendente dal tempo). La Lagrangiana dunque è della forma

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) = T - V \quad (\text{B.0.1})$$

Si vuole mostrare che lo spazio funzionale più naturale è il sottospazio affine dello spazio di Sobolev $H^1([0, T]; \mathcal{Q})$ dato dalle curve tra due punti fissati di \mathcal{Q} : siano $q_0, q_1 \in \mathcal{Q}$

$$\begin{aligned} X([0, T]; \mathcal{Q}) &= \{f \in L^2([0, T]; \mathcal{Q}) \mid f' \in L^2\} \\ f \sim g &\Leftrightarrow f \equiv g \text{ q.o.} \implies \\ H^1([0, T]; \mathcal{Q}) &:= X \setminus \sim \\ \mathcal{H} &= \{q \in H^1([0, T]; \mathcal{Q}) \mid q(0) = q_0, q(T) = q_1\} \end{aligned} \quad (\text{B.0.2})$$

Notare che questo, oltre ad essere affine, è anche uno spazio normato sotto la norma indotta da L^2 . H^1 si immerge naturalmente in C^0 , quindi le curve in \mathcal{H} sono almeno continue. Il suo spazio tangente lo denotiamo con $H_0^1([0, T]; \mathcal{Q}) = \mathcal{H}_0$ ed è lo spazio delle curve in H^1 che si annullano in 0 e T . Si sviluppa quindi un principio variazionale che recuperi quello già noto per le curve C^∞ . Per fare questo serve innanzitutto la

Proposizione B.0.1 (duBois-Reymond). *Sia $\varphi \in L^2([0, T]; \mathcal{Q})$ e valga*

$$\int_{[0, T]} \varphi(t) \dot{h}(t) dt = 0 \quad \forall h \in \mathcal{H}_0 \quad (\text{B.0.3})$$

Allora $\varphi \equiv_{\text{q.o.}} \text{cost}$.

Dimostrazione. Essendo $L^2 \subset L^1$, allora di certo è finito

$$\mu = \frac{1}{T} \int_{[0, T]} \varphi(t) dt \quad (\text{B.0.4})$$

Si può quindi prendere

$$h(t) := \int_{[0, T]} (\varphi(s) - \mu) ds \quad (\text{B.0.5})$$

Tale h appartiene ad \mathcal{H}_0 , infatti $h(0) = 0 = h(T)$, $\dot{h} = \varphi - \mu \in L^2$ essendo $\varphi \in L^2$ e

$$\begin{aligned} \|h\|_{L^2}^2 &= \int_{[0, T]} \left(\int_{[0, t]} (\varphi - \mu) ds \right) \cdot \left(\int_{[0, t]} (\varphi - \mu) ds \right) dt \leq \\ &\leq T \sup_{t \in [0, T]} \left| \int_{[0, T]} (\varphi - \mu) ds \right|^2 \stackrel{\varphi \in L^1}{<} +\infty \Rightarrow h \in L^2 \end{aligned} \quad (\text{B.0.6})$$

Quindi per questa particolare h vale l'ipotesi, ovvero

$$\int_{[0, T]} \varphi(t) \dot{h}(t) dt = 0 \quad (\text{B.0.7})$$

Da una parte,

$$\int_{[0,T]} \dot{h}(\varphi - \mu) dt = \int_{[0,T]} \dot{h}\varphi dt - \mu h \Big|_0^T \equiv 0 \quad (\text{B.0.8})$$

mentre dall'altra parte

$$\int_{[0,T]} \dot{h}(\varphi - \mu) dt = \int_{[0,T]} [\varphi - \mu]^2 dt \quad (\text{B.0.9})$$

quindi $\int_{[0,T]} [\varphi - \mu]^2 dt = 0$. Infine essendo $\varphi \in L^2$, $\varphi(t) =_{\text{q.o.}} \mu$. \square

TEOREMA B.0.1 (Principio variazionale in H^1). *Sia $q \in \mathcal{H}$ curva stazionaria per $J : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$, ovvero*

$$\forall h \in \mathcal{H}_0 \quad \partial J[q]h = 0 \quad (\text{B.0.10})$$

Definendo

$$P(t) := \int_{[0,T]} \frac{\partial L}{\partial q}(q(t), \dot{q}(t)) dt \in L^2 \quad (\text{B.0.11})$$

e supponendo che $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q(s), \dot{q}(t))$, allora per quasi ogni $t \in [0, T]$ esiste $c \in \mathbb{R}$ tale che

$$P - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = c \quad (\text{B.0.12})$$

Dimostrazione. Per definizione di derivata di Gateaux di un funzionale reale:

$$\partial J[q]h := \frac{d}{d\mu} J[q + \mu h] \Big|_{\mu=0} = \int_{[0,T]} \left[\frac{\partial L}{\partial q} h + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \dot{h} \right] dt = 0 \forall h \in \mathcal{H}_0 \quad (\text{B.0.13})$$

Integrando per parti:

$$0 = P(t)h(t) \Big|_0^T - \int_{[0,T]} \left(P - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \dot{h} dt = \int_{[0,T]} \left(P - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \dot{h} dt \quad \forall h \in \mathcal{H}_0 \quad (\text{B.0.14})$$

e si ha la tesi per il lemma di duBois-Reymond. \square

Questo è effettivamente un principio variazionale perché $P - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = c$ è la forma integrale delle equazioni di Eulero-Lagrange.

C Appendice: la riduzione finito-dimensionale esatta

Segue una rielaborazione del risultato esposto in [4].

La struttura dello spazio delle variazioni nel caso meccanico, ovvero la decomposizione $\overline{H}_0^1 = T_q\{\tau\} \oplus Q_q$ suggerisce che se si è interessati alla minimalità della traiettoria fisica per l'azione, non serve conoscere il sistema nella sua completezza, ma basta conoscerne una parte *finito-dimensionale*. Sulla scia di questa intuizione si attua una vera e propria riduzione finito-dimensionale esatta del problema variazionale.

Si sviluppa dunque uno schema di riduzione di una classe di problemi infinito-dimensionali, detta riduzione finito-dimensionale esatta di Amann-Conley-Zehnder (ACZ), che verrà applicata per ridurre sia la determinazione delle traiettorie fisiche di un sistema meccanico, che l'equazione di reazione-diffusione non-lineare. Si mostra anche che questo schema di riduzione rispetta l'indice di Morse dei punti critici.

C.1 Riduzione ACZ

C.1.1 Parametrizzazione del problema variazionale

Per ricavare uno schema di riduzione efficace per trattare una classe di sistemi dinamici più ampia possibile, si sviluppa la teoria per un qualsiasi problema variazionale su uno spazio affine normato. Sia $(\mathcal{H}, \|\cdot\|)$ uno spazio affine normato, con spazio vettoriale sottostante \mathcal{H}_0 . Prendiamo \mathcal{H}_0 di Hilbert, con prodotto scalare $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Sia $\tilde{J} : X \rightarrow \mathbb{R}$ un funzionale almeno \mathcal{C}^1 (secondo Fréchet). Si consideri il problema variazionale di determinare un $q \in \mathcal{H}$ tale che

$$\partial\tilde{J}[q]h = 0 \quad \forall h \in \mathbb{T}_q\mathcal{H} \cong \mathcal{H}_0 \quad (\text{C.1.1})$$

Essendo \mathcal{H} uno spazio affine, è possibile parametrizzare i punti $q \in \mathcal{H}$ con i vettori $h \in \mathcal{H}_0$ una volta fissato un $Q \in \mathcal{H}$ (nel caso meccanico, Q è per esempio un segmento che congiunge i punti iniziale e finale). Infatti ogni q si può scrivere in modo unico come $q = Q + h$. Si definisce quindi una parametrizzazione $\iota : \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}$ definita da $\iota(h) = Q + h$. Resta definito quindi un funzionale

$$\begin{aligned} J : \mathcal{H}_0 &\longrightarrow \mathbb{R} \\ h &\longmapsto J[h] = \tilde{J}[\iota(h)] \end{aligned} \quad (\text{C.1.2})$$

Per il teorema di rappresentazione di Riesz, avendo preso un funzionale la quale derivata di Fréchet è continua, dunque limitata, a $\partial J[k] \in \mathcal{H}_0^*$ si può associare un unico $\nabla J[k] \in \mathcal{H}_0$ tale che

$$\partial J[k]h = \langle \nabla J[k], h \rangle \quad (\text{C.1.3})$$

Risolvere il problema variazionale è trovare i k tali che $\nabla J[k] = 0$.

C.1.2 Partizione di \mathcal{H}_0

Si fissi una base ortonormale di \mathcal{H}_0 , $\{\varphi_i\}_{i=0}^\infty$. Allora ogni $h \in \mathcal{H}_0$ si scrive $\sum_i \langle h, \varphi_i \rangle \varphi_i = \sum_i h^i \varphi_i$. Una volta preso $N \in \mathbb{N}$, su \mathcal{H}_0 si possono definire due proiettori

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_N : \mathcal{H}_0 &\longrightarrow \mathcal{U}_N = \mathbb{P}_N \mathcal{H}_0 \\ h &\longmapsto \mathbb{P}_N h = \sum_{i=0}^N h^i \varphi_i \\ \mathbb{Q}_N : \mathcal{H}_0 &\longrightarrow \mathcal{V}_N = \mathbb{Q}_N \mathcal{H}_0 \\ h &\longmapsto \mathbb{Q}_N h = (\mathbb{1} - \mathbb{P}_N)h \end{aligned} \quad (\text{C.1.4})$$

i quali codomini partizionano $\mathcal{H}_0 = \mathcal{U}_N \oplus \mathcal{V}_N$ e sono ortogonali. Si noti che \mathcal{U}_N è finito-dimensionale, mentre \mathcal{V}_N non lo è.

Sotto questa partizione, definiti

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_N^* &= \left\{ \psi \in \mathcal{H}_0^* \mid \psi|_{\mathcal{V}_N} \equiv 0 \right\} \\ \mathcal{V}_N^* &= \left\{ \chi \in \mathcal{H}_0^* \mid \chi|_{\mathcal{U}_N} \equiv 0 \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.1.5})$$

si ha che $\mathcal{H}_0^* \ni \partial J = \partial_{\mathcal{U}_N} J + \partial_{\mathcal{V}_N} J \in \mathcal{U}_N^* \oplus \mathcal{V}_N^*$. Per il teorema di Riesz si identificano $\partial_{\mathcal{U}_N} J$ e $\partial_{\mathcal{V}_N} J$ con $\mathbb{P}_N \nabla J$ e $\mathbb{Q}_N \nabla J$ rispettivamente.

C.1.3 Teorema fondamentale

Per riduzione finito-dimensionale del problema variazionale si intende trovare una funzione W definita su \mathbb{R}^m per qualche m i quali punti stazionari riproducano i punti stazionari di J , in un senso preciso. Affinché questo sia possibile bisogna fare ipotesi più stringenti su J . Serve la

Definizione C.1.1 (Monotonia forte). Sia \mathcal{H}_0 spazio di Hilbert e $\varphi : \mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H}_0$ una funzione. Si dice che φ è *fortemente monotona* se $\exists \mu > 0$ tale che $\forall h_1, h_2 \in \mathcal{H}_0$ si ha

$$\langle \varphi(h_2) - \varphi(h_1), h_2 - h_1 \rangle \geq \mu \|h_2 - h_1\|_{\mathcal{H}_0}^2 \quad (\text{C.1.6})$$

Sotto l'ipotesi di monotonia forte si può dimostrare la

Proposizione C.1.1 (Funzione implicita). Sia \mathcal{V} spazio di Hilbert, $\mathcal{D} \in \mathcal{U}$ aperto di uno spazio di Banach \mathcal{U} e $F : \mathcal{D} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ una funzione tale che la u -sezione $F(u, \cdot) : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ sia fortemente monotona. Allora l'insieme degli zeri di F

$$\mathcal{Z}(F) = \left\{ (u, v) \in \mathcal{D} \times \mathcal{V} \mid F(u, v) = 0 \right\} \quad (\text{C.1.7})$$

è il grafico di una funzione \mathcal{C}^1 , $\varphi : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{V}$

Dimostrazione. Si vuole mostrare che $F(u, \cdot)$ soddisfa alle ipotesi del teorema della funzione inversa.

Indichiamo la u -sezione con $f : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$. Sia μ la costante di monotonia forte. Allora di certo

$$\forall v, w \in \mathcal{V}, \|f(v) - f(w)\| \geq \mu \|v - w\| \quad (\text{C.1.8})$$

Necessariamente quindi f è iniettiva e ammette dunque un'inversa $g : f(\mathcal{V}) \rightarrow \mathcal{V}$ che è Lipschitziana. Inoltre f mappa chiusi in chiusi: infatti se $v_k = f(u_k) \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} v \in \mathcal{V}$, allora necessariamente $u_k = g(v_k)$ è di Cauchy in \mathcal{V} ; se $u_k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} u$ allora per continuità di f si ha $v = f(u)$. In particolare $f(\mathcal{V})$ è chiuso in \mathcal{V} . Per soddisfare le ipotesi del teorema della funzione inversa, il differenziale di f deve essere un isomorfismo di spazi di Hilbert. Per mostrare questo si sfrutta la forte monotonia di f . Infatti da essa discende che anche $df[v]$, il Fréchet-differenziale di f , è fortemente monotono:

$$\begin{aligned} & \forall t \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \forall w \in \mathcal{V} \\ & \langle f(v + tw) - f(v), tw \rangle \geq \mu \|tw\|^2 \Rightarrow \left\langle \frac{f(v + tw) - f(v)}{t}, w \right\rangle \geq \mu \|w\|^2 \quad (\text{C.1.9}) \\ & \text{quindi passando al limite per } t \rightarrow 0, \langle df[v]w, w \rangle \geq \mu \|w\|^2 \end{aligned}$$

Come per f questo vuol dire che $df[v]$ è iniettivo e $df[v]\mathcal{V}$ è chiuso in \mathcal{V} . Se $w \in (df[v]\mathcal{V})^\perp$,

$$0 \equiv \langle df[v]w, w \rangle \geq \mu \|w\|^2 \iff w = 0 \Rightarrow (df[v]\mathcal{V})^\perp = 0 \quad (\text{C.1.10})$$

e perciò $df[v]$ è suriettivo. Essendo anche iniettivo è un automorfismo di \mathcal{V} , $\forall v \in \mathcal{V}$. Si può quindi applicare il teorema della funzione inversa a f in ogni punto di \mathcal{V} . Questo significa che $f(\mathcal{V})$ è aperto in \mathcal{V} , ed essendo anche chiuso deve essere che $f(\mathcal{V}) = \mathcal{V}$. f è quindi un diffeomorfismo di \mathcal{V} in sé stesso. La conclusione si ottiene ponendo $\varphi(u)$ come l'unico zero di $v \mapsto F(u, v)$, per ogni $u \in \mathcal{D}$. Questo è lecito per il teorema della funzione inversa. La sua regolarità discende dal teorema della funzione implicita. \square

Questa proposizione dà direttamente il risultato principale della riduzione finito-dimensionale ACZ:

TEOREMA C.1.1. *Sia $\bar{u} \in \mathcal{U}_N$ fissato. Allora resta definito un operatore non-lineare*

$$\begin{aligned} F(\bar{u}, \cdot) : \mathcal{V}_N &\longrightarrow \mathcal{V}_N \\ v &\longmapsto F(\bar{u}, v) = \mathbb{Q}_N \nabla J[\bar{u} + v] \end{aligned} \quad (\text{C.1.11})$$

Se $F(\bar{u}, \cdot)$ è fortemente monotono, allora esiste una mappa $\tilde{v} : \mathcal{U}_N \rightarrow \mathcal{U}_N$ di classe \mathcal{C}^1 tale che

$$\forall u \in \mathcal{U}_N, \quad \mathbb{Q}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0 \quad (\text{C.1.12})$$

o equivalentemente

$$\langle \nabla J[u + v], \bar{v} \rangle = 0 \quad \forall \bar{v} \in \mathcal{V}_N \iff v = \tilde{v}(u) \quad (\text{C.1.13})$$

Dimostrazione. Si è nelle ipotesi della proposizione C.1.1, dove $\mathcal{V} = \mathcal{V}_N$ e $\mathcal{U} = \mathcal{U}_N$. Osservando che la tesi è proprio che $\mathcal{Z}(F)$ è il grafico di \tilde{v} , la funzione φ che si ottiene dalla proposizione è la \tilde{v} cercata. \square

La scelta del cutoff N non è arbitraria. Infatti da esso dipende la monotonia forte di $F(\bar{u}, \cdot)$. Inoltre per esplicitare \tilde{v} dall'equazione $\mathbb{Q}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0$, che è necessario per ridurre con successo il problema, bisogna usare il metodo di Newton, ovvero bisogna risolvere l'equazione ricorsiva

$$\tilde{v}_{n+1}(u) = \tilde{v}_n(u) - \left[\partial_{\mathcal{V}_N} F(u, \tilde{v}_n(u)) \right]^{-1} F(u, \tilde{v}_n(u)) \quad (\text{C.1.14})$$

Affinché questa equazione converga all'unico punto fisso $\tilde{v}(u)$ per $n \rightarrow \infty$, è necessario che $\partial_{\mathcal{V}_N} F(u, \cdot)$ sia invertibile con inversa limitata. Questa condizione è soddisfatta quando F è fortemente monotono, ma la rapidità di convergenza dipende dalla scelta di N : più è grande N , più velocemente converge l'algoritmo.

Si può determinare il giusto N che garantisca queste proprietà una volta noto con precisione il problema da ridurre.

C.1.4 Riduzione finito-dimensionale

Una volta nota \tilde{v} il problema di trovare i punti stazionari di J è ridotto: risulta che trovare le $k = u + v \in \mathcal{U}_N \oplus \mathcal{V}_N$ tali che $\nabla J[k] = 0$ è equivalente a risolvere l'equazione $\mathbb{P}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0$, cioè $\langle \nabla J[u + \tilde{v}], \bar{u} \rangle = 0 \quad \forall \bar{u} \in \mathcal{U}_N$. Per vedere questo basta osservare che $\nabla J = \mathbb{P}_N \nabla J + \mathbb{Q}_N \nabla J$, e che \tilde{v} annulla $\mathbb{Q}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)]$ per definizione.

Risolvere $\mathbb{P}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0$ consiste nel trovare i punti stazionari di un "funzionale ridotto" $W : \mathcal{U}_N \cong \mathbb{R}^{n_N} \rightarrow \mathbb{R}$ definito da $W(u) = J[u + \tilde{v}(u)]$. Infatti

$$\frac{\partial W}{\partial u}(u) = \partial_{\mathcal{U}_N} J[u + \tilde{v}(u)] + \partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \frac{\partial \tilde{v}}{\partial u}(u) \quad (\text{C.1.15})$$

ma $\partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}(u)] = \mathbb{Q}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] \equiv 0$ quindi

$$\nabla J[k = u + \tilde{v}(u)] = 0 \iff \mathbb{P}_N \nabla J[u + \tilde{v}(u)] = 0 = \partial_{\mathcal{U}_N} J[u + \tilde{v}(u)] = \frac{\partial W}{\partial u}(u) \quad (\text{C.1.16})$$

Dunque il problema ridotto mantiene la forma di problema variazionale.

Anche in questo caso la scelta del cutoff N è importante: più è grande N , maggiore sarà la dimensione dello spazio \mathcal{U}_N , e quindi il sistema da risolvere avrà un numero di equazioni elevato. Bisogna dunque fare una scelta "bilanciata" di N , conciliando la rapidità di convergenza della C.1.14 con l'agilità nel risolvere il sistema C.1.16.

C.2 Riduzione ed indice di Morse

Una volta ridotto il problema variazionale, è lecito chiedersi in che relazione siano l'indice di Morse dei punti stazionari di W e l'indice di Morse dei punti stazionari di J . Serve prima di tutto calcolare l'Hessiano di W in termini delle derivate di J . Indicati con $\partial_{\mathcal{U}_N}^2 J = \mathbb{P}_N d^2 J \mathbb{P}_N$, $\partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J = \mathbb{Q}_N d^2 J \mathbb{P}_N \dots$ e così via:

$$\begin{aligned} dW(u) &= \partial_{\mathcal{U}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \\ d^2W(u) &= \partial_{\mathcal{U}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)] + \partial_{\mathcal{V}_N} \partial_{\mathcal{U}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \frac{\partial \tilde{v}}{\partial u} \end{aligned} \quad (\text{C.2.1})$$

ora, $\partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}] = 0 \implies 0 = \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}(u)] + \partial_{\mathcal{V}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)] \frac{\partial \tilde{v}}{\partial u}$ dunque siccome $\partial_{\mathcal{V}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)]$ è strettamente positivo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial u}(u) &= - \left[\partial_{\mathcal{V}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)] \right]^{-1} \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \implies \\ d^2W(u) &= \partial_{\mathcal{U}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)] - \partial_{\mathcal{V}_N} \partial_{\mathcal{U}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \left[\partial_{\mathcal{V}_N}^2 J[u + \tilde{v}(u)] \right]^{-1} \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J[u + \tilde{v}(u)] \end{aligned} \quad (\text{C.2.2})$$

Si può rappresentare d^2W in forma di matrice a blocchi su $\mathcal{U}_N \oplus \mathcal{V}_N$ così:

$$d^2W(u) = \left(\begin{array}{cc} \partial_{\mathcal{U}_N}^2 J - \partial_{\mathcal{V}_N} \partial_{\mathcal{U}_N} J \left[\partial_{\mathcal{V}_N}^2 J \right]^{-1} \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J & \mathbb{O} \\ \mathbb{O} & \partial_{\mathcal{V}_N}^2 J \end{array} \right) \Big|_{u+\tilde{v}(u)} \quad (\text{C.2.3})$$

Chiaramente $d^2J[k] = \partial_{\mathcal{U}_N}^2 J[k] + \partial_{\mathcal{V}_N} \partial_{\mathcal{U}_N} J[k] + \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J[k] + \partial_{\mathcal{V}_N}^2 J[k]$ e quindi si può rappresentarlo in forma di matrice a blocchi così:

$$d^2J = \left(\begin{array}{cc} \partial_{\mathcal{U}_N}^2 J & \partial_{\mathcal{V}_N} \partial_{\mathcal{U}_N} J \\ \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J & \partial_{\mathcal{V}_N}^2 J \end{array} \right) \quad (\text{C.2.4})$$

Per trovare la relazione tra gli indici di Morse di queste due forme basta trovare la relazione tra gli spazi nulli e negativi delle matrici che le rappresentano. Questo procedimento è la dimostrazione del

TEOREMA C.2.1. *L'indice di Morse del sistema completo è lo stesso di quello del sistema ridotto*

Dimostrazione. Scritta

$$d^2J = \left(\begin{array}{cc} A & B \\ C & D \end{array} \right) \quad (\text{C.2.5})$$

si diagonalizza a blocchi d^2J tramite una tecnica standard, detta del *complemento di Schur*, tramite la matrice a blocchi

$$T = \left(\begin{array}{cc} \mathbb{1}_{\mathcal{U}_N} & \mathbb{O} \\ -D^{-1}C & \mathbb{1}_{\mathcal{V}_N} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc} \mathbb{1}_{\mathcal{U}_N} & \mathbb{O} \\ -[\partial_{\mathcal{V}_N}^2 J]^{-1} \partial_{\mathcal{U}_N} \partial_{\mathcal{V}_N} J & \mathbb{1}_{\mathcal{V}_N} \end{array} \right) \quad (\text{C.2.6})$$

Si cambia base in modo che d^2J è diagonale a blocchi, precisamente $d^2J' = T^* d^2J T$. Un calcolo immediato mostra che $T^* d^2J T = d^2W$, quindi necessariamente gli spazi nulli e negativo delle due forme sono isomorfi sotto T . \square

Riferimenti bibliografici

- [1] J. Milnor, *Morse Theory*, Princeton University Press (1963)
 - [2] F. Cardin, *Aspetti variazionali della meccanica II*, Complementi alle Lezioni di Meccanica Razionale di T. Levi Civita e U. Amaldi, ed. CompoMat (2012), p. 331-372
 - [3] F. Cardin, *Elementary Symplectic Topology and Mechanics*, Springer, Lecture notes of the Unione Matematica Italiana 16 (2015), pp. 105-128, DOI 10.1007/978-3-319-11026-4_5
 - [4] F. Cardin, G. De Marco, A. Sfondrini, *Finite reduction and Morse index estimates for mechanical systems*, Nonlinear Differ. Equ. Appl. (2011), Springer Basel AG, DOI 10.1007/s00030-011-0107-4
 - [5] D. Passerone, M. Parrinello, *Action-derived molecular dynamics in the study of rare events*, Phys. Rev. Lett. Vol. 87, No. 10 (2001), DOI 10.1103/PhysRevLett.87.108302
 - [6] D. Passerone, M. Ceccarelli, M. Parrinello, *A concerted variational strategy for investigating rare events*, J. Chem. Phys. Volume 118 No. 5 (2003), DOI 10.1063/1.1533783
 - [7] D. Passerone, *Computing the density of paths in complex systems*, J. Chem. Phys. 124, 134103 (2006), DOI 10.1063/1.2181977
 - [8] A. Turco, D. Passerone, F. Cardin, *Tonelli principle: finite reduction and fixed energy molecular dynamics trajectories*, Multiscale Model. Simul. Vol 7 No. 3 (2009), pp.1171-1191, DOI 10.1137/080724319
 - [9] C. G. Gray, *When action is not least*, Am. J. Phys Vol. 75 No. 5 (2007), DOI 10.1119/1.2710480
 - [10] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, C. Landim, *Macroscopic Fluctuation Theory*, Reviews of Modern Physics, Vol. 87 (2015), DOI 10.1103/RevModPhys.87.593
 - [11] J. Deng, C. Jones, *Multi-dimensional Morse index theorems and a symplectic view of elliptic boundary value problems*, Transactions of the American Mathematical Society 363, 3 (2011) pp. 1487-1508
-