

Università degli Studi di Padova

DIPARTIMENTO DI FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI"

Corso di laurea in Fisica

Tesi di laurea triennale

**Modello di Fermi-Pasta-Ulam e modello di Toda:
Gli stati solitonici**

Relatore:
Prof. Giancarlo Benettin
Correlatore:
Prof. Antonio Ponso

Laureando:
Biasiolo Luca
Matricola:
1073507

Mercoledì 22 marzo 2017
Anno accademico: 2016/2017

Ai miei amici e ai miei genitori

Sommario

Abstract	6
Sviluppi storici.....	7
Problema di Fermi-Pasta-Ulam.....	7
Equazione di Korteweg-De Vries	8
Equazione di Schrödinger nonlineare.....	9
Metodo di scattering inverso	9
La catena di Toda.....	10
La catena di Toda.....	12
Variabili di Flaschka, integrabilità e coppia di Lax	12
Discriminante e azioni	14
Risultati.....	16
Catena ferma	16
Catena con uno o più modi armonici	16
Catena con solitone	17
Calcolo delle azioni e polinomio caratteristico.....	19
Precisione necessaria	20
Grafici ottenuti	21
Appendice.....	26
Codice Mathematica.....	26
Bibliografia.....	28
Ringraziamenti.....	29

Abstract

In questa tesi si rivisita brevemente la storia del problema di Fermi-Pasta-Ulam, del modello di Toda e delle principali equazioni non lineari integrabili. Successivamente, utilizzando Wolfram Mathematica e un algoritmo sviluppato da Flaschka, Ferguson e McLaughlin, studiamo la creazione e propagazione di uno stato solitonico nella catena di Toda.

Sviluppi storici

Problema di Fermi-Pasta-Ulam

La storia delle catene non-lineari e delle equazioni differenziali integrabili iniziò nell'estate del 1953. In quell'anno Fermi, Pasta e Ulam eseguirono i primi calcoli sulla macchina "MANIAC I" dei laboratori di Los Alamos con l'obiettivo di studiare il comportamento di catene di masse e molle con forze contenute termini quadratici e cubici. Questo esperimento è ben descritto in [1], dove si legge che *"Fermi did some work on the ergodic problem when he was young, and when electronic computers were developed he came back to this as one of the problems computers might solve. He thought that if one added a nonlinear term to the force between particles in a one-dimensional lattice, energy would flow from mode to mode eventually leading the system to a statistical equilibrium state where the energy is shared equally among linear modes (equipartition of energy)"*.

Seguendo i loro calcoli, se chiamiamo q_n lo spostamento dell' n -esima massa (con $m=1$ per ogni n) e $F(r)$ la forza quando l'allungamento della molla è r , possiamo scrivere l'equazione del moto per l' n -esima massa

$$\ddot{q}_n = F(q_{n+1} - q_n) - F(q_n - q_{n-1}) \quad (1.1).$$

L'ipotesi di catena fissa implica che $q_0 = q_{N+1} = 0$ e se introduciamo il momento coniugato p_n abbiamo l'hamiltoniana del sistema

$$H(p, q) = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2} + \sum_{n=0}^N V(q_{n+1} - q_n)$$

dove $V(r)$ è il potenziale

$$V_{FPU}(r) = \frac{r^2}{2} + \alpha \frac{r^3}{3} + \beta \frac{r^4}{4} \quad (1.2)$$

con α e β "chosen so that at the maximum displacement the nonlinear term was small, e.g. of the order of one-tenth of the linear term" ([2]). In realtà, Fermi, Pasta e Ulam studiarono separatamente i casi con $\alpha = 0$ prima e con $\beta = 0$ poi e inventarono questo problema ad hoc con l'obiettivo di studiare un sistema matematicamente semplice ma difficile da trattare con solo carta e penna. Un altro obiettivo era inoltre quello di cominciare lo studio della fisica dei sistemi non lineari e la matematica ad essi sottostante.

Come detto sopra, cercarono di osservare il processo di "mescolamento" e la velocità di "termalizzazione" nella catena, ovvero come l'energia si sarebbe propagata raggiungendo infine l'equipartizione che ci si aspettava. Iniziarono da una condizione iniziale in cui solamente il primo modo armonico

$$q_n(0) = B \sin\left(\frac{\pi n}{N+1}\right) \quad (1.3)$$

era eccitato e, sorprendentemente, scoprirono che tutto ciò non accadeva: con l'aumentare del tempo l'energia era condivisa solamente tra pochi modi normali invece di essere distribuita gradualmente tra tutti.

Questo fatto può essere visto anche graficamente: ricordando la formula per le energie dei modi armonici

$$E_k = \frac{1}{2}(p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2)$$

(dove q_k e p_k sono rispettivamente la posizione e il momento coniugato k-esimo) e plottando le prime cinque in funzione del tempo con $N=32$ e $\alpha = 0.25$ si ottiene la figura 1, che mostra come in pratica solo i primi cinque modi armonici siano eccitati, mentre gli altri presentino energie trascurabili. Ulteriori studi sul problema mostrarono poi come FPU presenta anche una ricorrenza: “after what would have been several hundred ordinary up and down vibrations, (the system) came back almost exactly to its original sinusoidal shape” ([2]). Dunque il sistema torna in un stato molto simile a quello iniziale (con una differenza di qualche punto percentuale, o anche meno) e dopo molti super-periodi lo stato è essenzialmente identico a questo. (figura 2 e 3).

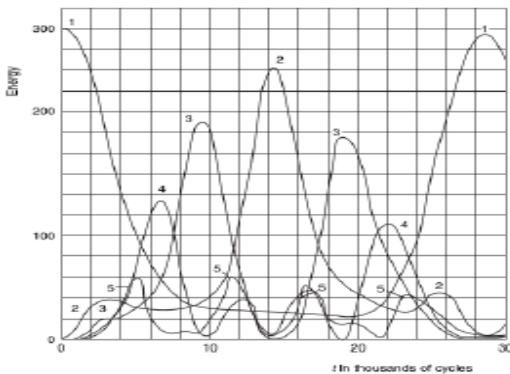


FIGURA 1: $N=32$ e $\alpha = 0.25$ (CFR [2]).

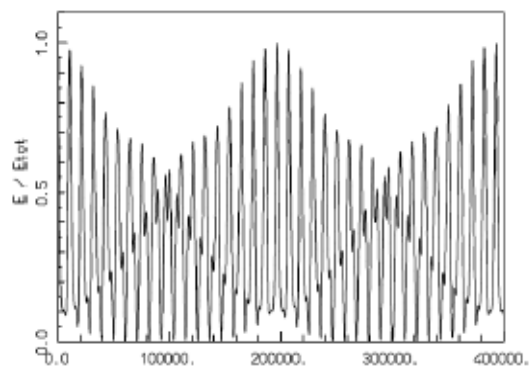


FIGURA 2: RICORRENZA IN UNA CATENA CON $N=32$.
FIGURA IN [3].

Equazione di Korteweg-De Vries

Lo studio effettuato da Fermi, Pasta e Ulam fu subito oggetto di interesse per matematici e fisici e nuove scoperte vennero velocemente alla luce. Furono effettuati esperimenti numerici e studi teorici sulle caratteristiche di FPU e tutti portarono ad una sua più profonda comprensione, mostrando quindi, come previsto da Fermi, l'importanza del problema.

Un altro evento nella storia dei sistemi integrabili e delle PDE non lineari ebbe luogo nel 1965, quando Zabusky e Kruskal dimostrarono che l'equazione di Korteweg-De Vries (KdV)

$$\partial_t \varphi + \partial_x^3 \varphi + 6\varphi \partial_x \varphi = 0.$$

si poteva ottenere studiando la catena di Toda (vedi più avanti) nel limite del continuo. Quest'ultimo si raggiunge equivalentemente considerando soluzioni (“onde”) con grande lunghezza d'onda rispetto alla distanza tra le masse oppure considerando un grande numero di particelle totali. Una descrizione accurata di questa delicata relazione si può trovare in [1].

Storicamente, la KdV era stata scoperta da lord Rayleigh e De-Vries verso fine ottocento dopo numerosi esperimenti sulle onde d'acqua bassa effettuati 70 anni prima dall'ingegnere civile John Scott Russell. Fu

poi abbandonata finché Zabusky e Kruskal ne mostrarono l'integrabilità e esibirono soluzioni che potevano essere decomposte in singole onde della forma

$$u_s = u_0 + A \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\xi - ct}{\Delta} \right].$$

Tralasciando la descrizione dei vari termini, che sarebbe poco interessante, nel libro di Toda si può leggere chiaramente una caratteristica di queste soluzioni: *"It was found that when two such pulses collided they went through one another (or absorbed and emitted) to recover their initial shapes. Since the pulse had such a property similar to a stable particle, they named it a soliton, which means a solitary wave particle"* ([1]). Questa fu storicamente la prima osservazione di solitoni in fisica matematica e da allora in avanti si scoprì che questi sono praticamente ubiquitari quando si studiano PDE integrabili.

L'equazione può essere risolta utilizzando il metodo di scattering inverso ([4]) e questo la rende una PDE integrabile, dove l'integrabilità deve essere intesa nel senso dei sistemi Hamiltoniani con infiniti gradi di libertà.

Equazione di Schrödinger nonlineare

Un altro esempio di PDE integrabile ([5]) è l'equazione di Schrödinger nonlineare (NLSE) nel caso unidimensionale. Anche questa può essere risolta analiticamente utilizzando il metodo di scattering inverso e ciò fu fatto nel 1972 da Zacharov e Shabat, poco dopo il lavoro di Zabusky e Kruskal sulla KdV.

L'equazione si scrive, in forma adimensionale, come

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\psi + \kappa|\psi|^2\psi$$

dove ψ è l'equazione d'onda e κ è il parametro di nonlinearietà. A seconda del valore di quest'ultimo, che può anche essere negativo, l'equazione può mostrare soluzioni solitoniche oppure no.

Dal momento della sua introduzione è stata applicata in una grande varietà di problemi fisici, ad esempio per studiare condensati di Bose-Einstein o la propagazione di onde in fibre ottiche nonlineari, per le onde gravitazionali, plasma ad alte temperature ecc. In generale, sembra che la NLSE appaia ogniqualvolta il problema implichi la lenta evoluzione di pacchetti di onde quasi monocromatiche in mezzi dispersivi nonlineari.

Metodo di scattering inverso

Il metodo di scattering inverso è uno dei metodi più usati per risolvere PDE nonlineari. È stato introdotto negli anni '60 per risolvere la KdV e da allora è diventato uno degli strumenti più potenti in fisica matematica, applicato in una grande varietà di casi: NLSE, equazione di Sine-Gordon, catena di Toda ecc.

Può essere visto come l'analogo nonlineare della trasformata di Fourier (quest'ultima viene infatti usata per risolvere equazioni differenziali lineari) e una delle sue caratteristiche più importanti è che spesso mostra l'esistenza di soluzioni con comportamento solitonico.

Il metodo consiste di tre passaggi:

1. Trovare la coppia di Lax associata alla PDE che si vuole studiare: si tratta di una coppia di operatori lineari L e M che soddisfano l'equazione di Lax

$$\frac{dL}{dt} = ML - LM = [M, L]$$

Questa condizione implica che $Lv = \lambda v$ e $\frac{dv}{dt} = Mv$ e garantisce l'indipendenza temporale dello spettro di L , che dunque è un integrale del moto. Da questo primo integrale poi se ne ricavano altri e si dimostra l'integrabilità della PDE.

2. Determinare tutte le proprietà richieste delle autofunzioni (evoluzione temporale, costanti di normalizzazione ecc). Questo passaggio richiede solamente la risoluzione di equazioni differenziali lineari.
3. Effettuare lo scattering inverso: si tratta di risolvere un'equazione integrale lineare introdotta da Gelfand, Levitan e Marchenko per ottenere la soluzione definitiva della PDE.

La catena di Toda

L'ultimo argomento nella storia dei sistemi integrabili che vogliamo trattare è la catena di Toda. Descriveremo brevemente le sue caratteristiche e la sua genesi, dal momento che le dedicheremo il resto della tesi.

La catena di Toda è una catena nonlineare unidimensionale di masse e molle con potenziale esponenziale. Fu inventata da Morikazu Toda nel 1966. In [1] possiamo leggere che *"From the idea that the fundamentals of the mathematical methods for nonlinear lattices would be elucidated by rigorous results, I was led in 1966 to the lattice with exponential interaction"* e che *"there will be some nonlinear lattice which admits rigorous periodic waves, and that certain pulses (lattice solitons) will be stable there"*. Inoltre lui cercò *"potential which admits integration of the equation of motion (1) [...] it is also required that the potential must have some physical meaning, so that it really provides us with a mechanical system with wide applicability. Under these conditions, many functions were tried"*.

Questi estratti mostrano come il modello fu inventato semplicemente provando differenti potenziali e trovando quello che infine semplificava maggiormente i conti.

Al di là della storia, il modello presenta la solita hamiltoniana della catena di masse e molle con potenziale che stavolta è

$$V_T(r) = \frac{1}{\lambda^2} (e^{-\lambda r} - 1 + \lambda r) \quad (1.4)$$

dove λ è un numero reale.

Nel 1974 fu dimostrato indipendentemente da Flaschka e Henon che questo sistema hamiltoniano è integrabile e le sue costanti del moto possono essere descritte esplicitamente (cfr. [7] e [8]). In questo lavoro seguiremo la derivazione di Flaschka, che usa un semplice cambio di variabili per produrre l'insieme completo degli integrali. Questi in ultima analisi risultano collegati agli autovalori della matrice di Lax L .

Nel 1982, in un altro articolo scritto da Flaschka, Ferguson e McLaughlin fu sviluppato un importante algoritmo che permette di studiare i moti della catena con l'ausilio di simulazioni numeriche. Questo algoritmo si basa sugli integrali del moto e consiste nel plottare una forma modificata del polinomio caratteristico di L . Una volta fissate le condizioni iniziali permette di capire visivamente quante azioni hanno valore diverso da zero e permette di distinguere tra moti con caratteristiche differenti. Lo studieremo più ampiamente nel prossimo capitolo, dal momento che lo useremo per implementare stati di solitone singolo nella catena.

Nello stesso articolo e poi in altri fu mostrato come la catena di Toda è una versione integrabile del problema di FPU. Infatti, se si considera il singolo modo armonico (1.3) come condizione iniziale, si scelgono

poi $\lambda = -0.5$ in Toda e $\alpha = 0.25$ e $\beta = 0$ in FPU e si plottano i grafici dell'energia si ottiene la figura 3, che mostra come i due modelli siano pressoché identici da questo punto di vista. Oltre a ciò, se si considera la serie di McLaurin del potenziale di Toda (1.4)

$$V_T(r) = \frac{r^2}{2} + \frac{\alpha_T r^3}{3} + \frac{\beta_T r^4}{4} + \frac{\gamma_T r^5}{5} + \dots$$

e si prende $\lambda = -2\alpha$ allora $\alpha_T = \alpha$, $\beta_T = \frac{2}{3\alpha^2}$, $\gamma_T = \frac{1}{3}\alpha^3$ ecc. si ha

$$V_{FPU}(r) - V_T(r) = \frac{(\beta - \beta_T)r^4}{4} + \frac{\gamma_T r^5}{5} + \dots$$

Ciò mostra come FPU sia tangente almeno fino ad ordine tre a Toda. È quindi possibile studiare il primo usando il secondo, che essendo integrabile offre un modello molto più gestibile. Ricordando poi che Toda tende all'equazione di KdV nel limite del continuo si ha che anche FPU tende a questa nello stesso limite.

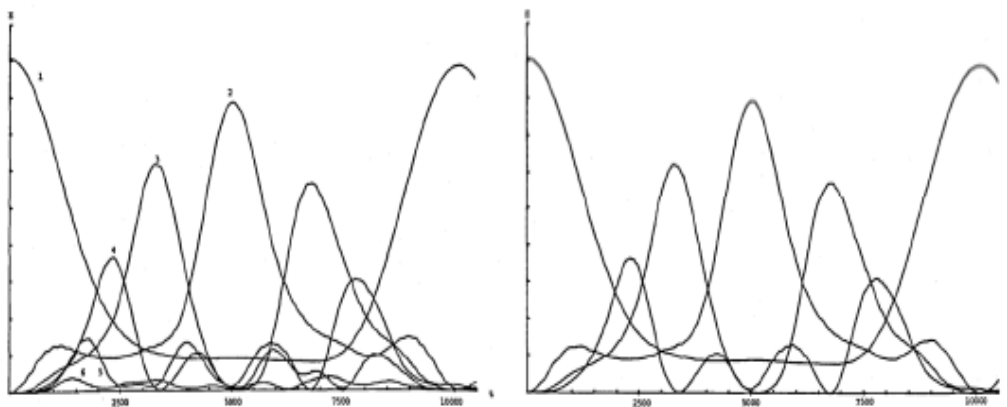


FIGURA 3: GRAFICI DELLE ENERGIE DEI PRIMI CINQUE MODI NORMALI PER FPU E TODA. FIGURA IN [9].

La catena di Toda

Descriveremo ora più ampiamente le varie caratteristiche della catena di Toda e in particolare quelle che abbiamo usato per studiarla con Wolfram Mathematica.

Innanzitutto, si può distinguere tra due differenti tipi di catena di Toda: quella periodica (con $q_{n+N} = q_n$) e quella con estremi fissi (con $q_0 = 0$ e $q_{N+1} = 0$). Il secondo caso può essere ricondotto al primo estendendo le p_n e le q_n come funzioni dispari su una catena periodica di $2N+2$ particelle, ovvero ponendo

$$\begin{aligned} q_{n+N+1} &= -q_n & \text{per } n = 1, 2, \dots, N+1 \\ p_{n+N+1} &= -p_n & \text{per } n = 1, 2, \dots, N+1 \end{aligned}$$

Quindi l'unico caso interessante è il primo e per questo ci concentreremo solo su questo.

Variabili di Flaschka, integrabilità e coppia di Lax

Come brevemente accennato prima, Flaschka costruì una trasformazione diretta da variabili fisiche a variabili di azione-angolo, mostrando così che la catena di Toda è un sistema integrabile. La trasformazione utilizzata è

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2}(q_{n+1}-q_n)} \\ b_n &= -\frac{1}{2} p_n \end{aligned}$$

(in letteratura i segni e i coefficienti possono variare).

Ora, le coordinate fisiche q_n e p_n soddisfano le equazioni del moto (nel resto della tesi porremo $\lambda = 1$)

$$\begin{aligned} \dot{q}_n &= p_n \\ \dot{p}_n &= \frac{1}{\lambda} [e^{-\lambda(q_{n+1}-q_n)} - e^{-\lambda(q_n-q_{n-1})}] \end{aligned}$$

Queste equazioni porgono automaticamente le corrispondenti per le a_n e le b_n

$$\begin{aligned} \dot{a}_n &= \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_{n+1}-q_n)} \right) = \frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_{n+1}-q_n)} \left(-\frac{\lambda}{2} (\dot{q}_{n+1} - \dot{q}_n) \right) = a_n \left(-\frac{\lambda}{2} (p_{n+1} - p_n) \right) \\ &= a_n (b_{n+1} - b_n) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} \dot{b}_n &= -\frac{\lambda}{2} \dot{p}_n = -\frac{\lambda}{2} \frac{1}{\lambda} [-e^{-\lambda(q_{n+1}-q_n)} + e^{-\lambda(q_n-q_{n-1})}] = 2 \left(\frac{e^{-\lambda(q_{n+1}-q_n)}}{4} - \frac{e^{-\lambda(q_n-q_{n-1})}}{4} \right) \\ &= 2 \left[\left(\frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_{n+1}-q_n)} \right)^2 - \left(\frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_n-q_{n-1})} \right)^2 \right] = 2(a_n^2 - a_{n-1}^2) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Possiamo ora definire le due matrici L e B che formano la coppia di Lax associata alla catena di Toda. Sono costruite semplicemente partendo dalle a_n e dalle b_n :

$$L = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & & & a_N \\ a_1 & b_2 & a_2 & & 0 \\ & a_2 & \dots & & \\ & & & \dots & \\ & 0 & & a_{N-2} & b_{N-1} & a_{N-1} \\ a_N & & & & a_{N-1} & b_N \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & a_1 & & & -a_N \\ -a_1 & 0 & a_2 & & \\ & -a_2 & 0 & & \\ & & & \dots & \\ & & & & \dots & a_{N-1} \\ a_N & & & -a_{N-1} & & 0 \end{pmatrix}$$

Se ora calcoliamo la derivata temporale di L e ricordiamo le equazioni del moto (2.1) e (2.2) si può verificare che

$$\frac{d}{dt}L = [B, L] = BL - LB$$

e questa è proprio l'equazione di Lax che ci permette di concludere che lo spettro di L è costante nel tempo e costituisce un integrale del moto.

Dimostriamo in modo rigoroso questo risultato: notiamo innanzitutto che B è matrice antisimmetrica e da questo segue immediatamente che il sistema di equazioni differenziali

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}U = BU \\ U(0) = id_N \end{cases}$$

ammette sempre come soluzione una matrice ortogonale U. Usando ora $U^T U = id_N$ abbiamo

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}U^T L U &= \left(\frac{d}{dt}U^T\right) L U + U^T \left(\frac{d}{dt}L\right) U + U^T L \left(\frac{d}{dt}U\right) = U^T B^T L U + U^T \left(\frac{d}{dt}L\right) U + U^T L B U = \\ &= U^T \left(-BL + \frac{d}{dt}L + LB\right) U = 0 \end{aligned}$$

E questo implica la tesi ($L(t) = U(t)L(0)U(t)^{-1}$), quindi L(t) è unitariamente simile a L(0) e lo spettro si conserva nel tempo. Oltre a ciò, L è simmetrica, quindi tutti i suoi autovalori sono reali. Questo significa che le costanti del moto della catena sono correlate allo spettro di L(0) ed è quindi possibile studiare l'evoluzione della catena semplicemente implementando una condizione iniziale e studiando questa matrice all'istante iniziale, senza dover integrare le equazioni del moto. Dal momento che lo spettro di L è costante, anche le quantità

$$f_k = Tr(L^k) = \sum_{j=1}^N \lambda_j^k \quad \text{per } k = 1, \dots, N$$

lo sono e sono collegate a quelle definite ad esempio da Henon nel suo articolo:

$$J_m = \frac{(-2)^m}{m} \text{Tr}(L^m) \quad \text{per } m < N$$

Discriminante e azioni

Un altro oggetto molto importante che permette lo studio della catena è il discriminante $\Delta(\lambda)$. Questo è definito partendo dal polinomio caratteristico di L (p_L):

$$\det(\lambda I - L) = p_L(\lambda) = \left[\prod_{n=1}^N a_n \right] [\Delta(\lambda) - 2] \quad (2.3)$$

Dal momento che

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^N a_n &= \prod_{n=1}^N \frac{1}{2} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_{n+1}-q_n)} = \frac{1}{2^N} e^{-\frac{\lambda}{2} \sum_{n=1}^N (q_{n+1}-q_n)} = \\ &= \frac{1}{2^N} e^{-\frac{\lambda}{2}(q_{N+1}-q_1)} = 2^{-N} \end{aligned}$$

possiamo semplificare (2.3) e scrivere

$$\Delta(\lambda) = 2 + 2^N p_L(\lambda) \quad (2.4)$$

La derivazione rigorosa di Δ in realtà viene dalla soluzione dell'equazione di Hill discreta e dalla teoria di Floquet (vedi [10] per una breve descrizione dell'argomento). Siccome lo spettro di L è costante del moto, $p_L(\lambda)$ lo è a sua volta e lo stesso vale per Δ .

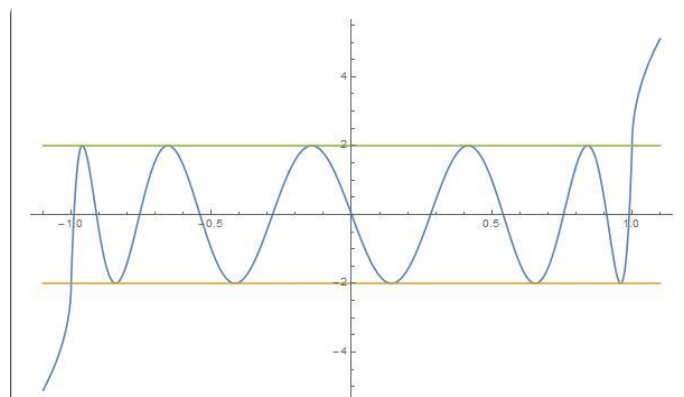


FIGURA 4: GRAFICO DI $\Delta(\lambda)$ QUANDO $N=11$ E LA CATENA È FERMA

In [9] si trova una breve descrizione di questo grafico: Δ oscilla tra +2 e -2 ed è quasi interamente contenuto nell'intervallo $[-1, +1]$. Può presentare dei "bump" al di sopra di +2 o al di sotto di -2 e altre deformazioni causate dalla differente condizione iniziale.

A titolo di esempio, quando la catena è ferma si ha $a_n = \frac{1}{2}$ e $b_n = 0$ e il grafico di $\Delta(\lambda)$ oscilla tra i due estremi ± 2 attraversando l'asse orizzontale $N-1$ volte. Al di fuori di $[-1, +1]$ invece va a $\pm\infty$ (vedi figura 4).

Il punto importante è che le piccole aree tra il grafico di Δ e le rette $x = \pm 2$ (i cosiddetti "bump" di Δ) sono strettamente collegati ai valori delle azioni della catena. Prima di esplorare questa relazione, denominiamo "gap" gli intervalli nelle rette $x = \pm 2$ che delimitano i bump (questi gap possono collapsare anche ad un punto solo, nel qual caso diremo che il gap è chiuso). Chiamiamo inoltre λ_j gli estremi di questi gap partendo da quello più in alto a destra, così che λ_1 è la prima intersezione sulla destra tra il grafico di Δ e $x = 2$, poi seguendo il grafico abbiamo λ_2 e λ_3 , ecc. (vedi figura 5).

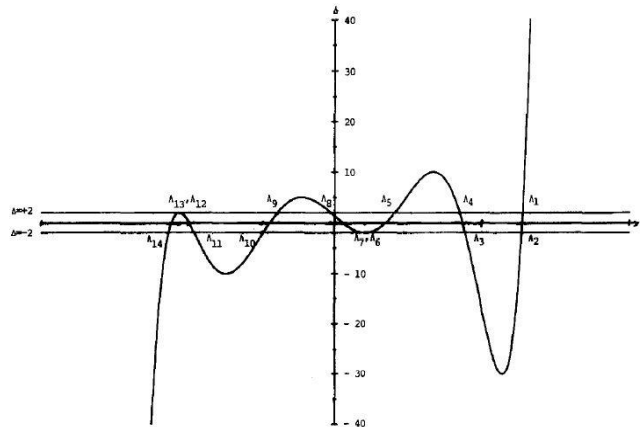


FIG. 2. A discriminant. The values of $|\Delta|$ at its extrema were prescribed (30, 10, 0, 5, 10, 0) and Δ was reconstructed by Kammerer's algorithm as described in [9].

FIGURA 5: NUMERAZIONE DELLE λ_j . PRESA DA [9].

Tenendo a mente queste notazioni, possiamo enunciare il fondamentale teorema contenuto in [9]:

Teorema Il numero di gradi di libertà eccitati da una condizione iniziale è uguale al numero di gap aperti nel grafico di Δ e il valore della j -esima azione è

$$J_j = \frac{2}{\pi} \int_{\lambda_{2j+1}}^{\lambda_{2j}} \cosh^{-1} \left(\frac{|\Delta(\lambda)|}{2} \right) d\lambda$$

Come detto prima, il grafico di Δ è indipendente dal tempo e questo teorema mostra visivamente, una volta implementata una condizione iniziale, quali azioni siano eccitate e quali no. È quindi possibile descrivere il moto della catena risultante, perlomeno in casi semplici e pur sempre qualitativamente.

Per rendere le azioni ancora più visibili possiamo definire il "discriminante modificato" m

$$m(\lambda) = \begin{cases} \Delta(\lambda) & \text{se } |\Delta(\lambda)| \leq 2 \\ \text{sign}(\Delta(\lambda)) \left\{ 2 + \frac{2}{\pi} \cosh^{-1} \left(\frac{|\Delta(\lambda)|}{2} \right) \right\} & \text{se } |\Delta(\lambda)| \geq 2 \end{cases}$$

E questa sarà in effetti la funzione mostrata nei nostri grafici da ora in avanti. Il discriminante modificato è utile e più gestibile rispetto a Δ perché le aree dei suoi bump coincidono proprio con i valori delle azioni eccitate.

Risultati

In [9] gli autori sono riusciti a studiare catene con N fino a 30 perché gli algoritmi da loro utilizzati avevano a disposizione al massimo 16 cifre decimali (precisione doppia). Tenendo presente questo fatto, l'obiettivo finale di questa tesi è stato quello di riprodurre i grafici dell'articolo con N molto più alto (fino a 1000) focalizzandosi in particolare su quelli in cui la catena ha un singolo solitone come condizione iniziale.

Prima di cominciare lo studio dei solitoni è stato necessario implementare la catena ferma e la catena con modo armonico eccitato in Wolfram Mathematica, nonché decidere un algoritmo per il calcolo delle azioni e capire quante cifre decimali di precisione fossero necessarie al variare di N . Questo perché per ottenere i grafici di m e calcolare i valori delle azioni si devono trovare le soluzioni di $\Delta(\lambda) = \pm 2$ (si veda più avanti), un polinomio di grado N che "oscilla velocemente" in $[-1, +1]$. Questo calcolo crea, come si può intuire, un problema computazionale di precisione che non è banale.

Catena ferma

In questo semplice caso si ha $a_n = \frac{1}{2}$ e $b_n = 0$ come già visto prima. I grafici di Δ e m sono simili a quello di figura 4 e all'aumentare di M si ha solo un maggior numero di "oscillazioni" di Δ all'interno dell'intervallo $[-1, +1]$.

È possibile ricavare una formula esatta per Δ in $[-1, +1]$, che risulta essere

$$\Delta(\lambda) = 2 \cos \alpha N$$

Una derivazione di questo risultato si può trovare ad esempio in [10]. Le azioni sono ovviamente tutte pari a zero e non ci sono gradi di libertà eccitati.

Catena con uno o più modi armonici

La condizione iniziale utilizzata è un singolo modo armonico o una combinazione lineare di essi. La formula generale per il j -esimo è

$$q_n^j = \sqrt{\frac{2}{N}} \frac{a}{\omega_j} \sin(k_j + \omega_j t)$$

dove

$$k_j = \frac{2\pi j}{N} \quad \omega_j = 2 \sin\left(\frac{k_j}{2}\right)$$

sono rispettivamente il numero d'onda e la pulsazione associata. a è l'ampiezza del modo.

Se si eccita un solo modo (ad esempio il primo come in figura 5) il grafico di $m(x)$ sembra avere solo il primo gap aperto. In realtà, seppur poco visibile, anche il secondo lo è e dà un valore della corrispondente azione diverso da 0.

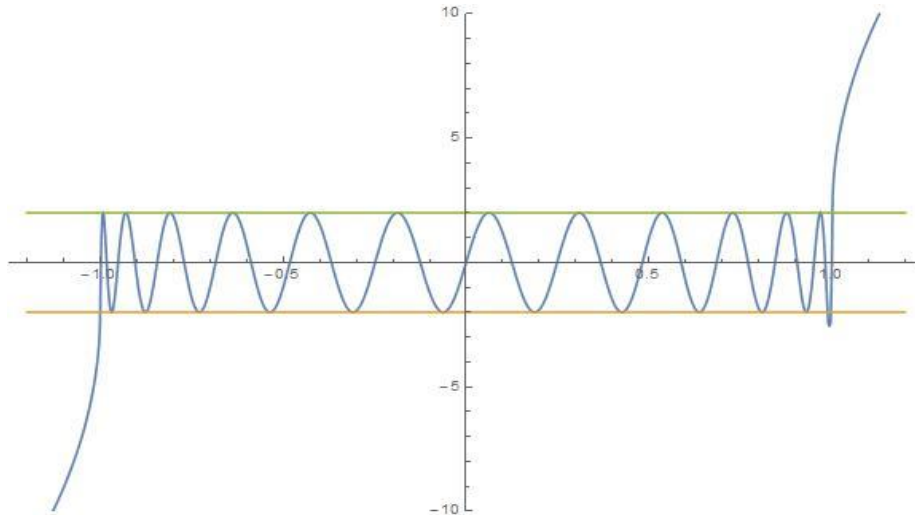


FIGURA 5: PRIMO MODO ARMONICO ECCITATO, $\alpha = 0.04$ E $N=25$. NOTARE COME ANCHE LA SECONDA AZIONE È ECCITATA

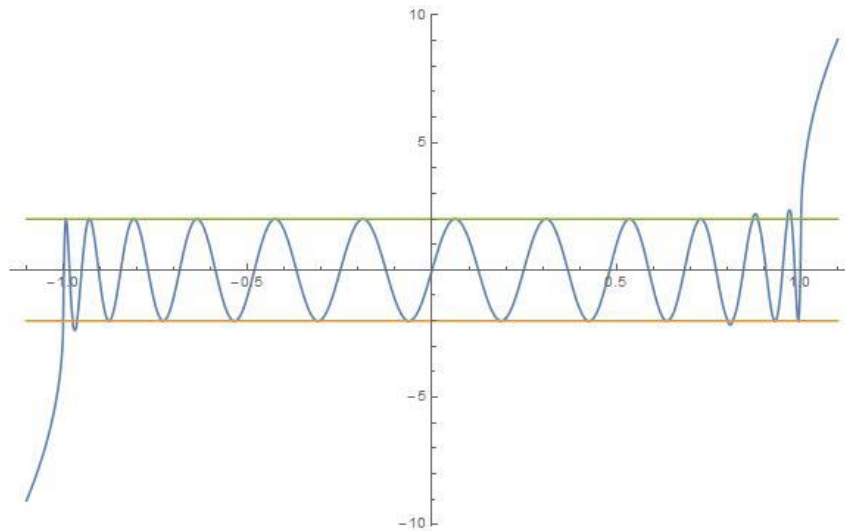


FIGURA 6: CATENA CON MODI 2,4,5 E 23 ECCITATI CON AMPIEZZA $\alpha = 0.04$

Stesso fenomeno se si eccitano più modi normali come in figura 6: le azioni diverse da zero sono sia quelle che corrispondono come indice ai singoli modi normali sia alcune "limitrofe" come la 3°, la 6° e la 24°.

Catena con solitone

La condizione iniziale è data ora da un singolo solitone, soluzione esatta per la catena infinita ma non per quella periodica. Questo è descritto dalle formule in [9]

$$4a_{n-1}^2 - 1 = \sinh^2(\gamma) \operatorname{sech}^2(\gamma n \pm t \sinh(\gamma) + \delta) \quad (3.1)$$

$$p_n(t) = \frac{2 \sinh^2(\gamma)}{\cosh(\gamma) + \cosh \left[2\gamma \left(n - n_0 - \frac{\sinh(\gamma)}{\gamma} t \right) \right]} \quad (3.2)$$

Abbiamo utilizzato (3.1) e (3.2) nonostante la catena periodica finita ammetta una soluzione esatta analoga (detta onda cnoidale) perché quest'ultima presenta un alto numero di parametri ed è risultata troppo complicata da implementare.

Le formule sopra descrivono proprio il singolo picco di cui si parla nel libro di Toda, che risulta più o meno concentrato sulla catena a seconda del valore di γ . A questo proposito, ricordando che le masse sono distanziate da molle a riposo di lunghezza unitaria si può stimare che la larghezza del solitone sulla catena sia circa $\frac{1}{\lambda}$ siti partecellari. A seconda del segno di t si ha poi propagazione verso destra o verso sinistra, mentre n è l'indice che corre sulle particelle e δ una fase. Nelle figure 7 e 8 si possono vedere rispettivamente i profili delle a_n e delle b_n usate come condizioni iniziali (quindi calcolate a $t=0$) e un grafico temporale tipico.

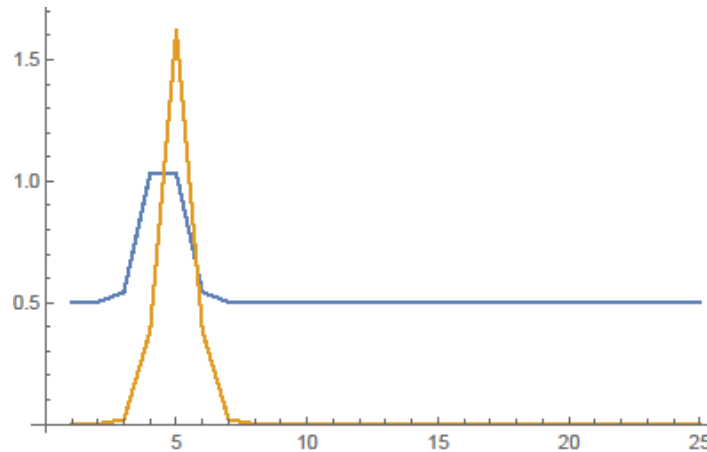


FIGURA 7: PROFILO DELLE a_n E DELLE b_n IN UN SOLITONE

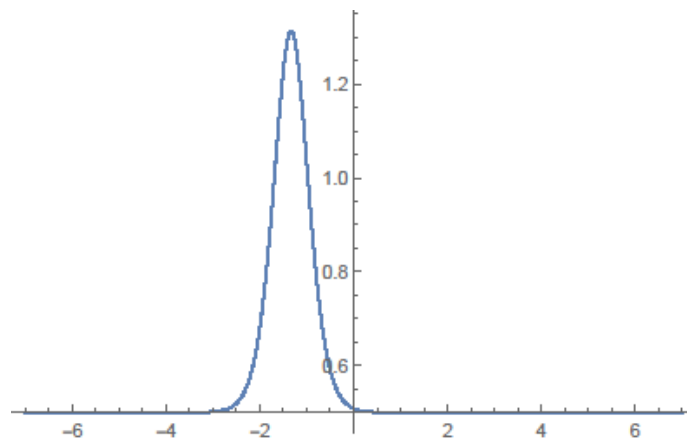


FIGURA 8: PROFILO TEMPORALE DI UN SOLITONE CON $\gamma = 1.62$

Una grossa parte del lavoro di questa tesi è stato costruire un modello adatto in Wolfram Mathematica che riproducesse le figure in [9]. Una prima difficoltà è stata trovare la relazione corretta tra la fase δ della formula (3.1) e l'indice n_0 della (3.2). Il primo parametro infatti sembrava trascurabile mentre il secondo, fissando il picco delle p_n , aveva una sua importanza. Inoltre non era chiaro da [9] quali fossero le formule effettivamente utilizzabili e come erano legati tra loro questi parametri, presenti in sezioni diverse. Per risolvere il problema abbiamo utilizzato le equazioni del moto (2.1) e (2.2). Lavorando con l'obiettivo di ripristinare l'identità e la coerenza tra i membri delle singole equazioni si è trovato che la formula corretta da utilizzare è

$$\delta = -\gamma n_0 - \frac{\gamma}{2}$$

Una seconda difficoltà incontrata è legata alla formula (2.4), che inizialmente implementata nell'algoritmo dava una dilatazione di Δ all'aumentare di γ . I grafici risultanti non combaciavano quindi con quelli dell'articolo e lavorando empiricamente si è trovato un fattore correttivo $e^{-\gamma}$ da inserire nella formula di $\Delta(\lambda)$:

$$\Delta(\lambda) = 2 + 2^N e^{-\gamma} p_L(\lambda)$$

La giustificazione teorica per questo fattore risiede nella derivazione della (2.4): il prodotto delle a_n porge sì un fattore 2^{-N} , ma questo vale solo in caso di soluzione esatta (onda cnoidale). Reinserendo dunque $\prod_{n=1}^N a_n$ al posto di 2^{-N} e utilizzando la formula più generale

$$\Delta(\lambda) = 2 + \frac{p_L(\lambda)}{\prod_{n=1}^N a_n}$$

abbiamo risolto il problema delle dilatazioni, dovuto in definitiva ad una normalizzazione mancante.

Un'altra piccola difficoltà è insita nel segno delle b_n : nel secondo capitolo di questa tesi, seguendo il libro di Toda, le abbiamo definite con segno negativo, ma abbiamo anche sottolineato che in letteratura i segni in questione possono variare. Infatti nell'articolo di Ferguson et al. il segno usato è positivo.

Risolte queste difficoltà siamo riusciti ad ottenere grafici identici a quelli di riferimento. Le azioni calcolate al variare di N mostrano correttamente come la prima abbia un valore molto grande (vicino a N) mentre le altre, una volta inserita nel modello la precisione da utilizzare, siano uguali a zero.

Calcolo delle azioni e polinomio caratteristico

Dal punto di vista computazionale, abbiamo calcolato le azioni definendo oltre a L anche un'altra matrice L_- del tutto analoga

$$L_- = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & & & & -a_N \\ a_1 & b_2 & a_2 & & & 0 \\ & a_2 & \dots & & & \\ & & & \dots & & \\ & & & & \dots & \\ & 0 & & a_{N-2} & b_{N-1} & a_{N-1} \\ -a_N & & & & a_{N-1} & b_N \end{pmatrix}$$

Questo perché le matrici L e L_- permettono di calcolare rispettivamente le radici delle equazioni $\Delta(\lambda) + 2 = 0$ e di $\Delta(\lambda) - 2 = 0$, che sono esattamente gli estremi dei gap. Una trattazione più completa dell'introduzione di L_- e del collegamento con le due equazioni può essere trovata in [1]. Queste radici in totale sono in numero di $2N$ e danno dunque $N-1$ azioni. Accorpando poi le soluzioni e numerandole come λ_j in ordine decrescente

$$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_{2N-2} \geq \lambda_{2N-1} > \lambda_{2N}$$

si ottiene la successione vista prima.

Il polinomio caratteristico di queste due matrici, fondamentale per la costruzione di $\Delta(\lambda)$, è stato calcolato semplicemente utilizzando la funzione *CharacteristicPolynomial[matrix, x]* di Mathematica.

Per il calcolo degli integrali delle azioni si è invece preferito evitare di utilizzare un calcolo esatto, poco utile ai nostri scopi e dispendioso in termini di tempo macchina, in favore di un algoritmo composto del tipo Newton-Cotes di grado 4: l'intervallo di integrazione $[\lambda_{2j+1}, \lambda_{2j}]$ è stato suddiviso in 10 parti e ognuna di queste suddivisa ulteriormente in 4. Poi il calcolo su ogni parte è stato effettuato tramite le formule

$$\int_a^b f(x) dx \cong h \sum_{i=0}^4 w_i f(x_i)$$

dove

$$h = \frac{b-a}{4}, \quad x_i = a + ih$$

e si è preso

$$w_0 = w_4 = \frac{14}{45}, \quad w_1 = w_3 = \frac{64}{45}, \quad w_2 = \frac{24}{45}$$

Precisione necessaria

Wolfram Mathematica lavora di solito con precisione arbitraria e questo rende i risultati precisi con un numero infinito di cifre significative. Nonostante ciò, abbiamo comunque effettuato uno studio empirico per capire quante cifre minime di precisione fossero necessarie per ottenere correttamente i grafici di Δ e m e calcolare i valori delle azioni eccitate.

Sulla falsariga di [10] abbiamo inizialmente implementato la precisione sulle a_n e sulle b_n tramite la funzione `SetPrecision[expr, precision]` e poi sulla funzione `Plot` tramite l'opzione `WorkingPrecision` \rightarrow `precision`. Fatto ciò è possibile vedere graficamente se la precisione utilizzata è sufficiente: basta infatti osservare attentamente il grafico di m e vedere se ci sono imprecisioni, discontinuità o patologie.

Questo procedimento ha portato a scoprire che, come trovato da Cecchetto nel caso particolare di modi armonici (ma il metodo è indipendente dalla condizione iniziale utilizzata), la precisione necessaria anche qui ha un andamento lineare con N che risulta

$$prec \sim \frac{N}{2}$$

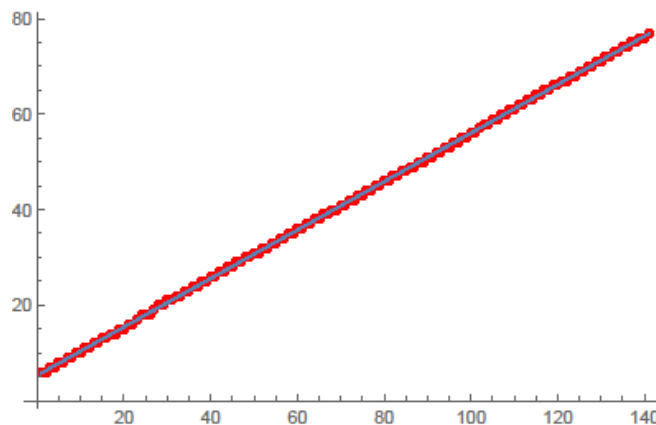


FIGURA 9: GRAFICO CON CIFRE DECIMALI MINIME DI PRECISIONE VS N

Dopo aver trovato questo risultato, in tutti i grafici mostrati in questa tesi si sono utilizzate un numero di cifre di precisione pari a $0.6N$ approssimato per eccesso all'intero più vicino, in modo da assicurare precisione sufficiente in tutti i casi. Questo è stato fatto tramite la funzione `Ceiling[0.6 N]` di Mathematica.

Grafici ottenuti

In questa sezione includiamo i grafici ottenuti per N variabile da 25 a 1000 ponendo $\gamma = 1.62$ nelle formule per il solitone. Il valore per γ non è casuale ed è stato ottenuto da [9]: in un passaggio gli autori sostengono infatti di aver utilizzato per i loro grafici un solitone di velocità $\frac{\sinh(\gamma)}{\gamma} = 1.5$ e risolvendo numericamente l'equazione appena scritta si ottiene il valore usato.

È da notare come i grafici disegnati con un numero di cifre decimali inferiore al 50% di N (ad esempio 12 per $N=25$ o 49 per $N=100$) presentino discontinuità e patologie. Queste sono tali da impedire il calcolo di alcune azioni, che Wolfram Mathematica segnala infatti come errori. Ciò mostra in altro modo quanto già detto prima sulla precisione necessaria.

Gli ultimi due grafici mostrano infine due solitoni in una catena da $N=25$ che viaggiano o nella stessa direzione (verso sinistra) o in direzioni opposte.

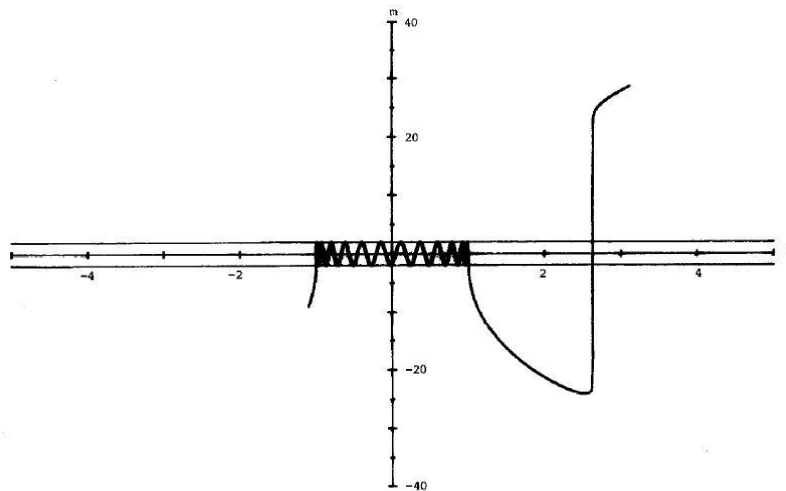


FIG. 7. Modified discriminant for Fig. 6.

GRAFICO DI RIFERIMENTO, PRESO DA [9]. QUI $N=25$, $\gamma = 1.62$

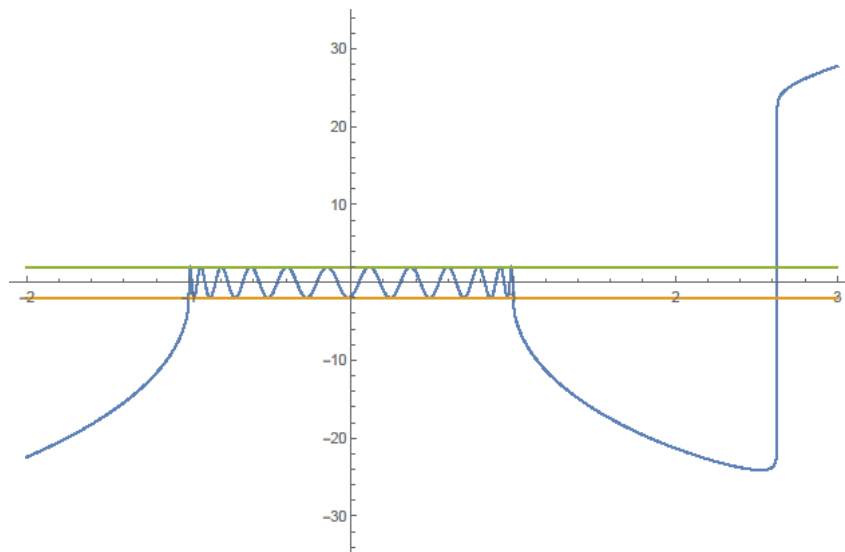
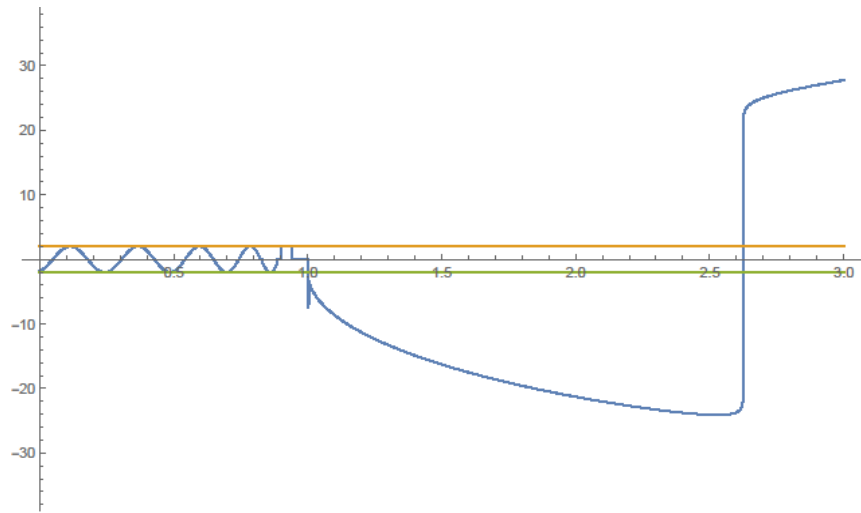
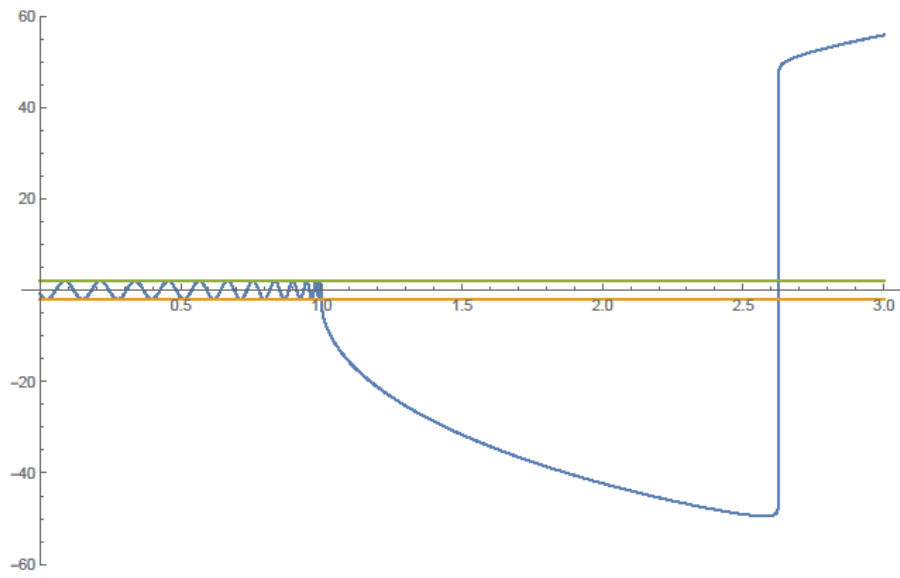


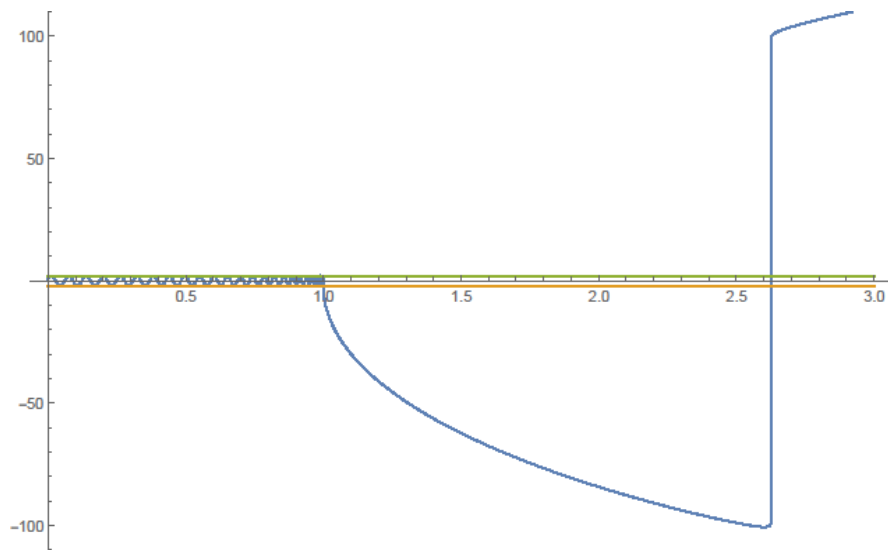
GRAFICO OTTENUTO CON WOLFRAM MATHEMATICA, $N=25$ E $\gamma = 1.62$



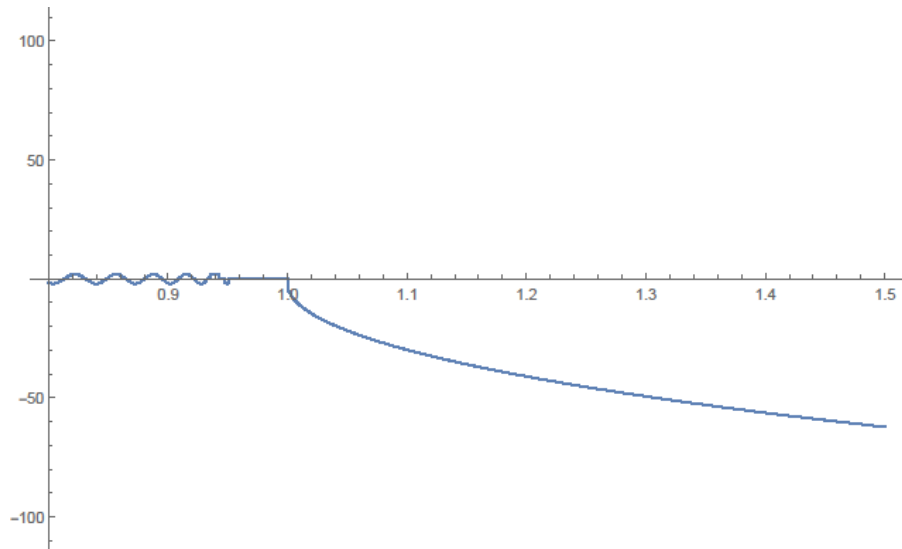
N=25 E PRECISIONE DI 12 CIFRE DECIMALI



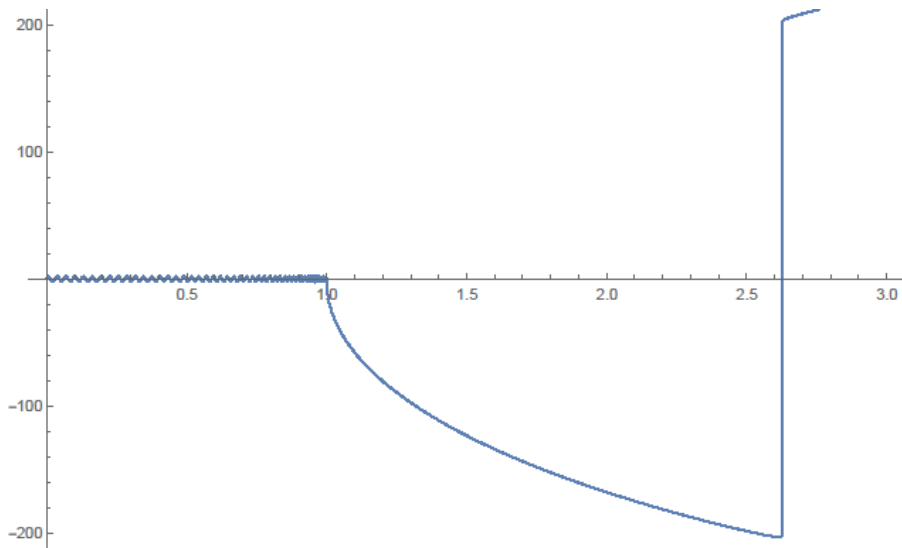
N=50. IL SOLITONE HA IDENTICA FORMA E Δ PIÙ "OSCILLAZIONI"



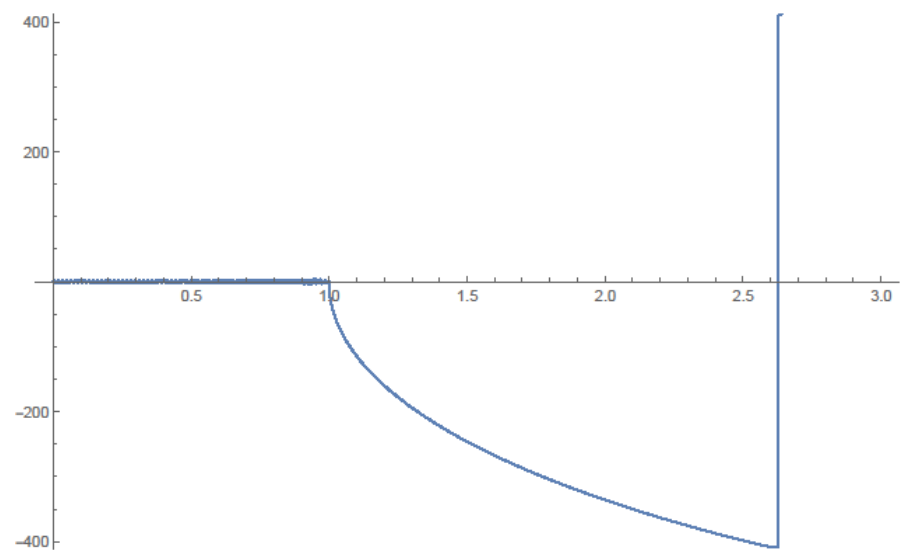
N=100



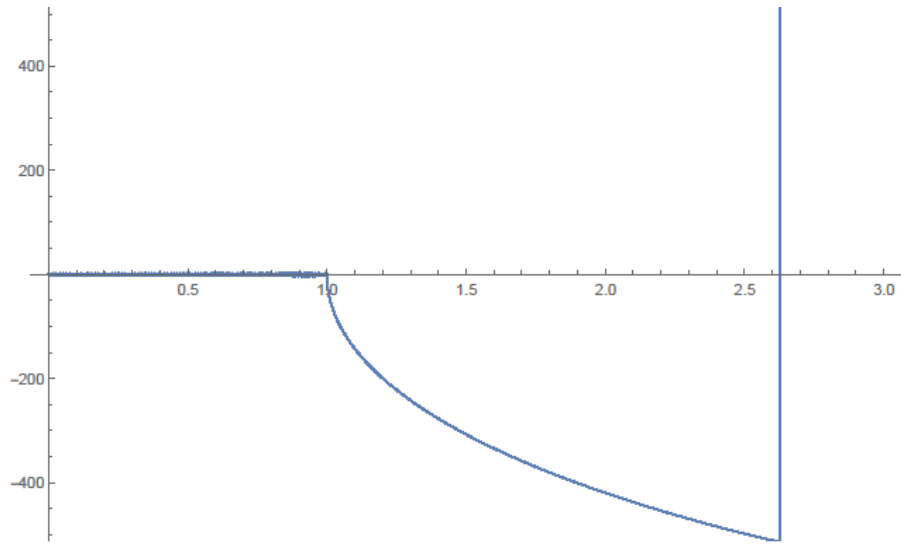
N=100 E PRECISIONE DI 49 CIFRE DECIMALI



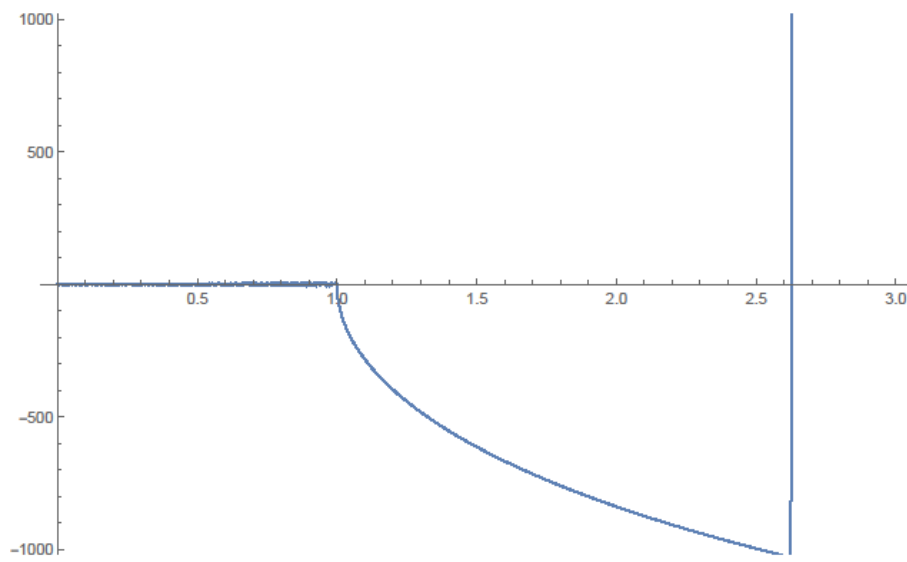
N=200



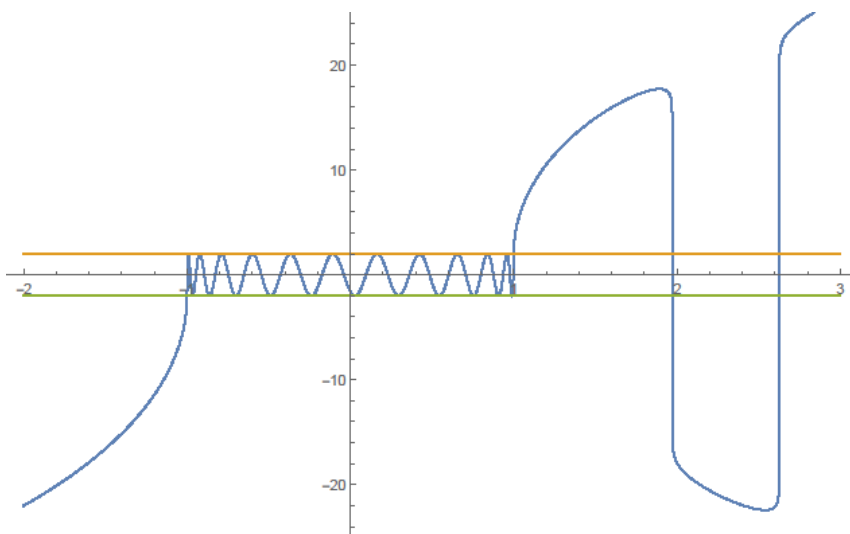
N=400



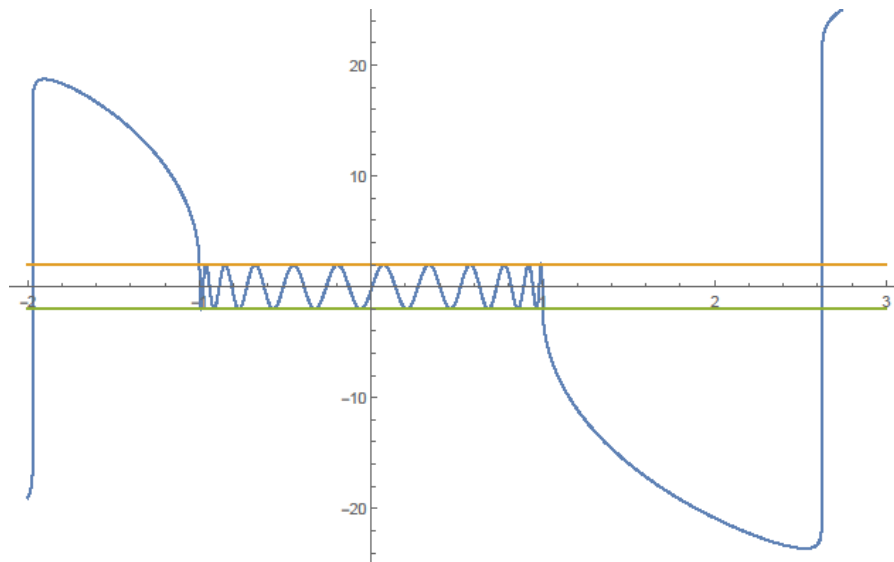
N=700



N=1000



DUE SOLITONI CHE VIAGGIANO VERSO SINISTRA NELLA CATENA



DUE SOLITONI CHE VIAGGIANO IN DIREZIONI OPPOSITE NELLA CATENA

Appendice

Codice Mathematica

Caso catena ferma

```
Toda[M_]:=Block[{q,p,qn,pn,an,bn,Lpos,Lneg,Δ,m,λn,Jn},
λ=1;
q=Table[0,{n,1,M}];
p=Table[0,{n,1,M}];
qn=Append[q,q[[1]]];
pn=Append[p,p[[1]]];
an=Table[SetPrecision[1/2E^(-λ/2(qn[[n+1]]-qn[[n]])),Ceiling[0.6*M]],{n,1,M}];
bn=Table[SetPrecision[-λ/2pn[[n]],Ceiling[0.6*M]],{n,1,M}];
Lpos=SparseArray[{Band[{1,1}]>bn,Band[{1,2}]>an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]>an[[1;;M-1]],{1,M}>an[[M]],{M,1}>an[[M]]},{M,M}];
Lneg=SparseArray[{Band[{1,1}]>bn,Band[{1,2}]>an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]>an[[1;;M-1]],{1,M}>-an[[M]],{M,1}>-an[[M]]},{M,M}];
Δ[x_]:=Evaluate[2^M*(-1)^M*CharacteristicPolynomial[SetPrecision[Lpos,Ceiling[0.6*M]],x]+2];
m[x_]:=If[Abs[Δ[x]]<=2,Δ[x],Sign[Δ[x]](2+2/Pi ArcCosh[Abs[Δ[x]]/2])];
λn=Sort[Join[Eigenvalues[Lpos],Eigenvalues[Lneg]],Greater];
Jn=Table[2/Pi integral[ArcCosh[Abs[Δ[x]]/2]/.x-># &,{SetPrecision[λn[[2n+1]],Ceiling[0.6*M]],SetPrecision[λn[[2n]],Ceiling[0.6*M]]},10]//Re,{n,1,M-1}];
{Plot[{m[x],x=-2,x=2},{x,-1.1,1.1},ImageSize->Large,WorkingPrecision->Ceiling[0.6*M]],Jn}];
```

Caso catena con modo armonico

```
Toda2[M_,a_,j_]:=Block[{q,p,kn,ωn,pn,qn,an,bn,Lpos,Lneg,pLpos,Δ,m,λnpos,λnneg,λn,Jn},
λ=1;
q=Table[0,{n,1,M}];
p=Table[0,{n,1,M}];
kn=Table[0,{n,1,M}];
kn[[j]]=2Pi*j/M;
ωn=Table[2Sin[kn[[n]]/2],{n,1,M}];
q=Table[Sqrt[2/M]*(a/ωn[[j]])*Sin[kn[[j]]*n+ωn[[j]]*t],{n,1,M}];
pn=Table[D[q[[n]],t]/.t->0,{n,1,M}];
q=q/.t->0;
qn=Append[q,q[[1]]];
an=SetPrecision[Table[1/2E^(-λ/2(qn[[n+1]]-qn[[n]])),{n,1,M}],Ceiling[0.6*M]];
bn=SetPrecision[Table[-λ/2pn[[n]],{n,1,M}],Ceiling[0.6*M]];
Lpos=SparseArray[{Band[{1,1}]>bn,Band[{1,2}]>an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]>an[[1;;M-1]],{1,M}>an[[M]],{M,1}>an[[M]]},{M,M}];
Lneg=SparseArray[{Band[{1,1}]>bn,Band[{1,2}]>an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]>an[[1;;M-1]],{1,M}>-an[[M]],{M,1}>-an[[M]]},{M,M}];
pLpos[x_]:=(-1)^M*CharacteristicPolynomial[SetPrecision[Lpos,Ceiling[0.6*M]],x];
Δ[x_]:= Evaluate[2^M*pLpos[x]+2];
m[x_]:=If[Abs[Δ[x]]<=2,Δ[x],Sign[Δ[x]](2+2/Pi ArcCosh[Abs[Δ[x]]/2])];
λnpos=Eigenvalues[Lpos];
λnneg=Eigenvalues[Lneg];
λn=Sort[Join[λnpos,λnneg],Greater];
```

```
Jn=Table[2/Pi integral[ArcCosh[Abs[Δ[x]/2]]/.x-># &,{SetPrecision[λn[[2n+1]],Ceiling[0.6*M]],SetPrecision[λn[[2n]],Ceiling[0.6*M]],10}]/Re,{n,1,M-1}];
{Plot[{m[x],x=-2,x=2},{x,-1.5,+1.5},ImageSize->Large,PlotRange->{-1.95,-2.05},WorkingPrecision->Ceiling[0.6*M]],Jn}];
```

Catena con solitone

```
Toda5[M_,γ_,n0_,λ_]:=Block[{an,bn,Lpos,Lneg,Δ,m,λnpos,λnneg,λn},
an=SetPrecision[Table[1/2Sqrt[q+Sinh[γ]^2Sech[γ/2+γMod[(n-n0),M,-M/2]]^2],{n,1,M}],λ];
bn=SetPrecision[Table[Sinh[γ]^2/(Cosh[γ]+Cosh[2Mod[(n-n0),M,-M/2]*γ]),{n,1,M}],λ];
Lpos=SparseArray[{Band[{1,1}]->bn,Band[{1,2}]->an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]->an[[1;;M-1]],{1,M}->an[[M]],{M,1}->an[[M]]},{M,M}];
Lneg=SparseArray[{Band[{1,1}]->bn,Band[{1,2}]->an[[1;;M-1]],Band[{2,1}]->an[[1;;M-1]],{1,M}->-an[[M]],{M,1}->-an[[M]]},{M,M}];
Δ[x_]:=Evaluate[2+(-1)^M*CharacteristicPolynomial[SetPrecision[Lpos,λ],x]/Product[an[[n]],{n,1,M}]];
m[x_]:=If[Abs[Δ[x]]<=2,Δ[x],Sign[Δ[x]](2+2/Pi ArcCosh[Abs[Δ[x]]/2])];
λnpos=Eigenvalues[Lpos];
λnneg=Eigenvalues[Lneg];
λn=Sort[Join[λnpos,λnneg],Greater];
Jn=Table[2/Pi integral[ArcCosh[Abs[Δ[x]/2]]/.x-># &,{SetPrecision[λn[[2n+1]],λ],SetPrecision[λn[[2n]],λ]},10}]/Re,{n,1,M-1}];{Plot[m[x],{x,0,3},PlotRange->{-M-14,M+14},ImageSize->Large,WorkingPrecision->λ],Jn}];
```

Bibliografia

- [1] M. Toda, *Theory of nonlinear lattices*, Springer-Verlag, 1988.
- [2] J. Pasta, S. Ulam, E. Fermi, «Studies of non linear problems,» *Document LA-1940. Reprinted from Collected papers of Enrico Fermi*, vol. 2, pp. 977-988, 1965.
- [3] G. Benettin, *Introduzione ai sistemi dinamici*, lecture notes, 2001-2002.
- [4] M. Flaschka, «Canonically conjugate variables for the Korteweg-De Vries equation and the Toda lattice with periodic boundary conditions,» *Progress of theoretical physics*, pp. 438-456, 1975.
- [5] V. a. S. Manakov, «On the complete integrability of a nonlinear Schrödinger equation,» *Theoretical and Mathematical Physics*, pp. 551-559, 1974.
- [6] <http://en.wikipedia.org/>.
- [7] H. Flaschka, «The Toda Lattice. II. Existence of integrals,» *Physical Review B*, vol. 9, n. 4, pp. 1924-1925, 15 February 1974.
- [8] Henon, «Integrals of the Toda Lattice,» *Physical Review B*, vol. 9, pp. 1921-1923, 1974.
- [9] Ferguson, Flaschka, McLaughlin, «Nonlinear normal modes for the Toda chain,» *Journal of computational physics*, vol. 45, pp. 157-209, 1981.
- [10] M. Cecchetto, *Normal modes and actions in the Toda mode*, 2015.

Ringraziamenti

Questi tre anni di università sono forse stati i più belli della mia vita. Tra alti e bassi ho conosciuto un sacco di persone, fatto moltissime esperienze e studiato tante cose belle. Sono anche cambiato molto e non sono per niente la persona che ero tre anni fa quando mi sono iscritto. Sono stati anche anni duri per via dello stress e dell'impegno esagerato che ci ho messo, ma alla fine ce l'ho fatta e in definitiva sono stati anni molto belli nonostante le difficoltà.

Arrivato alla fine di questo percorso, mi sento di ringraziare innanzitutto i miei genitori che mi hanno sempre supportato spronandomi a fare ogni volta quello che più mi piaceva. Oltre a loro, il percorso sarebbe stato molto più difficile senza i miei amici di chimica, di fisica e di matematica, che mi hanno aiutato in moltissime cose che probabilmente neanche immagino. Ringrazio in particolare Francesco B, Gallio, Bolchi, Susie, Edoardo Zatti, Loris, Davide Casarotto, Edoardo Filippi, Anna Cusin, Vlady, Pier, Davide Pontarin. Poi ringrazio i miei ex coinquilini per la convivenza a padova e in particolare Tracu e Bruz. Ringrazio Caterina, senza la quale forse sarei andato fuori di testa al terzo anno. Ringrazio Nora e gli amici di teatro. Ringrazio gli amici della Bolivia e quelli dei CAI di camisano. Ringrazio il mio maestro Andrea Zanon per avermi fatto appassionare alla batteria col suo atteggiamento sempre pacato e rilassato. Ringrazio Albe e Matteo per le tante pizze insieme e per i saggi di fine anno. Ringrazio la dott. Schiarante per l'aiuto fornitomi e i proff. Giancarlo Benettin e Antonio Ponno per la disponibilità e la passione che mi hanno mostrato.

Spero di continuare insieme a voi questo lungo cammino che ho cominciato, verso un futuro sempre migliore e orizzonti sempre nuovi. Grazie di cuore,

Luca Biasiolo