



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Uno studio sulla conservazione degli invarianti
adiabatici in mappe simplettiche

Relatore

Prof. Massimiliano Guzzo

Laureando

Vittorio Cagioni

Anno Accademico 2021/2022

Abstract

La variazione degli invarianti adiabatici in sistemi hamiltoniani che simulano situazioni di scattering ripetute si può studiare con le tecniche moderne della teoria hamiltoniana delle perturbazioni. Il lavoro di tesi prevede una revisione di alcuni studi numerici effettuati a Padova negli anni '90 del secolo scorso, che hanno consentito il confronto fra le aspettative della teoria hamiltoniana rigorosa e l'approssimazione cosiddetta di Jeans-Landau-Teller, e la realizzazione di un esperimento numerico collegato in cui i sistemi hamiltoniani rappresentativi dello scattering sono sostituiti da opportune mappe simplettiche.

Indice

1	Introduzione	1
2	Richiami di teoria hamiltoniana delle perturbazioni	2
2.1	Sistemi integrabili	2
2.2	Sistemi quasi-integrabili	3
2.3	Passo perturbativo	4
2.4	Equazione fondamentale della teoria delle perturbazioni	5
2.5	Il teorema di Nekhoroshev	6
2.6	Invarianti adiabatici	7
3	Inquadramento del problema	7
3.1	Il modello fisico	7
3.2	Il modello matematico	8
3.3	Applicazione della teoria di Nekhoroshev	9
3.4	Approssimazione di Jeans-Landau-Teller	10
4	Teoria perturbativa nel modello di scattering	12
4.1	Riscaldamento dell'hamiltoniana	12
4.2	Procedimento perturbativo	13
5	Risultati numerici preliminari	15
6	Integrali primi migliorati	19
6.1	Sviluppo di Fourier della perturbazione	19
6.2	Applicazione del procedimento perturbativo	23
7	Verifica dell'approssimazione JLT	26
7.1	Considerazioni preliminari	26
7.2	Mappa simplettica	29
7.3	Verifica della JLT	30
8	Conclusioni	32

1 Introduzione

Scopo di questa tesi è rivedere parzialmente alcuni risultati ottenuti negli anni '90 all'università di Padova, riguardanti la conservazione di invarianti adiabatici in processi in cui un sistema interagisce in un tempo finito con un potenziale esterno. Lo scopo è di quantificare gli scambi di energia tra i diversi gradi di libertà del sistema; tale meccanismo è alla base di eventuali argomenti di equipartizione.

Gli studi principali che rivisiteremo sono [1] e [2], a opera dei professori G. Benettin, A. Carati e F. Fassò. In questi articoli si considera un problema modello, un processo di scattering tra le molecole di un gas, partendo da alcuni studi eseguiti da Boltzmann e Jeans tra la fine del 1800 e gli inizi del 1900. In particolare, dalle osservazioni sperimentali risultò evidente che il calore specifico a volume costante dei gas era in apparente contraddizione con le aspettative della meccanica statistica classica. Quest'ultima prevede infatti, grazie al teorema di equipartizione dell'energia, che ogni molecola porti al calore specifico un termine proporzionale al numero di gradi di libertà che contribuiscono all'energia della particella. I dati mostravano però che a temperature sufficientemente basse il computo teorico dei gradi di libertà era superiore a quello reale, come se alcuni gradi di libertà non partecipassero agli scambi di energia.

Tale fenomeno fu poi spiegato grazie alla meccanica quantistica e al "congelamento" dei gradi di libertà. Tuttavia, Boltzmann e Jeans studiarono il problema in modo completamente classico, arrivando a risultati sorprendenti: se le molecole ruotano con frequenza ω sufficientemente elevata, gli scambi di energia tra i gradi di libertà rotazionali e traslazionali sono esponenzialmente piccoli in ω , in modo da non soddisfare le ipotesi del teorema di equipartizione. Questa stima fu trovata anche successivamente da Landau e Teller studiando un fenomeno all'apparenza differente, ovvero la propagazione delle onde sonore nei gas.

Tali risultati vennero ottenuti in modo euristico sfruttando un'approssimazione a prima vista poco rigorosa, detta approssimazione di Jeans-Landau-Teller. L'idea è semplice: più rapidamente ruotano le molecole, più l'entità dell'interazione è minore. Allora, se il moto del sistema è rappresentato dal vettore $x(t)$ e gli scambi di energia sono del tipo:

$$\Delta E = \int_{-\infty}^{+\infty} F(x(t), t) dt$$

l'approssimazione di Jeans-Landau-Teller propone di rimpiazzare nell'integrale il moto reale del sistema $x(t)$ con il moto del sistema in cui le particelle non interagiscono (si tratta di un "calcolo lungo le orbite imperturbate", come viene chiamato in [1]). Ciò consente di valutare ΔE in modo esplicito, e mostra che il suo andamento in funzione di ω in scala semi-logaritmica ha la forma di una linea spezzata, in cui i vari segmenti si raccordano in modo liscio. Come anche evidenziato da [1] e [2], le proprietà di ΔE dipenderanno fortemente dalle caratteristiche aritmetiche dei dati iniziali.

Tale metodo costituisce una forte approssimazione, che deve essere giustificata con argomenti matematici o con esperimenti. In particolare, in [1] e [2] l'approssimazione viene messa a confronto con i risultati numerici fino a ordini di $\Delta E \approx 10^{-25}$, trovando un eccellente accordo. Tali esperimenti sono stati eseguiti usando l'algoritmo "leapfrog" e la precisione quadrupla, come viene ben evidenziato in [2], ove si pone particolare attenzione agli strumenti utilizzati per integrare le equazioni differenziali in gioco, analizzando l'errore sperimentale e la differenza tra integratori symplettici e non symplettici.

Un altro punto di interesse è la possibilità di giustificare l'approssimazione di Jeans-Landau-

Teller mediante argomenti matematici, relativi alla moderna teoria hamiltoniana delle perturbazioni. Questo è stato fatto per esempio in [6], nel caso particolare in cui il sistema sia isocrono; non sono note invece dimostrazioni rigorose nel caso più generale, come quello che esamineremo.

Vi è comunque la possibilità di impiegare la teoria di Nekhoroshev per ottenere dei maggioranti sugli scambi di energia. Tuttavia, la grande forza dell'approssimazione di Jeans-Landau-Teller risiede nel dare un'espressione esplicita per le componenti di Fourier di ΔE in funzione di ω , rendendo evidente la decrescita esponenziale e il fatto che esse hanno ordini di grandezza molto diversi al variare di ω .

La struttura della tesi è la seguente: dapprima, richiameremo alcune nozioni fondamentali di teoria relative ai sistemi integrabili e quasi-integrabili, e alla teoria classica delle perturbazioni. In secondo luogo procederemo a descrivere nel dettaglio il problema, richiamandone il significato fisico e dandone un semplificato ma sostanziale modello matematico tramite l'hamiltoniana H , sulla scia di quanto fatto in [1] e [2]. Poi, mostreremo come riformulare il problema per poter applicare i risultati della teoria delle perturbazioni al caso in esame. Si passerà quindi agli esperimenti numerici, mostrando alcuni risultati preliminari per quanto concerne il controllo della precisione e dell'errore; dopodiché mostreremo tramite gli esperimenti come sia possibile impiegare l'approccio perturbativo per ottenere una maggiore stabilità per le variabili del sistema. Infine, faremo alcuni studi più strettamente legati all'approssimazione di Jeans-Landau-Teller, discutendo la possibilità di impiegare delle speciali trasformazioni, le mappe simplettiche, per ottenere informazioni sul sistema.

2 Richiami di teoria hamiltoniana delle perturbazioni

Prima di inquadrare il problema che costituirà il principale oggetto di studio, è bene richiamare alcune basilari nozioni della teoria hamiltoniana delle perturbazioni.

2.1 Sistemi integrabili

Il punto di partenza nello studio dei sistemi perturbati è un'hamiltoniana integrabile nel senso di Liouville-Arnold, ovvero un'hamiltoniana che mediante opportune trasformazioni canoniche si possa scrivere unicamente in funzione di variabili che siano integrali primi del sistema. Si dà quindi la seguente definizione:

Definizione (variabili di azione-angolo). *Si consideri un sistema hamiltoniano a n gradi di libertà di hamiltoniana $H : D \rightarrow \mathbb{R}$, con $D \subseteq \mathbb{R}^{2n}$ aperto e munito delle variabili canoniche (q,p) . Si supponga che esistano un aperto $D' \subseteq D$ invariante per il flusso del sistema, un aperto A di \mathbb{R}^n e una trasformazione canonica*

$$C : D' \rightarrow A \times \mathbb{T}^n$$

$$(q, p) \rightarrow C(q, p) = (I, \varphi)$$

tali che l'hamiltoniana coniugata dalla trasformazione dipenda dalle sole variabili I . In tal caso, (I, φ) , sono dette variabili di azione-angolo e l'insieme $A \times \mathbb{T}^n$, dotato della 2-forma differenziale $\sum_{i=1}^n d\varphi_i \wedge dI_i$, assume la struttura di varietà simplettica.

Si enuncia quindi di seguito il teorema di Liouville-Arnold, che fornisce una condizione necessaria e sufficiente affinché un'hamiltoniana ammetta variabili di azione-angolo.

Teorema (di Liouville-Arnold). *Si consideri un sistema di hamiltoniana $H : D \rightarrow \mathbb{R}$, D aperto di \mathbb{R}^{2n} munito delle variabili canoniche (q,p) . Si supponga che tale sistema ammetta n integrali primi F_1, \dots, F_n funzionalmente indipendenti in involuzione rispetto alle parentesi di Poisson, ovvero $\{F_i, F_j\} = 0 \quad \forall i, j$, e che esista $\hat{f} \in \mathbb{R}^n$ tale che la varietà di livello:*

$$M_{\hat{f}} = \{(q, p) \in D : F_1(q, p) = \hat{f}_1, \dots, F_n(q, p) = \hat{f}_n\}$$

sia compatta e connessa. Allora $M_{\hat{f}}$ è diffeomorfa al toro \mathbb{T}^n ed esistono un intorno B di \hat{f} , un aperto $A \subseteq \mathbb{R}^n$ e una trasformazione canonica $C : \bigcup_{f \in B} M_f \rightarrow A \times \mathbb{T}^n$ tali per cui $(I, \varphi) = C(q, p)$ siano variabili di azione-angolo per H .

2.2 Sistemi quasi-integrabili

Le variabili di azione-angolo (I, φ) sono le coordinate naturali per analizzare i sistemi quasi-integrabili, in cui l'hamiltoniana si può scrivere nella forma:

$$H(I, \varphi) = H_0(I) + \varepsilon V(I, \varphi, \varepsilon).$$

Il primo addendo rappresenta il sistema imperturbato, che risulta essere evidentemente integrabile alla Liouville-Arnold; il secondo è invece la perturbazione, dipendente dal parametro ε definito in un intorno di $\varepsilon = 0$. Tale parametro potrebbe essere sia positivo che negativo, a seconda della natura fisica del problema; in seguito verrà considerato positivo.

La perturbazione è una funzione $V : A \times \mathbb{T}^n \rightarrow \mathbb{R}$, e pertanto, se è sufficientemente regolare, ammette lo sviluppo in serie di Fourier:

$$V(I, \varphi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} V_k(I) e^{ik \cdot \varphi}, \quad \text{ove} \quad V_k(I) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} V(I, \varphi) e^{-ik \cdot \varphi} d\varphi_1 \dots d\varphi_n$$

Il modo in cui decadono i coefficienti all'aumentare di $|k|_1 = \sum_{i=1}^n |k_i|$ dipende dalla regolarità della perturbazione. Essa in effetti potrebbe a priori avere una forma qualsiasi; il caso di maggior interesse, oltre che quello più comune nelle applicazioni fisiche, è però quello in cui sia H_0 che V sono analitiche in un intorno complesso dell'insieme $A \times \mathbb{T}^n$.

In questo contesto, fissate due costanti positive ρ e σ , si definiscono gli insiemi:

$$A_\rho = \bigcup_{I \in A} \Delta_\rho(I) \quad \Delta_\rho(I) = \{I' \in \mathbb{C}^n : \|I' - I\| < \rho\}$$

$$\mathbb{T}_\sigma^n = \{\varphi \in \mathbb{C}^n : \operatorname{Re}(\varphi) \in \mathbb{T}^n, |\operatorname{Im}(\varphi_j)| < \sigma \quad \forall j\}$$

Le due funzioni H_0 e V saranno supposte analitiche in $E := \overline{A_\rho} \times \overline{\mathbb{T}_\sigma^n}$; in questo modo, non solo esse saranno limitate, ma verrà garantito che le componenti di Fourier di V decadano esponenzialmente in $|k|_1$. Definiamo:

$$\|V\|_{\rho, \sigma} = \sup_{(I, \varphi) \in E} |V(I, \varphi)|, \quad \|V_k\|_\rho = \sup_{I \in \overline{A_\rho}} |V_k(I)|$$

Per funzioni analitiche, vale la stima:

$$\|V_k\|_\rho \leq \|V\|_{\rho, \sigma} e^{-|k|_1 \sigma}$$

e viceversa, una serie le cui componenti di Fourier sono limitate da una stima del tipo $\|V_k\|_\rho \leq L e^{-|k|1^\sigma}$ definisce una funzione analitica. D'ora in avanti le funzioni usate soddisferanno sempre questa condizione.

2.3 Passo perturbativo

Uno degli aspetti fondamentali della teoria perturbativa è capire di quanto le soluzioni del sistema quasi-integrabile si discostano dalle soluzioni del sistema imperturbato: per quanto piccolo possa essere ε non è difatti per nulla scontato che le orbite del sistema completo si tengano "vicine" alla dinamica originaria. Per tempi brevi, però, si possono fornire dei limiti alla variazione delle variabili.

Concentriamoci sul moto delle variabili di azione, che sono le uniche di reale interesse per quanto verrà discusso. Nelle ipotesi precedentemente fatte, la perturbazione V ha sup-norma limitata; inoltre, essendo analitica, anche le sue derivate hanno sup-norma limitata. Quindi esisterà $M > 0$ tale che $\left\| \frac{\partial V}{\partial \varphi} \right\| \leq M \quad \forall (I, \varphi) \in E$.

Si fissi allora un dato iniziale $I(t_0)$ per le azioni; la sua variazione nel tempo soddisfa con evidenza:

$$\|I(t) - I(t_0)\| = \left\| - \int_{t_0}^t \varepsilon \frac{\partial V}{\partial \varphi}(I(\tau), \varphi(\tau)) d\tau \right\| \leq M \varepsilon |\Delta t|$$

Questo implica in particolare che per tempi minori di $1/\varepsilon$ la dinamica del sistema completo non differirà sensibilmente da quella integrabile. Per tempi più lunghi diventa tuttavia più difficile ottenere informazioni. Un'idea classica per ottenere delle stime migliorate sulla variazione delle azioni è cercare una trasformazione canonica C prossima all'identità, detta passo perturbativo, che coniughi l'hamiltoniana H a un'hamiltoniana

$$H^{(1)}(I^{(1)}, \varphi^{(1)}) = H_0(I^{(1)}) + \varepsilon U(I^{(1)}) + \varepsilon^2 V^{(1)}(I^{(1)}, \varphi^{(1)})$$

in modo che la dipendenza dagli angoli scompaia al primo ordine e permetta di ottenere un intervallo di tempo più lungo in cui le azioni sono vicine al valore iniziale.

Uno dei metodi possibili per ottenere questo risultato è il metodo di Lie. Le variabili (I, φ) sono coniugate a delle variabili $(I^{(1)}, \varphi^{(1)})$ mediante il flusso hamiltoniano di una opportuna funzione χ , detta funzione generatrice, in modo che risulti:

$$(I, \varphi) = \Phi_\chi^\varepsilon(I^{(1)}, \varphi^{(1)})$$

In questo modo, la trasformazione è canonica (perché il flusso hamiltoniano lo è), ed è prossima all'identità.

L'hamiltoniana $H^{(1)}$ coniugata a H da tale trasformazione, nell'ipotesi di piccoli valori di ε , è sviluppabile in serie di Taylor con parametro ε :

$$H^{(1)}(I^{(1)}, \varphi^{(1)}) = H \circ \Phi_\chi^\varepsilon(I^{(1)}, \varphi^{(1)}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \frac{d^n}{d\tau^n} H(I(\tau), \varphi(\tau))|_{\tau=0}$$

ove $(I(\tau), \varphi(\tau))$ è l'orbita del flusso $\Phi_\chi(I^{(1)}, \varphi^{(1)})$ al tempo τ . L'n-esimo termine della serie è quindi proporzionale a

$$\frac{d^n}{d\tau^n} H(I(\tau), \varphi(\tau))|_{\tau=0} = \underbrace{\{ \{ \dots \{ H, \chi \}, \chi \}, \dots, \chi \}}_{n \text{ volte}}(I^{(1)}, \varphi^{(1)})$$

che rappresenta l'applicazione n-esima della derivata di Lie di H rispetto al flusso generato da χ .
La trasformazione di variabili soddisfa invece:

$$I = I^{(1)} - \varepsilon \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} (I^{(1)}, \varphi^{(1)}) + O(\varepsilon^2)$$

$$\varphi = \varphi^{(1)} + \varepsilon \frac{\partial \chi}{\partial I} (I^{(1)}, \varphi^{(1)}) + O(\varepsilon^2)$$

L'hamiltoniana coniugata assume di conseguenza la seguente forma:

$$H^{(1)}(I^{(1)}, \varphi^{(1)}) = H_0(I^{(1)}) + \varepsilon (\{H_0, \chi\} (I^{(1)}, \varphi^{(1)}) + V(I^{(1)}, \varphi^{(1)})) + O(\varepsilon^2).$$

2.4 Equazione fondamentale della teoria delle perturbazioni

Per spostare la dipendenza dagli angoli a ordini successivi in ε è necessario che il contenuto della parentesi eguagli una funzione indipendente dagli angoli. Posto $\omega(I) := \nabla_I H_0$ si arriva alla cosiddetta equazione fondamentale della teoria delle perturbazioni:

$$-\omega(I) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \varphi} (I, \varphi) + V(I, \varphi) = U(I) \quad (1)$$

Per risolverla, è opportuno sviluppare i vari termini in serie di Fourier. Si assume pertanto che χ sia abbastanza regolare da potersi scrivere come:

$$\chi = \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} \chi_k(I) e^{ik \cdot \varphi};$$

questa assunzione dovrà poi essere giustificata a posteriori.

Per $k = 0$, si trova che $U(I) = V_0(I)$. Per $k \neq 0$ si ricava invece:

$$(ik \cdot \omega(I)) \chi_k = V_k(I) \rightarrow \chi_k = \frac{V_k(I)}{ik \cdot \omega(I)}.$$

Affinché la funzione generatrice esista e sia regolare, bisognerà escludere dall'aperto A tutte le varietà risonanti $R_k = \{I \in A : k \cdot \omega(I) = 0\}$ e alcuni loro intorni che potrebbero impedire la convergenza della serie di Fourier. In ciò consiste il problema dei cosiddetti "piccoli divisori", che costituisce il principale ostacolo al passo perturbativo. La possibilità di soddisfare questa condizione è infatti vincolata a ipotesi piuttosto forti sulla perturbazione (per esempio, che sia a spettro finito) o sull'hamiltoniana H_0 (per esempio, che sia isocrona). Per sistemi più generali sono stati sviluppati argomenti alternativi, che hanno condotto alla teoria KAM e di Nekhoroshev.

L'hamiltoniana ottenuta grazie a χ può essere ulteriormente migliorata tramite passi perturbativi successivi. Si può cioè definire una seconda trasformazione canonica che sposti la dipendenza dagli angoli a ordine 3, così che si ottenga:

$$H^{(2)}(I^{(2)}, \varphi^{(2)}) = H_0(I^{(2)}) + \varepsilon U^{(2)}(I^{(2)}) + \varepsilon^3 V^{(2)}(I^{(2)}, \varphi^{(2)})$$

e questa trasformazione canonica, al pari del primo ordine, non è altro che il flusso di una seconda funzione generatrice:

$$(I^{(1)}, \varphi^{(1)}) = \Phi_{\chi^{(2)}}^{\varepsilon^2}(I^{(2)}, \varphi^{(2)}).$$

Questo procedimento può essere iterato a ordini arbitrari tramite un metodo di convergenza quadratico, con il caveat di scegliere le azioni fuori da tutti gli insiemi risonanti: è questa l'idea alla base del teorema KAM. Nella ricerca di integrali primi, più avanti, ci serviremo di funzioni generatrici, e quindi è essenziale scegliere speciali valori delle azioni. Considereremo sempre approssimazioni finite di serie di Fourier infinite, in modo tale che le risonanze da evitare siano in numero finito.

2.5 Il teorema di Nekhoroshev

Un altro risultato fondamentale nell'ambito della teoria perturbativa è il teorema di Nekhoroshev, che ha dirette implicazioni col problema che studieremo in seguito. Prima di enunciarlo è però necessario dare la seguente definizione:

Definizione (convessità e quasi-convessità). *Si consideri una funzione $F : A \rightarrow \mathbb{R}$, A aperto di \mathbb{R}^n , e si denoti con $F''(I)$ la sua matrice hessiana. La funzione F si dice convessa in A se esiste $m > 0$ tale che sia*

$$|F''(I)v \cdot v| > m \|v\|^2 \quad \forall v \in \mathbb{R}^n / \{0\}, \forall I \in A.$$

La funzione F si dice quasi convessa se il sistema di due equazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial I}(I) \cdot v = 0 \\ F''(I)v \cdot v = 0 \end{cases}$$

ammette come unica soluzione $v = 0 \quad \forall I \in A$. Con evidenza una funzione convessa è anche quasi-convessa.

Si osservi che questa definizione di convessità è da intendere in senso diverso rispetto a quello geometrico, visto che le funzioni $x^2 + y^2$ e $-x^2 - y^2$ sono entrambe convesse con la definizione appena data.

Il teorema di Nekhoroshev ammette numerose formulazioni, le più generali delle quali hanno come ipotesi che l'hamiltoniana sia "steep". Questo tecnicismo però è ben al di là dei nostri scopi, dunque si sacrificherà parte della generalità per favorire la semplicità di esposizione: ciò è possibile perché la classe più semplice delle funzioni steep è costituita dalle funzioni quasi-convesse. La seguente formulazione del teorema è analoga a quanto si può trovare in [5].

Teorema (di Nekhoroshev). *Si consideri un'hamiltoniana quasi-integrabile $H(I, \varphi) = H_0(I) + \varepsilon V(I, \varphi)$ definita e analitica in un intorno complesso di $A \times \mathbb{T}^n$, e si supponga che H_0 sia quasi-convessa in A . Allora esistono delle costanti positive $\varepsilon^*, a, b, c, d$ tali che, se $|\varepsilon| < \varepsilon^*$, per ogni soluzione delle equazioni di Hamilton $(I(t), \varphi(t))$ con dato iniziale in $A \times \mathbb{T}^n$ si ha:*

$$\|I(t) - I(0)\| \leq c\varepsilon^a$$

per ogni tempo t tale che:

$$|t| \leq d \exp\left(\frac{\varepsilon^*}{\varepsilon}\right)^b.$$

Una possibile scelta delle costanti è $a = b = \frac{1}{2n}$.

Il teorema di Nekhoroshev è uno strumento alquanto potente: in primo luogo si osservi che, a differenza del teorema KAM, le stime del teorema di Nekhoroshev valgono per tutti i dati iniziali, compresi quelli negli insiemi risonanti. In secondo luogo, benché i tempi di stabilità non siano

infiniti, essi crescono molto velocemente al decrescere di ε , il che fa sì che in molte situazioni fisiche la stabilità sia addirittura più lunga dell'età dell'Universo.

2.6 Invarianti adiabatici

L'ultima nozione che è necessario introdurre è quella di invariante adiabatico. È un concetto più fisico che matematico, e darne una definizione rigorosa è tutt'altro che semplice. Intuitivamente, consideriamo un sistema di hamiltoniana $H(q, p, \eta)$, ove η è un parametro. Supponiamo che η vari nel tempo in modo "lento" rispetto a quanto variano le coordinate del sistema nella situazione in cui η è fissato al suo valore iniziale. Gli invarianti adiabatici sono quelle grandezze che, in seguito alla variazione lenta di η , cambiano "arbitrariamente poco". Un tentativo di formalizzare quest'idea è dovuto ad Arnold in [4]:

Definizione (invariante adiabatico). *Si consideri un sistema hamiltoniano a n gradi di libertà di hamiltoniana $H(q, p, \eta)$, ove η varia secondo la legge $\eta = \varepsilon t$, con ε sufficientemente piccolo. Una grandezza $I(q, p, \eta)$ è detta invariante adiabatico del sistema hamiltoniano se per ogni $\delta > 0$ esiste un $\varepsilon_0 > 0$ tale che, se $\varepsilon < \varepsilon_0$, $0 < t < 1/\varepsilon$, vale:*

$$\|I(q(t), p(t), \varepsilon t) - I(q(0), p(0), 0)\| < \delta.$$

Grazie al teorema di Nekhoroshev si giustificano tempi di stabilità esponenzialmente lunghi per gli invarianti adiabatici.

3 Inquadramento del problema

3.1 Il modello fisico

Ora che abbiamo richiamato alcuni risultati fondamentali, possiamo procedere a enucleare il problema. Il modello a cui facciamo riferimento è quello del gas ideale, pensato come un insieme di un numero molto grande di molecole indistinguibili, le cui interazioni avvengono a distanza ridotta, di dimensioni confrontabili col raggio delle molecole.

Se T è la temperatura assoluta del gas, la meccanica statistica prevede, grazie al teorema di equipartizione dell'energia, che ciascun grado di libertà quadratico dell'hamiltoniana totale del sistema porti con sé un contributo all'energia interna del gas pari a $k_B T/2$, e quindi un contributo $k_B/2$ al calore specifico a volume costante $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$. L'idea di equipartizione richiede che i vari gradi di libertà del sistema si scambino reciprocamente energia a seguito delle collisioni e interazioni finché tutti non hanno raggiunto il medesimo valore.

Quello che sperimentalmente si osserva è però che C_V dipende dalla temperatura, e che in particolare a temperature basse il calore specifico per la singola molecola viola apparentemente il teorema di equipartizione; questo accade perché i gradi di libertà rotazionali e vibrazionali non danno alcun contributo termodinamico all'energia interna.

Una spiegazione di questo fatto nasce dalla meccanica quantistica: ciò che succede è che i gradi di libertà rotazionali e vibrazionali sono quantizzati e, se l'energia termica è inferiore alla spaziatura dei livelli energetici, essi risultano "congelati" e non prendono parte agli scambi energetici del sistema.

Tuttavia, il fenomeno ammette anche una spiegazione di natura completamente classica, introdotta da Boltzmann e Jeans in [7] e [8] prima dell'avvento delle teorie quantistiche. L'idea

soggiacente è che i gradi di libertà rotazionali e vibrazionali a basse temperature siano abbastanza veloci da scambiare in una singola collisione un'energia estremamente ridotta con i gradi di libertà traslazionali. La conseguenza è che per portare l'energia vibrazionale e rotazionale al valore atteso di $k_B T/2$ servirebbe un numero enorme di collisioni, ovvero un tempo praticamente infinito rispetto a quanto si osserva su scala sperimentale. In particolare, nel caso di una sola frequenza ω ci si attende mediante considerazioni euristiche che lo scambio di energia ΔE mediato sugli angoli iniziali φ^0 sia esponenzialmente piccolo al crescere della frequenza:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \Delta E(\varphi^0) d\varphi^0 \sim e^{-\frac{\omega}{\omega_0}} \quad (2)$$

Si tratta quindi di un problema di invarianza adiabatica, dato che l'energia rotazionale cambia "arbitrariamente poco" a seguito dell'interazione rispetto al caso in cui la particella è libera, almeno per grandi frequenze. Un risultato analogo fu trovato da Landau e Teller in [9] analizzando la dispersione delle onde sonore nei gas mediante un'idea simile a quella di Jeans. Questa impostazione euristica, che analizzeremo meglio in seguito, consiste nel calcolare gli integrali coinvolti in ΔE approssimando il moto reale del sistema con quello che si otterrebbe nel caso di molecole non interagenti: ciò permette il calcolo esplicito degli integrali e quindi una stima di ΔE . Tale idea è stata resa rigorosa in tempi recenti da alcuni studi, come per esempio accennato in [1] e mostrato più compiutamente in [6].

Lo scopo della seguente trattazione è quindi ripercorrere questa intuizione in un semplice modello di urto, al fine di misurare le variazioni di energia dei gradi di libertà interni alle molecole.

3.2 Il modello matematico

L'urto di una molecola di un gas potrebbe avvenire contro la parete del recipiente oppure contro una seconda molecola. Prenderemo in esame quest'ultimo caso, visto che consente di avere a che fare con due frequenze indipendenti e rende il problema più fisicamente interessante, seguendo l'impostazione presentata in [1] e [2].

L'hamiltoniana del problema dovrà essere abbastanza semplice da evitare eccessive complicazioni matematiche, ma al contempo dovrà presentare tutte le caratteristiche necessarie a riprodurre il processo delineato da Boltzmann. La prima ragionevole approssimazione consiste nell'adottare un modello bidimensionale, il che consente di usare una sola coordinata angolare per ogni molecola; in secondo luogo, ignoreremo del tutto il moto vibrazionale. Con queste assunzioni, l'hamiltoniana si presenterà nella forma:

$$H(I_1, I_2, p_1, p_2, \varphi_1, \varphi_2, r_1, r_2) = \frac{I_1^2}{2\Lambda} + \frac{I_2^2}{2\Lambda} + \frac{p_1^2}{2\mu} + \frac{p_2^2}{2\mu} + V(\|r\|, \varphi_1, \varphi_2)$$

ove I_1 e I_2 sono i momenti angolari delle molecole, r è il vettore che congiunge i centri di massa, p è il momento coniugato a r , Λ è il momento di inerzia delle due molecole e μ la massa ridotta.

L'assunzione di interazioni a corto raggio porta alla naturale richiesta che:

$$\lim_{\|r\| \rightarrow \infty} V(\|r\|, \varphi_1, \varphi_2) = 0.$$

Ciò ci consente di introdurre un'ulteriore semplificazione nell'hamiltoniana. Supponendo infatti che le due molecole siano infinitamente lontane per $t \rightarrow \pm\infty$ e che l'interazione sia significativa solo per tempi in un intorno dello zero, la parte traslazionale dell'hamiltoniana può essere rimpiazzata da

un potenziale dipendente esplicitamente dal tempo e dagli angoli, eliminando così il vettore r e il rispettivo momento coniugato. L'hamiltoniana che studieremo si presenta infine nella forma:

$$H = \frac{I_1^2}{2\Lambda} + \frac{I_2^2}{2\Lambda} + f(t)g(\varphi_1, \varphi_2). \quad (3)$$

In particolare, supporremo che f decada a 0 in modo integrabile per $t \rightarrow \pm\infty$ e che sia analitica in una striscia nel piano complesso del tipo $|\operatorname{Im}(t)| < \tau$, $\tau > 0$, e che g sia analitica in \mathbb{T}_σ^2 . La funzione f che verrà normalmente considerata d'ora in poi è $f(t) = \frac{e^{-t^2}}{t^2 + \tau^2}$, mentre non diamo per ora una forma esplicita di g , salvo tramite la sua rappresentazione di Fourier $g(\varphi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} g_k e^{ik \cdot \varphi}$; per garantire la massima generalità assumeremo serie di Fourier infinite (escludendo quindi a priori polinomi trigonometrici).

Per quanto riguarda i dati iniziali del problema, detta $\omega := \nabla_I H$ porremo:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow -\infty} I(t) &= I^0 = \lambda \Lambda \Omega, & \lim_{t \rightarrow -\infty} \omega(t) &= \lambda \Omega \\ \lim_{t \rightarrow -\infty} \varphi(t) - \lambda \Omega t &= \varphi^0 \end{aligned}$$

λ è un parametro da pensarsi grande, visto che ciò determina l'invarianza adiabatica del sistema, mentre $\Omega \in \mathbb{R}^2$ è un vettore dalle cui proprietà aritmetiche dipende la dinamica dei rotatori. È dunque chiaro che il problema ha una struttura quasi-integrabile, che verrà meglio evidenziata in seguito.

La grandezza che vogliamo studiare nei prossimi paragrafi è $\Delta I = \lim_{t \rightarrow +\infty} (I_1(t) - I_1^0, I_2(t) - I_2^0)$, in particolare il suo massimo al variare degli angoli iniziali $\overline{\Delta I} = \max_{\varphi_0 \in \mathbb{T}^2} \|\Delta I(\varphi^0)\|$, che risulta essere un invariante adiabatico del sistema.

3.3 Applicazione della teoria di Nekhoroshev

Un primo tentativo per capire l'andamento asintotico di $\overline{\Delta I}$ è applicare i risultati della teoria perturbativa al sistema hamiltoniano in esame, cosa che è possibile interpretando $1/\lambda$ come il parametro piccolo ε che compare nel teorema di Nekhoroshev. La stima migliore che si può ottenere è riassunta nella seguente proposizione, che viene esposta in [1]:

Proposizione. *Si consideri l'hamiltoniana $H = \sum_{i=1}^n \frac{I_i^2}{2\Lambda} + f(t)g(\varphi)$, con le assunzioni precedentemente fatte su f, g e sui dati iniziali; si assuma che Ω sia diofanteo e si ponga $\varepsilon = 1/\lambda$. Allora esistono:*

- una funzione $f^{(1)}$ limitata e modulo-integrabile su \mathbb{R} ;
- degli intorni $D, D' \subseteq A$ di I^0 ;
- due funzioni $F : D' \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ e $G : D' \times \mathbb{T}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, limitate e analitiche nei rispettivi domini;
- una trasformazione canonica prossima all'identità dipendente dal tempo:

$$\begin{aligned} C : D \times \mathbb{T}^n \times \mathbb{R} &\rightarrow D' \times \mathbb{T}^n \\ (I, \varphi, t) &\rightarrow (I', \varphi'), \end{aligned}$$

con $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} C(I, \varphi, t) = (I, \varphi)$;

tali che l'hamiltoniana coniugata ad H dalla trasformazione abbia la forma:

$$H^{(1)}(I', \varphi', t) = \sum_{i=1}^n \frac{I'^2}{2\Lambda} + f^{(1)}(t)F(I', t, \varepsilon) + e^{-\left(\frac{\alpha}{\varepsilon}\right)^\beta} f^{(1)}(t)G(I', \varphi', t, \varepsilon) \quad (4)$$

ove $\alpha, \beta > 0$. Nel caso in cui $n = 2$ e $\Omega = (1, \theta)$, con θ irrazionale quadratico, si può scegliere $\beta = 1/2$.

Questa proposizione consente una stima immediata di $\|\Delta I\|$, utilizzando il fatto che la trasformazione canonica è l'identità per $t \rightarrow \pm\infty$. Denotando con Γ la sup-norma di $\frac{\partial G}{\partial \varphi}$ sul suo dominio abbiamo:

$$\|\Delta I\| = \left\| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{\alpha}{\varepsilon}\right)^\beta} f^{(1)}(t) \frac{\partial G}{\partial \varphi'}(I'(t), \varphi'(t), t) dt \right\| \leq \Gamma e^{-\left(\frac{\alpha}{\varepsilon}\right)^\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} |f^{(1)}(t)| dt \leq \text{const.} e^{-\left(\frac{\alpha}{\varepsilon}\right)^\beta}.$$

Tale stima rigorosa recupera in un certo senso l'andamento esponenziale trovato da Jeans per una singola frequenza, ma si limita a fornire un maggiorante per $\overline{\Delta I}$ e non il comportamento asintotico di tale quantità. In [1] e [2] viene fornita una rappresentazione di tale valore asintotico seguendo l'approssimazione euristica di JLT, che esporremo nella prossima sezione.

3.4 Approssimazione di Jeans-Landau-Teller

Il metodo proposto di seguito è stato concepito estendendo l'idea di Jeans, ed è comunemente conosciuto come "approssimazione di Jeans-Landau-Teller" (JLT d'ora in poi). Concentriamoci in particolare sul caso $n = 2$.

Come è stato mostrato nella precedente sezione, la variazione delle azioni è controllata da una quantità esponenzialmente piccola in $\sqrt{\lambda}$. L'idea quindi è che i moti del sistema completo si discostino poco da quelli del sistema integrabile. In questa ipotesi, nell'espressione per ΔI :

$$\Delta I = - \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \frac{\partial g}{\partial \varphi}(I(t), \varphi(t)) dt$$

è possibile sostituire il moto del sistema integrabile $I(t) = I^0, \varphi(t) = \varphi^0 + \lambda\Omega t$, ottenendo:

$$\Delta I \approx - \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \frac{\partial g}{\partial \varphi}(I^0, \varphi^0 + \lambda\Omega t) dt \quad (5)$$

Questa approssimazione consente il calcolo dell'integrale senza conoscere esplicitamente il moto del sistema completo. Si può immediatamente sviluppare ΔI in serie di Fourier di φ^0 :

$$\Delta I \approx - \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} ik g_k e^{ik \cdot (\varphi^0 + \lambda\Omega t)} dt = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} -ik g_k \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\lambda k \cdot \Omega t} dt \right) e^{ik \cdot \varphi^0}$$

L'integrale non è altro che la trasformata di Fourier della funzione f ; siccome f decade esponenzialmente nel tempo, anche la sua trasformata avrà un andamento simile. Con calcoli analoghi a quelli presentati in [1], si arriva all'espressione:

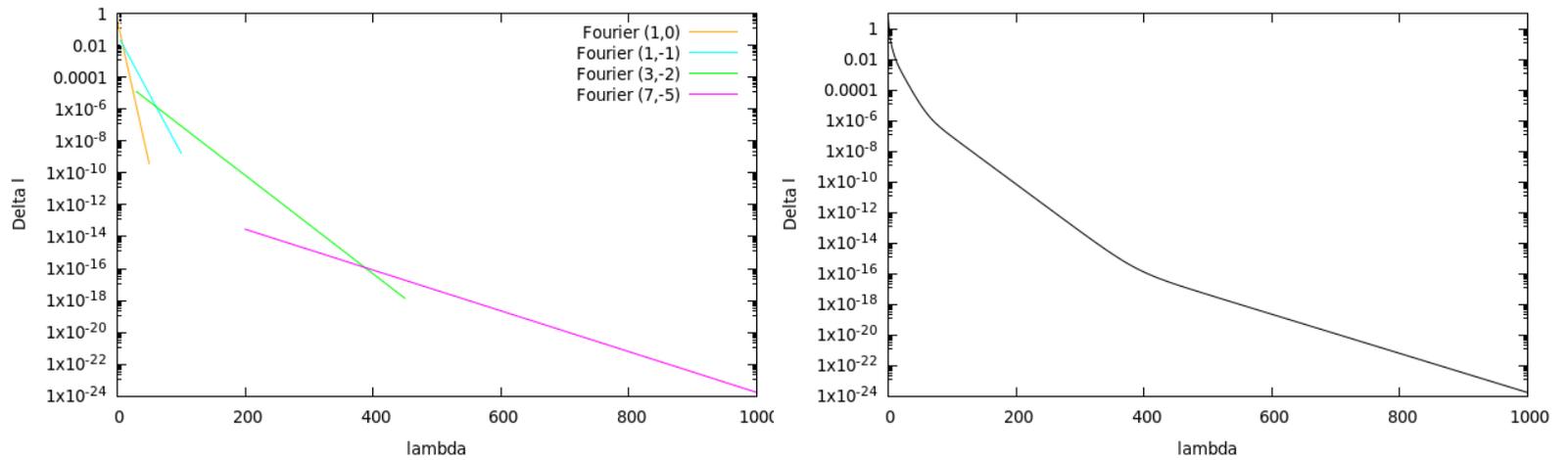
$$\Delta I \approx \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} I_k e^{ik \cdot \varphi^0}, \quad I_k \approx -ik C g_k e^{-\lambda\tau |k \cdot \Omega|} \quad (6)$$

Si osserva che i singoli coefficienti di Fourier danno un contributo significativamente diverso al crescere di λ . Infatti, la norma $\|I_k\|$ dei vari coefficienti decresce esponenzialmente in λ , col risultato che, per λ fissato, uno solo dei coefficienti della corrispondente serie reale di 6 ha norma abbastanza alta da contribuire apprezzabilmente a $\|\Delta I\|$, grazie al fatto che g è analitica e vale la stima $g_k \approx e^{-\sigma|k|_1}$; il coefficiente predominante dipende dalle proprietà aritmetiche di Ω (per una trattazione completa si veda [1]). Al variare di λ , la retta reale viene quindi suddivisa in intervalli del tipo $(a_l; b_l)$ all'interno dei quali la sup-norma della serie di Fourier è approssimativamente pari alla norma del coefficiente dominante. Potrebbero sorgere dei problemi negli intorni dei punti di raccordo, ma l'errore commesso sarà piccolo se λ è grande. Possiamo in realtà fare un'ulteriore approssimazione: siccome in ogni intervallo (a_l, b_l) domina la norma di un solo coefficiente di Fourier, anche sommando punto per punto tutte le norme $\|I_k\|$ ci aspettiamo che il ragionamento continui a essere valido. Prestando dunque attenzione al fatto che nel passaggio dalla serie complessa a quella reale la norma del coefficiente dominante va moltiplicata per due, si ha che:

$$\overline{\Delta I}(\lambda) \approx 2 \|I_l\| \quad \lambda \in (a_l; b_l)$$

$$\overline{\Delta I}(\lambda) \approx \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} \|I_k\| \quad \lambda \in \bigcup_l (a_l, b_l) \quad (7)$$

Per rendere più chiaro tutto questo discorso, serviamoci di un esempio concreto, tratto da [1]. Supponiamo che valga esattamente $g_k = e^{-\sigma|k|_1}$, e fissiamo $\sigma = \tau = 1$; la costante C è irrilevante, e anch'essa verrà posta uguale a 1; prendiamo poi $\Omega = (1, \sqrt{2})$. Nel grafico di sinistra mostriamo la norma del coefficiente dominante al variare di λ , nel grafico di destra sommiamo punto per punto le norme $\|I_k\|$ per un campione significativo di k ; adoperiamo la scala semi-logaritmica:



(a) $2\|I_l\|$ per i coefficienti dominanti

(b) $\sum_k \|I_k\|$ per k tale che $\max(|k_1|, |k_2|) \leq 20$

Figura 1: Approssimazione di Jeans-Landau-Teller

Effettivamente, la rapida decrescita dei coefficienti fa sì che la somma delle norme sia pressoché identica alla norma della componente dominante, a conferma del discorso appena esposto.

4 Teoria perturbativa nel modello di scattering

Dopo aver inquadrato il problema e i principali risultati associati, possiamo procedere a fare alcune analisi del sistema hamiltoniano in discussione. In particolare, ci concentreremo su due aspetti: il primo consiste nell'applicazione della teoria delle funzioni generatrici per la ricerca di variabili di azione migliorate, al fine di capire in che modo differiscano da quelle originarie; il secondo è invece una riproduzione parziale degli esperimenti numerici che consentono di stabilire la validità dell'approssimazione JLT. Seguendo gli articoli [1] e [2], l'hamiltoniana da cui partiremo è:

$$H = \frac{I_1^2}{2\Lambda} + \frac{I_2^2}{2\Lambda} + f(t)g(\varphi_1, \varphi_2)$$

Per semplificare il problema porremo $\Lambda = 1$, il che è sempre possibile con una trasformazione canonica con valenza diversa da uno. La funzione f è quella definita in precedenza, e prenderemo $\tau = 1$ in tutta la discussione degli integrali primi; per g considereremo:

$$g = \frac{1}{\cos(\varphi_1) + \cos(\varphi_2) + A}$$

Se $A > 2$ questa funzione è chiaramente analitica in un intorno complesso del toro; inoltre, è una funzione particolarmente comoda per i calcoli perché è pari in entrambe le variabili, e questo semplifica notevolmente l'espressione della serie di Fourier. Quando non diversamente specificato, prenderemo $A = 4$.

4.1 Riscaldamento dell'hamiltoniana

Il problema fin qui esposto rappresentava il comportamento di rotatori veloci, descritti in termini di un parametro λ da pensarsi grande. Per poter applicare i risultati classici della teoria delle perturbazioni è però più conveniente rappresentare l'hamiltoniana nella forma $H = H_0(I) + \varepsilon V(I, \varphi, \varepsilon)$, con ε piccolo. Questo è possibile mediante un riscaldamento del tempo e delle variabili di azione:

$$s = \lambda t, J = \frac{I}{\lambda}$$

Le derivate temporali delle variabili $(J_1, J_2, \varphi_1, \varphi_2)$ nelle nuove coordinate soddisfano le equazioni:

$$\frac{d\varphi}{ds} = \frac{d\varphi}{dt} \frac{dt}{ds} = \frac{\partial H}{\partial I} \frac{1}{\lambda} = \frac{I}{\lambda} = J = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial J}$$

$$\frac{dJ}{ds} = \frac{1}{\lambda^2} \frac{dI}{dt} = -\frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial H}{\partial \varphi} = -\frac{1}{\lambda^2} f(t) \frac{\partial g}{\partial \varphi} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \varphi}$$

che sono con evidenza le equazioni di Hamilton dell'hamiltoniana \tilde{H} :

$$\tilde{H} = \frac{J_1^2}{2} + \frac{J_2^2}{2} + \frac{1}{\lambda^2} f\left(\frac{s}{\lambda}\right) g(\varphi_1, \varphi_2).$$

D'ora in poi, per semplicità di notazione, si denoterà H questa nuova hamiltoniana, e si rinominerà $s \rightarrow t$. L'hamiltoniana così trovata ha la struttura quasi-integrabile cercata con $\varepsilon = \frac{1}{\lambda^2}$. Si trova quindi la forma voluta:

$$H = \frac{J_1^2}{2} + \frac{J_2^2}{2} + \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon}t) g(\varphi_1, \varphi_2).$$

L'ultima accortezza riguarda il fatto che l'hamiltoniana qui scritta dipende esplicitamente dal tempo, mentre sarà utile in seguito studiare il caso autonomo. Per ovviare a questo problema è sufficiente estendere lo spazio delle fasi da $A \times \mathbb{T}^2$ a $A \times \mathbb{R} \times \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}$, introducendo una variabile q che sostituisce il tempo e il suo momento coniugato p . In definitiva, l'hamiltoniana del problema è:

$$H = \frac{J_1^2}{2} + \frac{J_2^2}{2} + p + \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon}q)g(\varphi_1, \varphi_2).$$

In seguito si indicherà con H_0 la parte integrabile dell'hamiltoniana, dipendente dalle sole variabili di azione e dal momento p , e con V la perturbazione.

4.2 Procedimento perturbativo

Per evidenziare la presenza di invarianti adiabatici, è ora utile cercare una trasformazione canonica che coniughi H a un'hamiltoniana in cui la dipendenza dalle variabili angolari sia spostata a termini che dipendono da potenze di ε di ordine superiore al primo: per farlo, si usa il metodo di Lie. Bisognerà adattare l'usuale procedimento per sistemi quasi-integrabili alla presenza di una funzione modulante dipendente dal tempo in modo lento, ovvero dipendente da $\sqrt{\varepsilon}q$.

Si tratta di una situazione che si incontra tipicamente nella teoria degli invarianti adiabatici e considerata per il problema in esame in [1] per arrivare alla forma normale con resto esponenzialmente piccolo descritta nella sezione 3.3. La presenza del fattore $\sqrt{\varepsilon}$ in particolare ci porta a considerare sviluppi in potenze semi-interi di ε anziché interi.

Nel caso di interesse, l'hamiltoniana coniugata assume pertanto la forma:

$$H^{(1)} = H_0 + \varepsilon(\{H_0, \chi^{(1)}\} + V) + O(\varepsilon^{\frac{3}{2}})$$

Per ottenere delle nuove variabili $J^{(1)}$ con tempi di stabilità migliorati bisogna quindi che il contenuto della parentesi eguagli un'opportuna funzione $M(J, \sqrt{\varepsilon}q)$ indipendente da (φ_1, φ_2) , ma possibilmente dipendente da $\sqrt{\varepsilon}q$.

Data la particolare forma fattorizzabile della perturbazione, si cerca una funzione generatrice che sia parimenti fattorizzabile, ovvero della forma $\chi^{(1)} = f(\sqrt{\varepsilon}q)a(J, \varphi)$, ove a è una funzione da determinare.

Con queste premesse, posto $\omega(J) := \nabla_J H_0$, la parentesi di Poisson nello spazio delle fasi esteso è pari a:

$$\{H_0, \chi^{(1)}\} = -\omega(J) \cdot \frac{\partial a}{\partial \varphi}(J, \varphi) f(\sqrt{\varepsilon}q) - \sqrt{\varepsilon} a(J, \varphi) \frac{\partial f}{\partial t}(\sqrt{\varepsilon}q),$$

ove si intende $t = \sqrt{\varepsilon}q$. Allora si può notare che il secondo addendo è di ordine $\frac{3}{2}$ in ε , e dunque può essere escluso dalla trattazione al primo ordine.

Si può dunque scrivere l'equazione fondamentale della teoria delle perturbazioni:

$$-\omega(J) \cdot \frac{\partial a}{\partial \varphi}(J, \varphi) f(\sqrt{\varepsilon}q) + f(\sqrt{\varepsilon}q)g(\varphi) = M(J, \sqrt{\varepsilon}q).$$

Per risolverla, occorre sviluppare i vari termini in serie di Fourier. Si assume perciò che la funzione a si possa scrivere come:

$$a(J, \varphi) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} a_k(J) e^{ik \cdot \varphi}$$

Eguagliando i due membri termine a termine, per $k = 0$ si ottiene

$$f(\sqrt{\varepsilon}q)g_0 = M(J, \sqrt{\varepsilon}q)$$

e poiché g_0 è una costante, la funzione M non dipende dalle azioni: $M(J, \sqrt{\varepsilon}q) = M(\sqrt{\varepsilon}q)$. La dipendenza di M da q non è rilevante sul sistema, visto che entra in gioco unicamente nell'equazione del moto della variabile fittizia p .

Per $k \neq 0$ si ottiene invece, semplificando la funzione f :

$$(-ik \cdot \omega(J))a_k(J) + g_k = 0,$$

quindi i coefficienti a_k soddisfano la relazione

$$a_k(J) = \frac{g_k}{ik \cdot \omega(J)}. \quad (8)$$

Si noti che si ha libertà sulla scelta di a_0 ; per semplicità lo si pone uguale a zero. Anche in questo caso abbiamo a che fare con un insieme denso di risonanze e quindi con un problema di piccoli divisori, che può essere trattato mediante la teoria di Nekhoroshev.

Una volta trovata un'espressione esplicita per la funzione generatrice, è quindi possibile riscrivere l'hamiltoniana coniugata a H dalla trasformazione:

$$H^{(1)} = H_0 + \varepsilon M(\sqrt{\varepsilon}q) - \varepsilon^{3/2} \frac{\partial f}{\partial t}(\sqrt{\varepsilon}q) a(J^{(1)}, \varphi^{(1)}) + O(\varepsilon^2)$$

Si può poi reiterare il ragionamento precedente per eliminare la dipendenza dagli angoli all'ordine $3/2$, coniugando $H^{(1)}$ a un'hamiltoniana $H^{(2)}$ mediante il flusso di un'altra funzione generatrice:

$$(J^{(1)}, \varphi^{(1)}) = \Phi_{\chi^{(2)}}^{\varepsilon^{3/2}}(J^{(2)}, \varphi^{(2)})$$

L'hamiltoniana coniugata alla trasformazione risulta pertanto

$$H^{(2)} = H_0 + \varepsilon M(\sqrt{\varepsilon}q) + \varepsilon^{3/2}(\{H_0, \chi^{(2)}\} - \frac{\partial f}{\partial t}a) + O(\varepsilon^2)$$

Analogamente a quanto visto prima, la perturbazione è fattorizzabile e quindi potremo cercare una generatrice del tipo:

$$\chi^{(2)} = -\frac{\partial f}{\partial t}(\sqrt{\varepsilon}q)b(J, \varphi)$$

Procedendo in modo del tutto simile al passo precedente, la derivata temporale della funzione generatrice sarà di ordine 2 e quindi può essere ignorata. Eguagliando il contenuto della parentesi a una funzione $N(J, \sqrt{\varepsilon}q)$ si ottiene:

$$N(J, \sqrt{\varepsilon}q) = -\frac{\partial f}{\partial t}(\sqrt{\varepsilon}q)a_0$$

da cui segue che $N(J, \sqrt{\varepsilon}q) = 0$ per la scelta fatta su a_0 . Per b si ottiene invece:

$$b_k(J) = \frac{a_k(J)}{ik \cdot \omega(J)} = -\frac{g_k}{(k \cdot \omega(J))^2}. \quad (9)$$

Si noti un'importante differenza rispetto al caso quasi-integrabile generico analizzato nella sezione 2: qui le funzioni generatrici sono proporzionali alla funzione modulatrice f e alle sue derivate, dunque $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |J_i(t) - J_i^{(1)}(t)| = 0$, cioè le azioni migliorate a qualunque ordine tendono allo stesso valore delle azioni originarie. Nei sistemi quasi-integrabili generici invece $\|J - J^{(1)}\|$ è di ordine ε , e quindi anche se ΔJ è di ordine ε^2 essa è "mascherata" da $\|J - J^{(1)}\|$ che è molto più grande. Dunque in questo problema di invarianza adiabatica la misura dell'instabilità delle variabili di azione è più semplice e consente misure numeriche più precise.

Si potrebbe poi procedere con un'analisi a ordini successivi; l'unica differenza concettuale rispetto ai due passi perturbativi precedenti è che ora la funzione generatrice sarà, in generale, somma di funzioni fattorizzabili nella variabile q e nelle variabili (J, φ) . D'altra parte, secondo quanto stabilito in [1] ci si aspetta di poter iterare il procedimento fino a ottenere un resto esponenzialmente piccolo.

5 Risultati numerici preliminari

Il nostro scopo ora è far vedere che il procedimento appena descritto apporta dei significativi miglioramenti al moto delle variabili di azione, riducendone la variazione nel tempo e mostrando che effettivamente i valori del parametro perturbativo rientrano nel dominio di applicazione della teoria delle perturbazioni. Preliminarmente è dunque utile capire alcuni dettagli riguardo all'integrazione numerica del sistema.

Almeno inizialmente, si è utilizzato come integratore un Runge-Kutta di ordine 6 e si sono svolti i calcoli in doppia precisione. Per l'integrazione numerica, è necessario scegliere un passo di integrazione h e un tempo iniziale t_0 da cui far partire l'algoritmo. Data la particolare forma dell'hamiltoniana, è conveniente scegliere come dato iniziale un certo $t_0 < 0$ tale che $f(\sqrt{\varepsilon}t_0) \approx 0$; per convenienza si sceglierà il tempo finale simmetrico rispetto a quello iniziale. Siccome la perturbazione tende a zero per $t \rightarrow \pm\infty$, questa scelta consente di verificare che le azioni restino costanti per un tempo sufficiente per tempi lunghi. Il numero di punti totali per l'integrazione dovrà quindi essere $2|t_0|/h$. Per quanto riguarda i dati iniziali, le successive analisi verranno sempre svolte ponendo $J_1(t_0) = 1$, $J_2(t_0) = \sqrt{2}$, dato che tale vettore è non risonante e consente una trattazione che evita i problemi legati ai piccoli divisori.

Per quanto riguarda gli angoli, si osserva che una piccola variazione dei dati iniziali può produrre significativi cambiamenti sull'orbita; specificheremo volta per volta quali particolari valori sono stati utilizzati.

Di seguito riportiamo un esempio di integrazione numerica per $\varepsilon = 10^{-3}$, $h = 10^{-2}$, $t_0 = -2 \cdot 10^2$; nella prima coppia di grafici i dati iniziali sono $(\varphi_1(t_0), \varphi_2(t_0)) = (0, 0)$, mentre nella seconda coppia $(\pi, 0)$. Riportiamo soltanto il moto delle azioni, dato che gli angoli avanzano linearmente nel tempo e non contengono alcuna informazione sostanziale; in seguito non prenderemo in considerazione il moto delle variabili angolari.

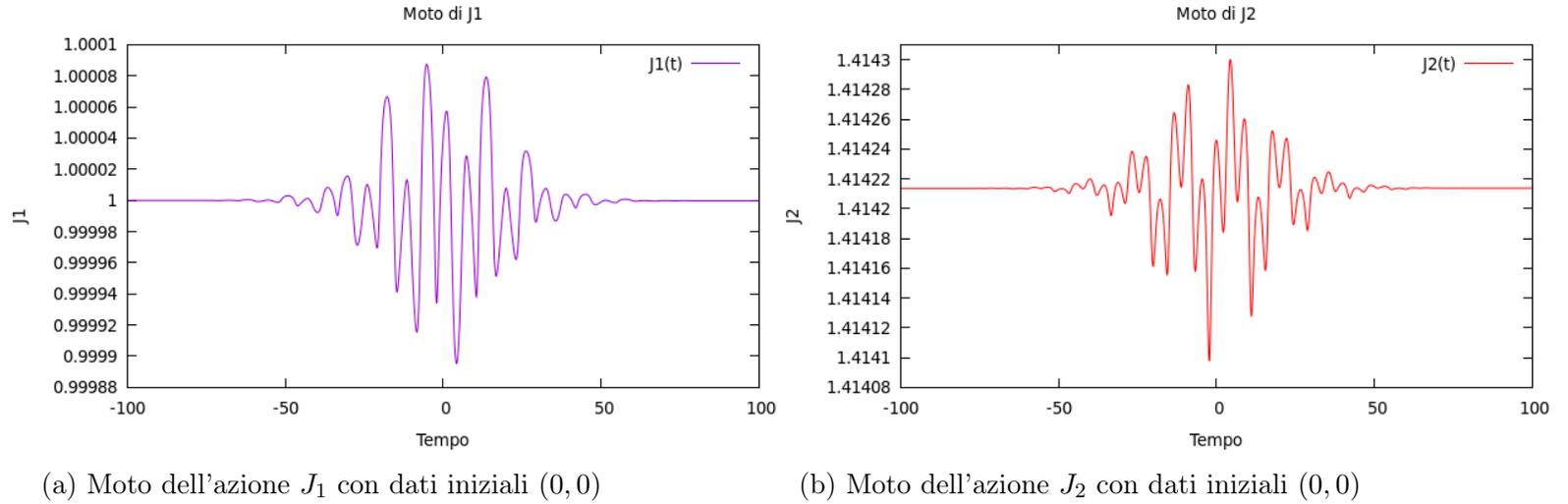


Figura 2: Moto delle azioni con dati iniziali $(0, 0)$

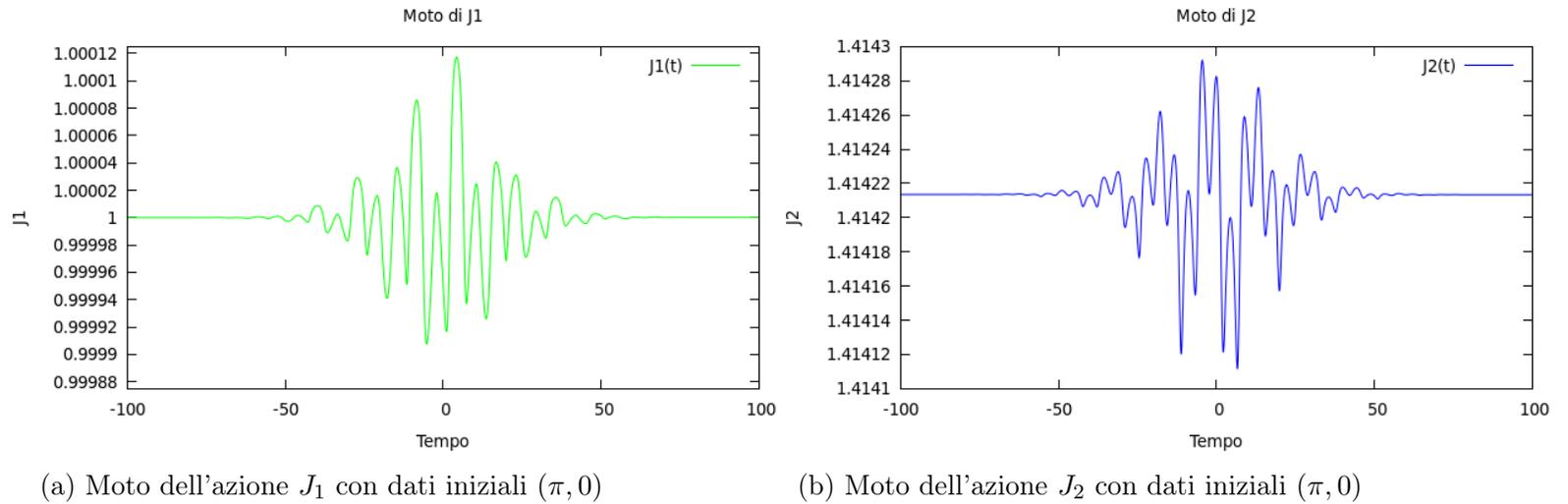


Figura 3: Moto delle azioni con dati iniziali $(\pi, 0)$

Il moto presenta le caratteristiche che si potevano aspettare intuitivamente: le azioni partono dal valore iniziale, oscillano per un certo intervallo di tempo (determinato all'incirca da $1/\sqrt{\varepsilon}$), dopodiché si stabilizzano al valore finale.

La prima analisi che è utile fare riguarda l'errore sperimentale connesso alla conservazione dell'energia dell'integratore, dovuto al fatto che naturalmente le soluzioni trovate sono vicine ma non uguali a quelle effettive. Le variazioni delle grandezze che vogliamo misurare devono quindi mantenersi sempre ragionevolmente superiori a questo errore, onde evitare di trovare risultati insensati. Se $H(t_0)$ è il valore dell'hamiltoniana al tempo iniziale, una prima stima dell'errore introdotto dall'integratore nell'intervallo di tempo considerato è fornita da $\max_t |H(t) - H(t_0)|$, ove $H(t)$ è il valore dell'hamiltoniana calcolata lungo le orbite integrate numericamente.

L'errore sull'energia dipenderà dal valore di ε e dalla scelta del passo di integrazione. Prendendo sempre in considerazione il caso precedente con dati iniziali $(0, 0)$, mostriamo in funzione del tempo la differenza tra l'energia al tempo iniziale e il valore calcolato lungo l'orbita integrata numericamente.

mente per tre valori del passo di integrazione, ovvero $h = 10^{-2}, 5 \cdot 10^{-3}, 10^{-3}$, per il momento in precisione doppia:

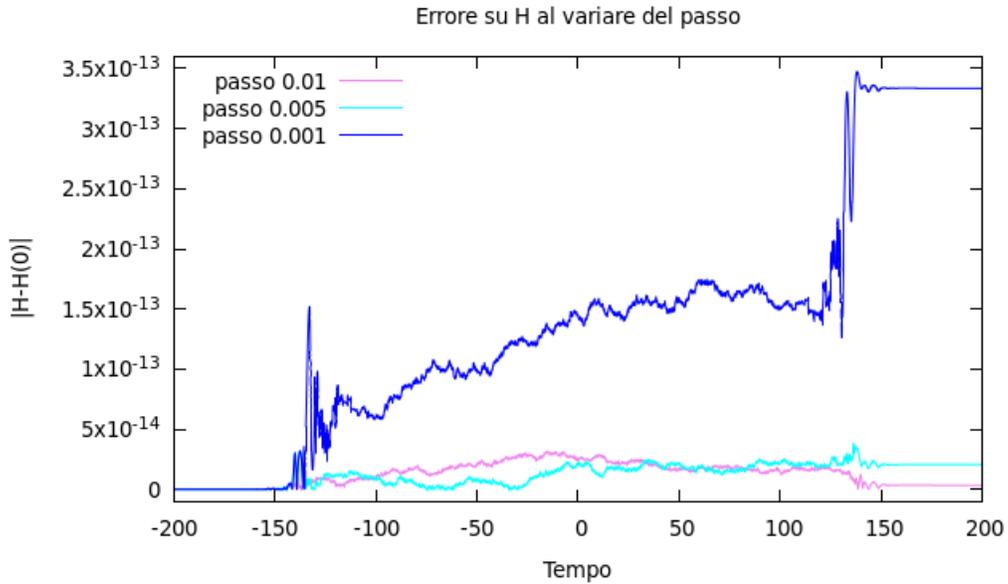


Figura 4: Errore sull'energia al variare di h

Come è possibile vedere, l'errore sull'energia cresce al diminuire del passo, aumentando anche di diversi ordini di grandezza: questo fenomeno è dovuto alla precisione utilizzata. Infatti, in un algoritmo Runge-Kutta di ordine 6 l'errore commesso dall'integratore a ogni passo è controllato da h^7 ; per i valori di h considerati, questo errore risulta confrontabile con l'errore commesso per approssimazione numerica. Non deve quindi stupire che in questo grafico vi sia un'apparente instabilità dell'errore sull'energia al diminuire del passo: ciò che stiamo qui misurando in realtà è l'errore legato all'approssimazione numerica, non lo scostamento delle orbite integrate da quelle effettive. Tale errore aumenta all'aumentare dei passi, spiegando gli alti valori riscontrati per $h = 10^{-3}$.

Ripetiamo quindi lo stesso esperimento utilizzando la quadrupla precisione:

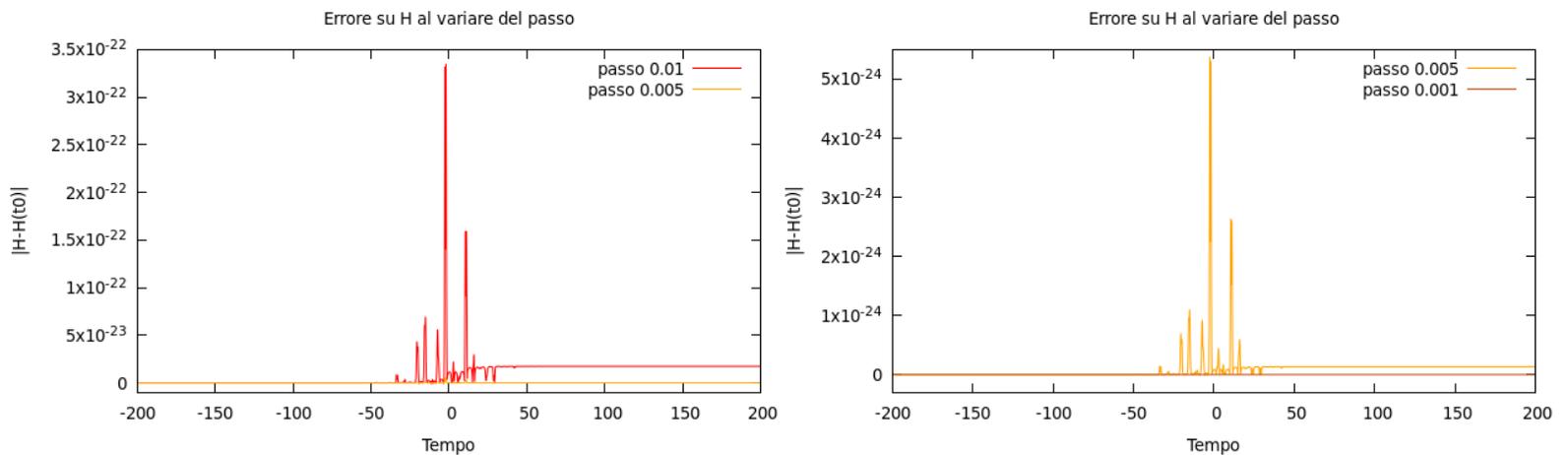


Figura 5: Confronto al variare di h

Notiamo che la situazione migliora, dato che l'errore adesso diminuisce al diminuire del passo, segno che i problemi erano effettivamente legati alla precisione doppia. Infatti, per $h = 10^{-2}$ l'errore massimo è $3.5 \cdot 10^{-22}$, che scende a $5.5 \cdot 10^{-24}$ per $h = 5 \cdot 10^{-3}$, e a $3.5 \cdot 10^{-28}$, per $h = 10^{-3}$. Questo è ora perfettamente in accordo con le aspettative: sappiamo che l'errore massimo commesso durante l'integrazione è controllato da h^6 , dunque dimezzando il passo l'errore diminuisce di un fattore 2^6 (il rapporto tra i primi due valori è effettivamente di 64), e rendendolo dieci volte più piccolo l'errore diminuisce di un fattore 10^6 .

Ci aspettiamo inoltre che l'errore commesso dall'integratore diminuisca al diminuire di ε , visto che le variazioni delle azioni diventano via via più piccole. Possiamo quindi ripetere l'esperimento per un certo range di valori di ε , per esempio da 10^{-2} fino a 10^{-4} , e graficare il massimo errore commesso durante l'integrazione. Prendiamo come tempo iniziale $t_0 = -7 \cdot 10^2$ per tutte le integrazioni, visto che è sufficiente ad annullare f per tutti i valori di ε considerati; come dati iniziali prenderemo sempre $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$, supponendo che la dipendenza dell'errore dai dati iniziali sia trascurabile rispetto a quella da ε . Sono stati presi 50 valori di ε , spazati a intervalli regolari nel range considerato, e l'integrazione è stata eseguita con passo $h = 10^{-2}$. Il risultato è il seguente:

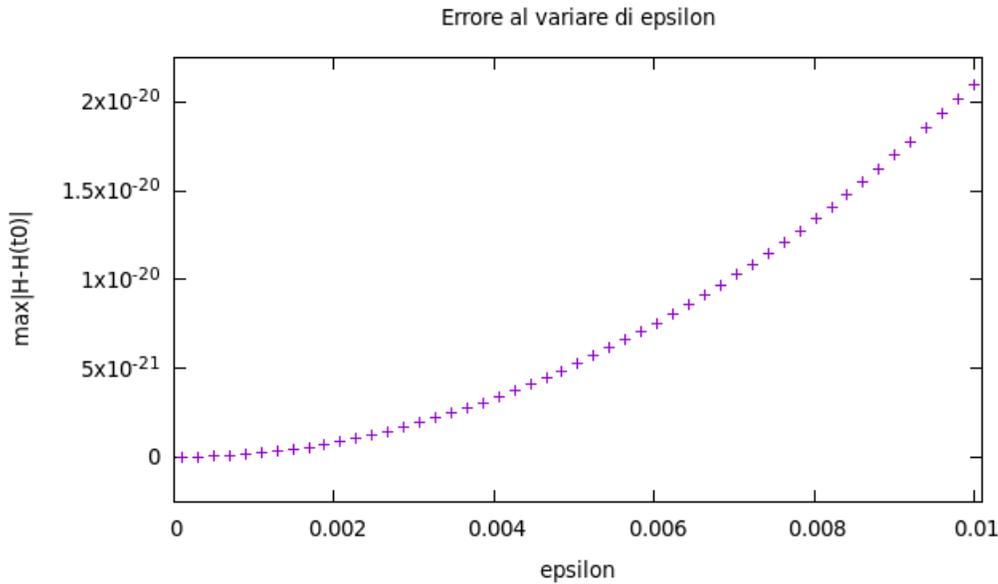


Figura 6: Errore massimo sull'energia al variare di ε

Come era atteso, l'errore massimo diminuisce con ε ; non è immediato tuttavia capirne l'andamento in modo preciso. La curva non è precisamente esponenziale, ma è ragionevole ipotizzare che l'errore massimo commesso segua il profilo della perturbazione.

Come risultato finale di questa discussione, possiamo affermare che la precisione quadrupla si dimostra necessaria anche per valori relativamente alti di ε . L'uso della precisione doppia è possibile per velocizzare i calcoli laddove si sia certi che le azioni sono limitate a valori ben più alti rispetto all'errore sperimentale, ma bisogna prestare particolare attenzione e tenere il passo d'integrazione a valori dell'ordine di 10^{-2} per evitare instabilità. Già a valori di $\varepsilon \approx 10^{-4}$, per alcune scelte dei dati iniziali le variazioni delle azioni sono confrontabili con l'errore sperimentale in precisione doppia: in tali casi è opportuno usare la precisione quadrupla. Al fine di non appesantire eccessivamente i tempi computazionali, i valori di ε che prenderemo in considerazione saranno sempre tali da poter porre $h = 10^{-2}$ senza perdere precisione agli ordini di interesse.

6 Integrali primi migliorati

Una volta analizzati i principali dettagli dell'integrazione numerica, è possibile capire in che modo il procedimento perturbativo descritto in precedenza produca delle quantità più "stabili" nel tempo rispetto alle azioni originarie.

6.1 Sviluppo di Fourier della perturbazione

Nel prossimo paragrafo avremo bisogno di conoscere esplicitamente i coefficienti di Fourier della perturbazione. Data la particolare forma assunta per g , che risulta pari in entrambi gli angoli, i coefficienti di Fourier soddisfano la relazione:

$$g_{m,n} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} g(\varphi_1, \varphi_2) e^{-i(m\varphi_1 + n\varphi_2)} d\varphi_1 d\varphi_2 = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} g(\varphi_1, \varphi_2) \cos(m\varphi_1 + n\varphi_2) d\varphi_1 d\varphi_2$$

e dunque la serie si scrive come:

$$g(\varphi_1, \varphi_2) = \sum_{(m,n) \in \mathcal{M}} 2g_{m,n} \cos(m\varphi_1 + n\varphi_2) \quad \mathcal{M} = \{(m, n) \in \mathbb{Z}^2 : m > 0, n \in \mathbb{Z} \vee m = 0, n > 0\}$$

che ovviamente andrà troncata per opportuni valori $m = M, n = N$.

Per calcolare i coefficienti $g_{m,n}$ si può procedere in vari modi. Una prima idea è di valutare numericamente gli integrali mediante appositi programmi di calcolo, come per esempio Mathematica. Tuttavia, per ottenere una buona precisione sui coefficienti per ordini superiori al decimo occorrerebbero tempi computazionali molto lunghi. Alternativamente, è possibile sfruttare metodi algebrici per trovare l'espressione esplicita della serie. La funzione può essere riscritta come:

$$g(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{A} \frac{1}{1 + \frac{\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2}{A}}$$

e quindi può essere pensata come serie geometrica:

$$g(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{1}{A} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{A^k} (\cos \varphi_1 + \cos \varphi_2)^k$$

Per passare dalla forma polinomiale a quella lineare si può usare la funzione TrigExpand di Mathematica, e poi estrarre i coefficienti mediante l'opportuna funzione Coefficient. Per quanto riguarda l'ordine a cui troncata la serie, esso dipende fortemente dal termine A a denominatore della funzione g , dato che più esso è grande più la serie converge rapidamente, nonché dal valore di ε . È quindi bene discutere gli effetti del troncamento della serie, dato che nelle generatrici $\chi^{(1)}$ e $\chi^{(2)}$ compaiono le funzioni a e b , le quali a loro volta dipendono dai coefficienti $g_{m,n}$.

Per capire l'ordine a cui è necessario fermarsi, bisogna che l'errore commesso per il troncamento sia sufficientemente piccolo rispetto alle variazioni di energia che vogliamo misurare. Una prima idea è quindi quella di capire la differenza tra la funzione e la sua approssimazione di Fourier al variare dell'ordine K a cui si tronca la serie geometrica. Si valuta dunque il massimo della differenza tra il troncamento all'ordine K $g_K(\varphi_1, \varphi_2)$ e la funzione $g(\varphi_1, \varphi_2)$, e si chiede che questo errore sia

minore delle fluttuazioni massime in gioco nell'integrazione. È chiaro che questo metodo porta a una sovrastima dell'errore, dato che il massimo della funzione sarà assunto per un numero molto limitato di punti durante l'integrazione, tuttavia costituisce una "buona" stima perché facilmente controllabile da un punto di vista analitico; bisogna poi considerare che la funzione g è moltiplicata per ε e modulata da $f(\sqrt{\varepsilon}q)$.

È facile rendersi conto, per esempio tramite un calcolatore, che $\max_{\mathbb{T}^2} |g(\varphi_1, \varphi_2) - g_K(\varphi_1, \varphi_2)|$ è assunto proprio nel massimo della funzione g , cioè nel punto $(\varphi_1, \varphi_2) = (\pi, \pi)$. Allora possiamo usare i risultati noti delle serie geometriche per calcolare esattamente l'errore commesso per il troncamento:

$$\max_{\mathbb{T}^2} |g(\varphi_1, \varphi_2) - g_K(\varphi_1, \varphi_2)| = \frac{1}{A-2} - \sum_{k=0}^K \frac{2^k}{A^{k+1}} = \frac{1}{A-2} - \frac{1}{A} \frac{1 - \left(\frac{2}{A}\right)^{K+1}}{1 - \frac{2}{A}} = \frac{\left(\frac{2}{A}\right)^{K+1}}{A-2}$$

Facciamo quindi un rapido confronto per $A = 3, 4, 5$:

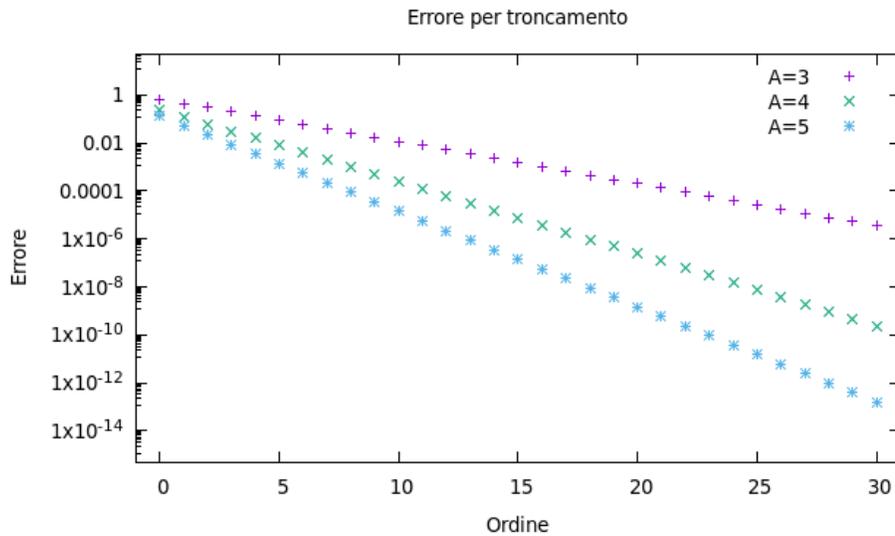


Figura 7: Errore massimo sul troncamento della serie al variare di K

Da cui si può apprezzare la maggiore velocità di convergenza al crescere di A .

Il metodo analitico risulta dunque molto potente, perché consente di calcolare esattamente l'errore massimo commesso per il troncamento. Se vogliamo trovarvi un difetto, troncando la serie a ordine K esso non permette il calcolo esatto dei coefficienti di Fourier, dato che sviluppando la serie a un ordine $K_1 > K$ compaiono delle correzioni anche ai termini precedenti; ciò è dovuto al passaggio dalla serie geometrica a quella di Fourier. Inoltre, questo metodo non consente il calcolo di tutti i coefficienti $g_{m,n}$ con $m, n \leq K$: verranno infatti soppressi tutti i coefficienti $g_{m,n}$ con $m + n \geq K$. Tale problema è comunque aggirabile sviluppando la serie a ordini più alti.

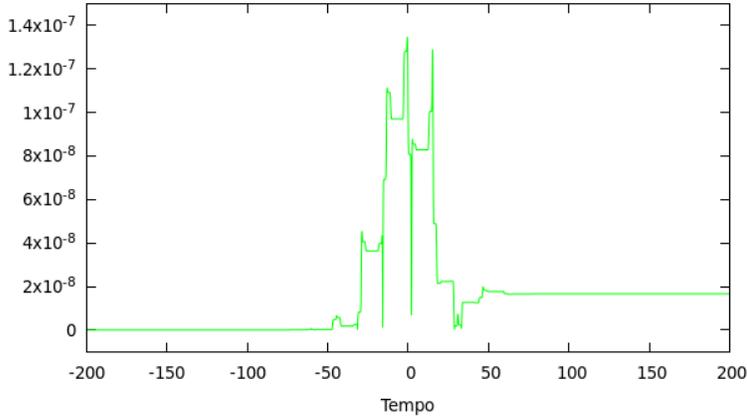
Un aspetto che ora vale la pena approfondire è la differenza tra l'integrazione numerica ottenuta con la funzione g e quella invece ottenuta tramite la sua approssimazione.

L'errore massimo che possiamo aspettarci dall'integrazione numerica troncando a ordine K sarà pari all'incirca a $\varepsilon \cdot \frac{\left(\frac{2}{A}\right)^{K+1}}{A-2}$; verificheremo che, nonostante questa stima sia molto grezza, i casi esaminati vi rientrano.

Prendiamo ora ad esempio $A = 4$, e consideriamo inizialmente $\varepsilon = 10^{-3}$; le oscillazioni massime delle azioni risultano dell'ordine di 10^{-4} . Confrontiamo quindi il moto delle azioni nel sistema

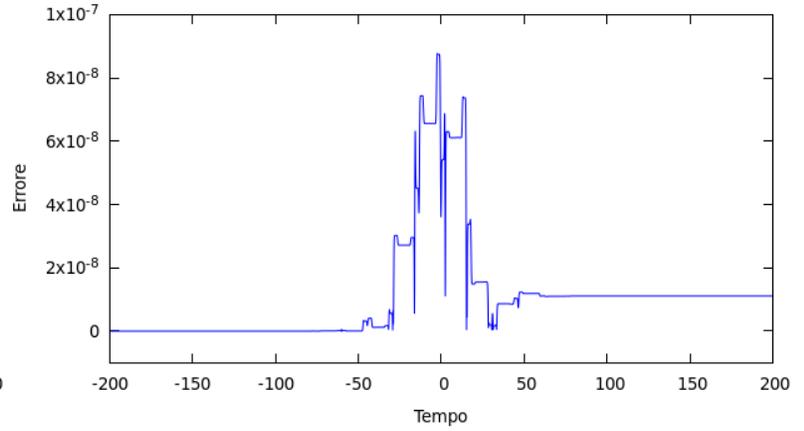
esatto e in quello troncato, graficando il modulo della differenza punto per punto tra i due valori per $K = 10, 15$; come dati iniziali sono stati considerati (π, π) :

Errore per troncamento su J_1



(a) Errore puntuale su J_1 per $K = 10$

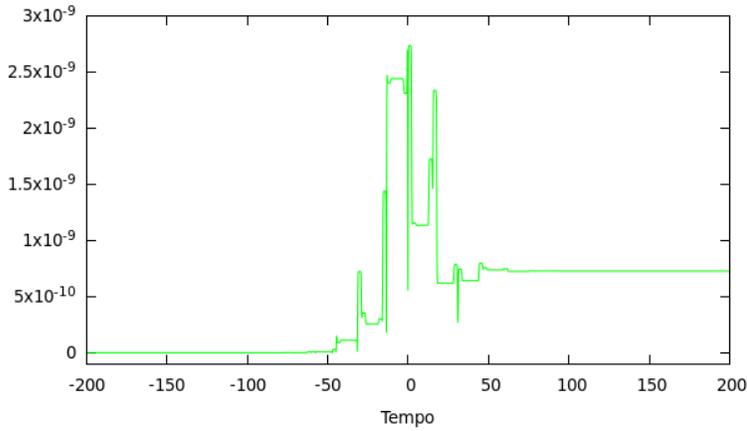
Errore per troncamento su J_2



(b) Errore puntuale su J_2 per $K = 10$

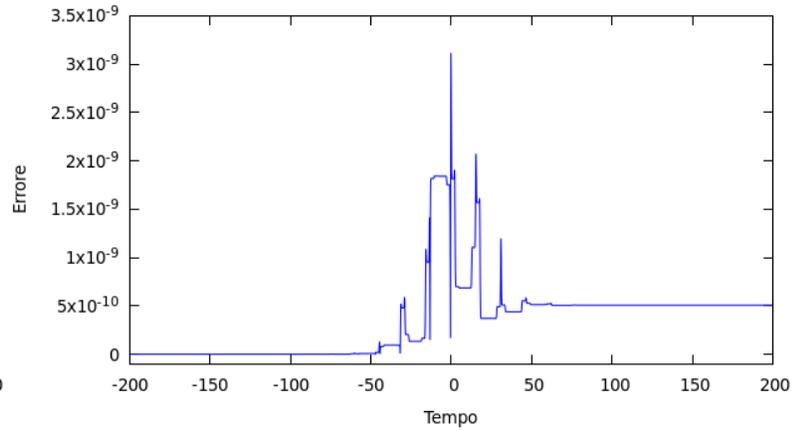
Figura 8: Errore per troncamento per $K = 10$ con $\varepsilon = 10^{-3}$

Errore per troncamento su J_1



(a) Errore puntuale su J_1 per $K = 15$

Errore per troncamento su J_2



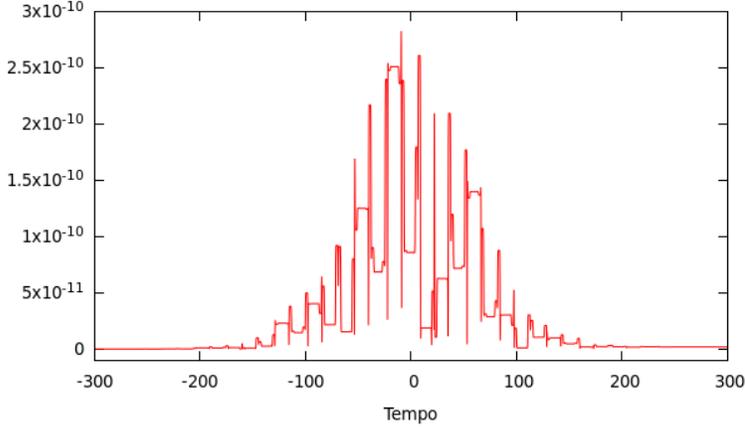
(b) Errore puntuale su J_2 per $K = 15$

Figura 9: Errore per troncamento per $K = 15$ con $\varepsilon = 10^{-3}$

Gli errori commessi per il troncamento sono ovviamente massimi quanto f lo è; si osserva inoltre che gli errori agli ordini considerati risultano molto minori rispetto alle variazioni tipiche di J_1 e J_2 (il plot delle funzioni $J(t)$ per il sistema troncato è perfettamente sovrapposto a quello del sistema completo).

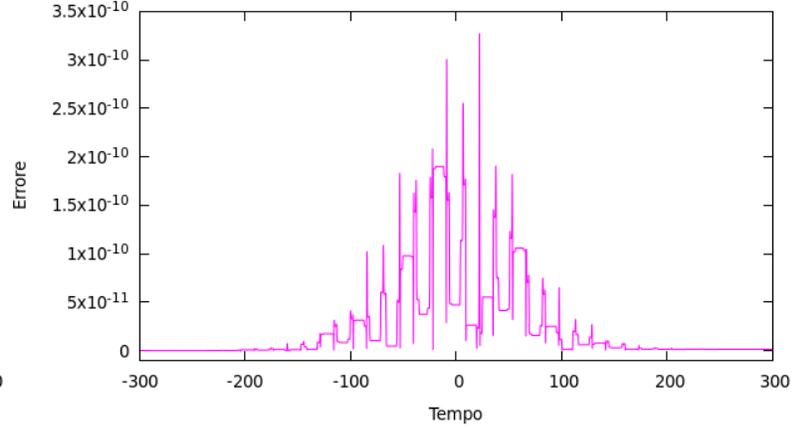
Ripetiamo l'esperimento per $\varepsilon = 10^{-4}$: ora le oscillazioni massime delle azioni sono dell'ordine di 10^{-5} , dunque usiamo $K = 15, 20$, ancora con dati iniziali (π, π) :

Errore per troncamento su J_1



(a) Errore puntuale su J_1 per $K = 15$

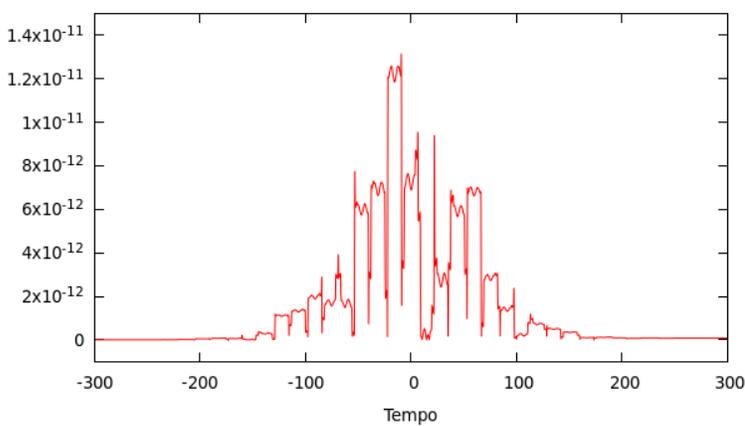
Errore per troncamento su J_2



(b) Errore puntuale su J_2 per $K = 15$

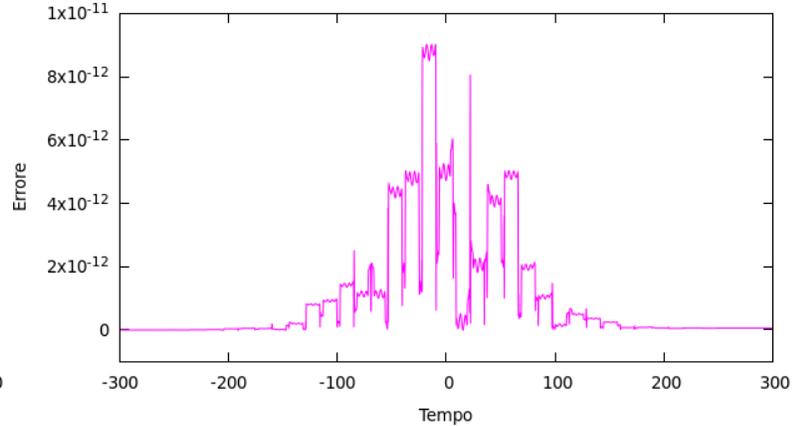
Figura 10: Errore per troncamento per $K = 15$ con $\varepsilon = 10^{-4}$

Errore per troncamento su J_1



(a) Errore puntuale su J_1 per $K = 20$

Errore per troncamento su J_2



(b) Errore puntuale su J_2 per $K = 20$

Figura 11: Errore per troncamento per $K = 20$ con $\varepsilon = 10^{-4}$

Anche qua, ribadiamo l'accordo tra il sistema esatto e quello approssimato. Possiamo concludere che la stima data in precedenza sul massimo errore è rispettata: trascurando eventuali fluttuazioni legate alla scelta dei dati iniziali, per $\varepsilon = 10^{-3}$, abbiamo misurato un errore massimo di $1.3 \cdot 10^{-7}$ e $3 \cdot 10^{-9}$ rispettivamente per $K = 10$ e 15 , contro un'aspettativa teorica di $2.4 \cdot 10^{-7}$ e $7.7 \cdot 10^{-9}$; per $\varepsilon = 10^{-4}$ si registrano errori massimi di $3 \cdot 10^{-10}$ e $1.3 \cdot 10^{-11}$ per $K = 15$ e 20 , e l'attesa è di $7.7 \cdot 10^{-10}$ e $2.4 \cdot 10^{-11}$.

Vale la pena poi osservare che siccome l'errore ha andamento esponenziale in K , per ottenere errori minori è via via necessario aumentare maggiormente l'ordine di troncamento: passando da $K = 10$ a 15 l'errore diminuisce di due ordini di grandezza, mentre passando da 15 a 20 solo di uno. In ogni caso, nell'analisi seguente non sarà necessario considerare valori superiori a $K = 30$.

6.2 Applicazione del procedimento perturbativo

Possiamo ora mostrare in che modo il procedimento perturbativo produca delle quantità collegate alle azioni J_1, J_2 che però risultano più stabili nel tempo rispetto alle azioni medesime.

Come già mostrato in precedenza, le variabili di azione migliorate al primo ordine risultano:

$$J_1^{(1)} = J_1 + \varepsilon \frac{\partial \chi^{(1)}}{\partial \varphi_1}$$

$$J_2^{(1)} = J_2 + \varepsilon \frac{\partial \chi^{(1)}}{\partial \varphi_2}$$

mentre all'ordine $3/2$ avremo:

$$J_1^{(2)} = J_1 + \varepsilon \frac{\partial \chi^{(1)}}{\partial \varphi_1} + \varepsilon^{\frac{3}{2}} \frac{\partial \chi^{(2)}}{\partial \varphi_1}$$

$$J_2^{(2)} = J_2 + \varepsilon \frac{\partial \chi^{(1)}}{\partial \varphi_2} + \varepsilon^{\frac{3}{2}} \frac{\partial \chi^{(2)}}{\partial \varphi_2}$$

L'idea dunque è molto semplice: eseguiamo l'integrazione numerica, e a intervalli regolari stampiamo il valore delle azioni e delle variabili migliorate.

Per quanto riguarda le funzioni generatrici, abbiamo già discusso come trovarne i coefficienti di Fourier. Passando dalla forma esponenziale a quella trigonometrica le espressioni troncate a ordine M e N per le funzioni a e b sono:

$$\begin{aligned} a(J, \varphi) \approx & \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \frac{2g_{m,n}}{mJ_1 + nJ_2} \sin(m\varphi_1 + n\varphi_2) + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \frac{2g_{m,n}}{mJ_1 - nJ_2} \sin(m\varphi_1 - n\varphi_2) + \\ & + \sum_{m=1}^M \frac{2g_{m,0}}{mJ_1} \sin(m\varphi_1) + \sum_{n=1}^N \frac{2g_{0,n}}{nJ_2} \sin(n\varphi_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b(J, \varphi) \approx & \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \frac{-2g_{m,n}}{(mJ_1 + nJ_2)^2} \cos(m\varphi_1 + n\varphi_2) + \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \frac{-2g_{m,n}}{(mJ_1 - nJ_2)^2} \cos(m\varphi_1 - n\varphi_2) + \\ & + \sum_{m=1}^M \frac{-2g_{m,0}}{(mJ_1)^2} \cos(m\varphi_1) + \sum_{n=1}^N \frac{-2g_{0,n}}{(nJ_2)^2} \cos(n\varphi_2) \end{aligned}$$

Utilizzando il metodo algebrico, come già fatto notare in precedenza in generale non avremo un'espressione esatta per $g_{m,n}$, tuttavia l'ordine 30 garantisce una buona precisione sui termini dominanti della serie. Per quanto riguarda M e N , essi sono determinati da K ; non è comunque nemmeno necessario mantenere tutti i termini possibili dello sviluppo. Dobbiamo cioè distinguere tra l'errore che deriva dal troncamento della serie originaria (quella che definisce g), e l'errore che invece deriva dalla scelta di M e N . Considerando ad esempio le variabili $J^{(2)}$, la funzione b risulta moltiplicata per $\varepsilon^{\frac{3}{2}}$, il che significa che l'errore commesso per troncamento verrà ulteriormente smorzato. In effetti, ciò che si nota è che per ottenere una buona precisione su b pesa molto di più l'aumento di K che non l'aumento di M e N : fissando $K = 30$, sviluppare b a ordine 10 od ordine 15 non dà variazioni apprezzabili ai valori di ε considerati. I seguenti esperimenti dunque sono stati svolti con

$K = 30$, scegliendo $M = N = 30$ per a , e $M = N = 15$ per b ; è stata inoltre impiegata la precisione quadrupla.

Partiamo fissando $\varepsilon = 10^{-3}$, $t_0 = -300$, $\varphi_1(t_0) = \varphi_2(t_0) = 0$. Nei seguenti grafici mostriamo il confronto tra il moto delle azioni all'ordine zero con quello delle azioni migliorate:

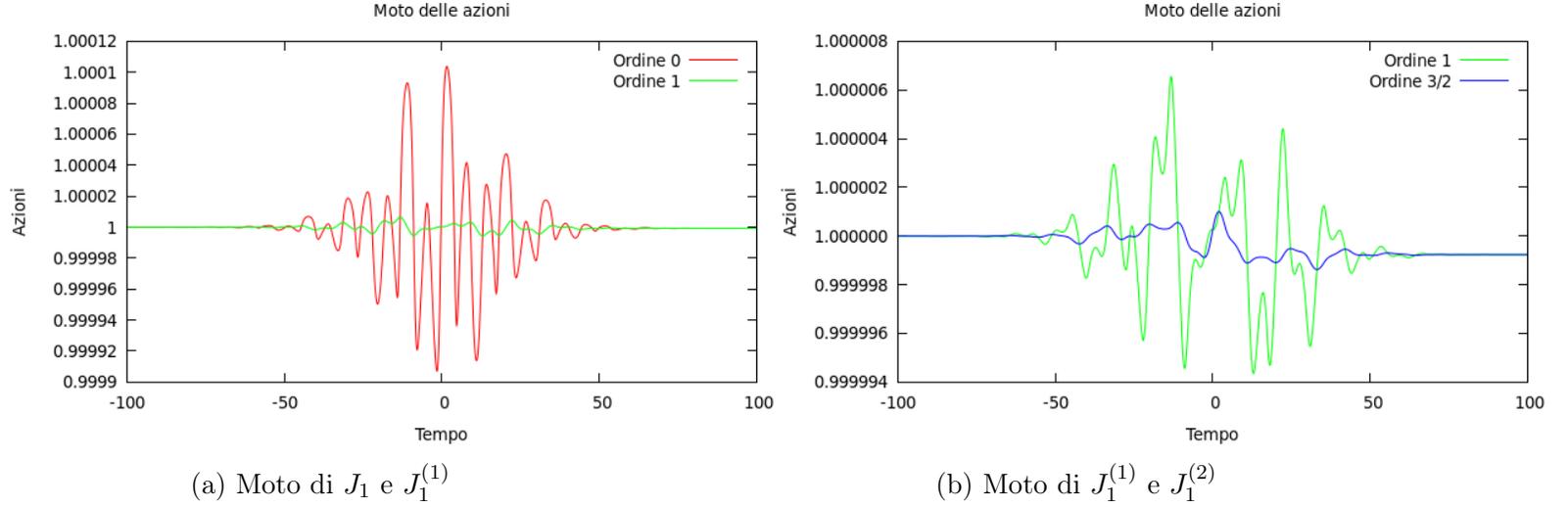


Figura 12: Variazione di J_1 a ordine 0,1 e 3/2

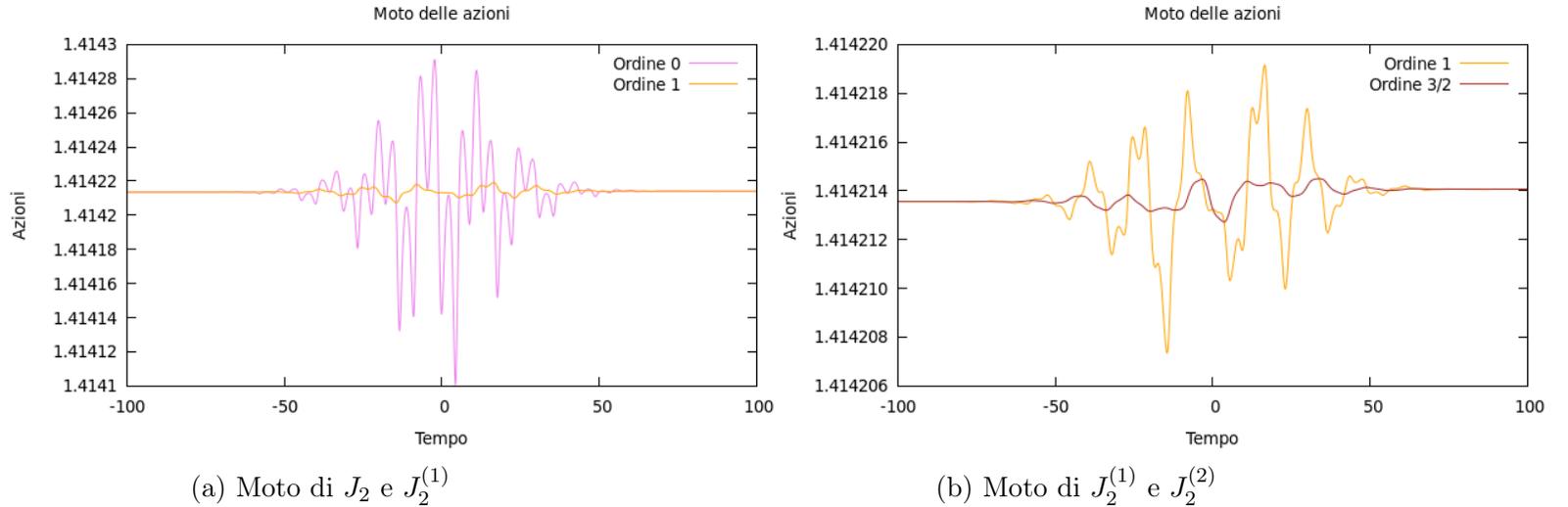


Figura 13: Variazione di J_2 a ordine 0,1 e 3/2

Dai grafici è immediatamente visibile che le oscillazioni delle azioni vengono drasticamente ridotte grazie al procedimento perturbativo. All'ordine zero il massimo scostamento dal valore iniziale è di 10^{-4} , che scende a $7 \cdot 10^{-6}$ al primo ordine, e a 10^{-6} all'ordine 3/2. Naturalmente, J , $J^{(1)}$ e $J^{(2)}$ tendono al medesimo valore quando $t \rightarrow \pm\infty$, dato che le funzioni generatrici tendono a zero. Questa analisi, quindi, non potrebbe produrre degli integrali primi veri e propri nemmeno proseguendo il procedimento perturbativo ad ordini arbitrari di ε : ciò è in linea con quanto visto precedentemente nella sezione 3.3.

Una maniera migliore e più compatta per visualizzare gli effetti del procedimento perturbativo è mostrare al variare del tempo la differenza tra una quantità che coinvolga entrambe le azioni migliorate e un valore di riferimento. Un'idea è quella di considerare la quantità:

$$\Delta = \frac{\left(J_1^{(n)}(t)\right)^2}{2} + \frac{\left(J_2^{(n)}(t)\right)^2}{2} - \frac{\left(J_1(t_0)\right)^2}{2} - \frac{\left(J_2(t_0)\right)^2}{2}$$

Nelle precedenti condizioni, il plot è il seguente:

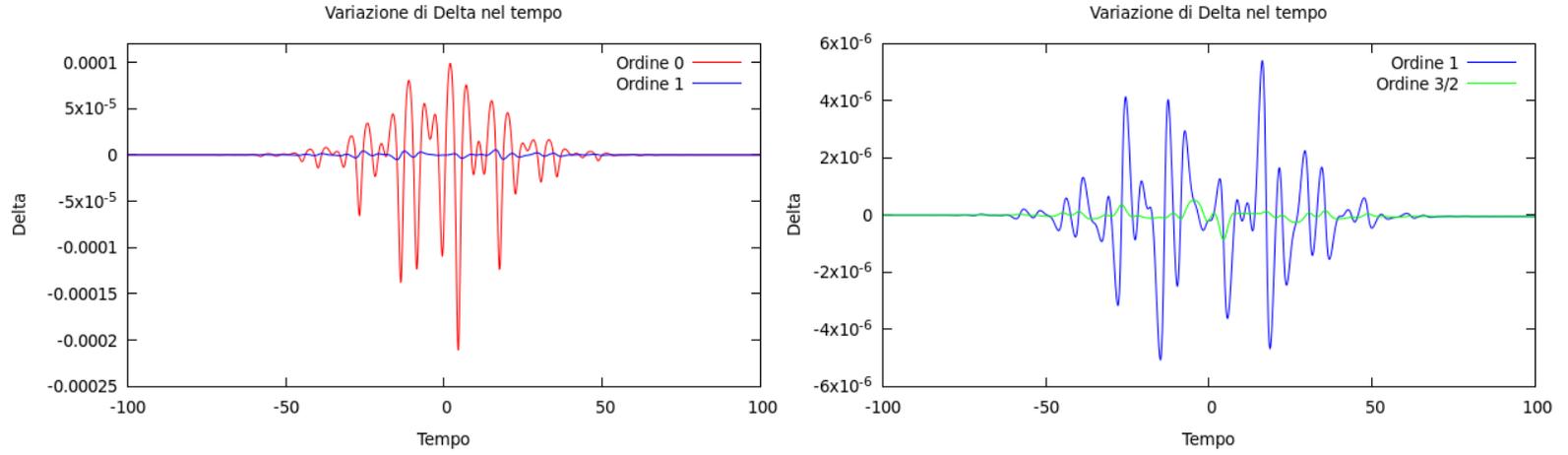


Figura 14: Variazione di Δ a ordine 0,1 e 3/2 per $\varepsilon = 10^{-3}$

Ripetiamo l'esperimento per $\varepsilon = 10^{-4}$; i dati iniziali sono $t_0 = -7 \cdot 10^2$, $\varphi_1(t_0) = \varphi_2(t_0) = 0$:

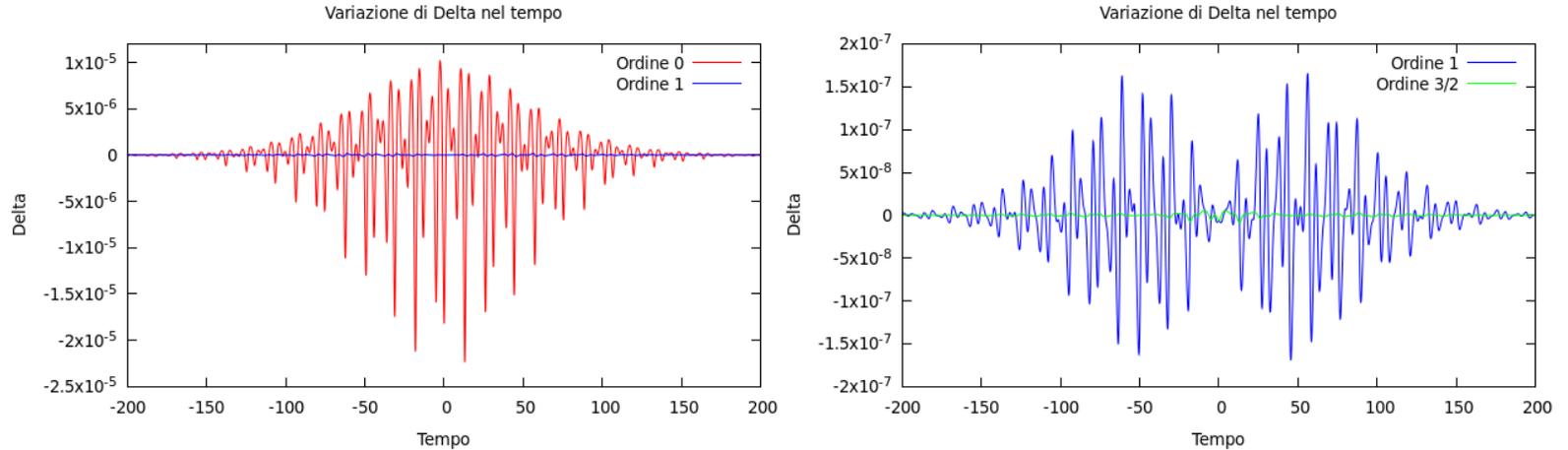


Figura 15: Variazione di Δ a ordine 0,1 e 3/2 per $\varepsilon = 10^{-4}$

Mostriamo infine i risultati per $\varepsilon = 10^{-5}$, con dati iniziali $t_0 = -2.5 \cdot 10^3$, $\varphi_1(t_0) = \varphi_2(t_0) = 0$:

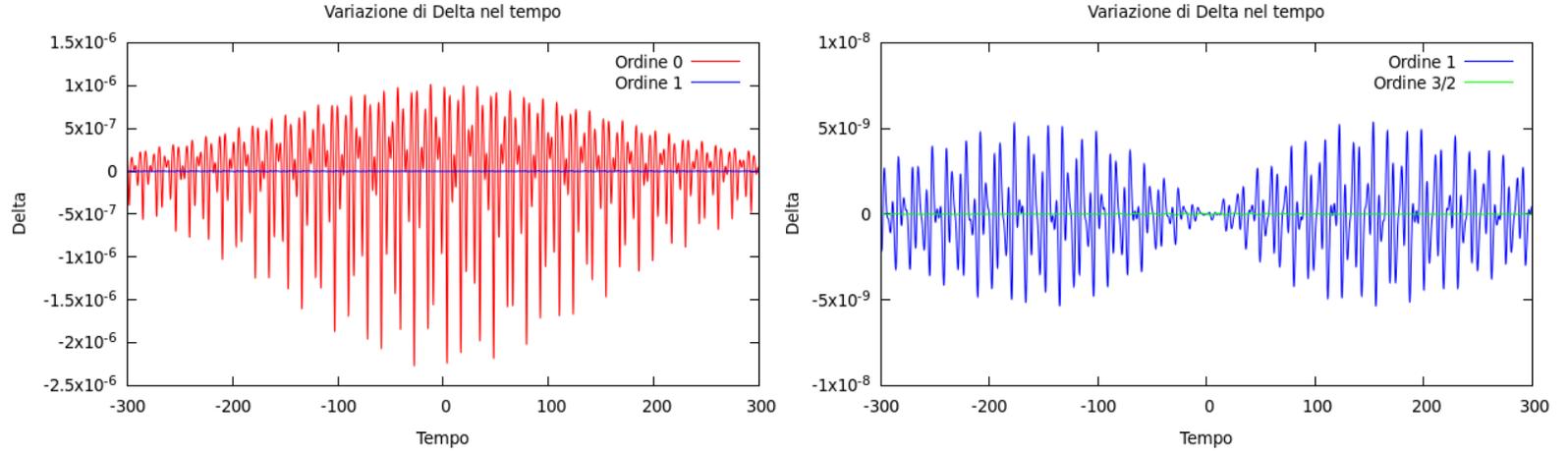


Figura 16: Variazione di Δ a ordine 0,1 e 3/2 per $\varepsilon = 10^{-5}$

7 Verifica dell'approssimazione JLT

Le altre analisi che possiamo eseguire sul sistema riguardano più strettamente l'approssimazione JLT.

Vogliamo in particolare verificare l'accordo tra l'approssimazione di Jeans-Landau-Teller e i risultati sperimentali ottenuti direttamente dall'integrazione del sistema per quanto riguarda la grandezza $\overline{\Delta J} = \max_{\mathbb{T}^2} \|\Delta J(\varphi^0)\|$, ponendo particolare attenzione al calcolo delle componenti di Fourier.

7.1 Considerazioni preliminari

L'esecuzione dell'esperimento è molto semplice: si fissa un tempo iniziale $t_0(\varepsilon)$, si itera l'integrazione per un certo numero di angoli iniziali φ^0 , al tempo finale t_f si considera la variazione

$$\|\Delta J\| = \sqrt{(J_1(t_f) - J_1(t_0))^2 + (J_2(t_f) - J_2(t_0))^2}$$

e se ne prende il massimo al variare di φ^0 ; dopodiché, si reitera la procedura per diversi valori di ε .

Come abbiamo visto in precedenza, le componenti di Fourier di ΔI nell'approssimazione JLT possono essere scritte, nel sistema non riscaldato, come:

$$I_k \approx -ikCg_k e^{-\lambda\tau|k\cdot\Omega|}$$

e dunque nel sistema riscaldato ci aspettiamo:

$$J_k = \frac{I_k}{\lambda} \approx -\frac{ikCg_k e^{-\lambda\tau|k\cdot\Omega|}}{\lambda}$$

ove si ricorda che $\lambda = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$. Il fattore λ a denominatore costituisce una differenza rispetto alla casistica esposta in [1] e [2], e passando a $\log \overline{\Delta J}$ si presenterà una correzione logaritmica in λ rispetto all'atteso andamento rettilineo.

Siccome la dipendenza delle componenti di Fourier in λ risulta piuttosto semplice, useremo questo parametro in luogo di ε . È dunque opportuno che l'esperimento venga eseguito a intervalli

regolari di λ : verranno prodotti j_{max} punti nell'intervallo $[\varepsilon_1; \varepsilon_0]$, dunque la spaziatura sarà $\Delta\lambda = \frac{1}{j_{max}} \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1}} - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \right)$. Tramite un semplice calcolo si trova che i valori assunti da ε saranno:

$$\varepsilon_j = \frac{\varepsilon_0}{1 + \varepsilon_0 j^2 \Delta\lambda^2 + 2j\Delta\lambda\sqrt{\varepsilon_0}}$$

I calcoli sono stati eseguiti in precisione doppia. Non si è potuto fare altrimenti: bisogna considerare che ogni integrazione deve essere ripetuta per ogni valore degli angoli iniziali, e che all'aumentare di λ il tempo di integrazione aumenta. Un'integrazione in precisione quadrupla che comprenda un numero soddisfacente di valori di ε impiegherebbe svariate ore per essere portata a termine con la strumentazione a disposizione. Questo costituisce un grosso limite ai valori di λ che è possibile spaziare, e in generale potrebbe portare a delle imprecisioni sui valori di ΔJ ; nonostante tutta l'analisi venga fortemente inficiata da questo problema, riusciremo a ottenere risultati coerenti con le aspettative. Data tale criticità, si è posto come limite $\varepsilon_1 = 5 \cdot 10^{-5}$, mentre ε_0 è stato tipicamente posto a $8 \cdot 10^{-2}$.

La forma della curva $\overline{\Delta J}(\lambda)$ dipenderà, a parità di J^0 , dalle proprietà di analiticità della perturbazione, e quindi dai valori di A e di τ . Mostriamo tre esempi, per $\tau = 1$ e $A = 2.1, 3, 4$:

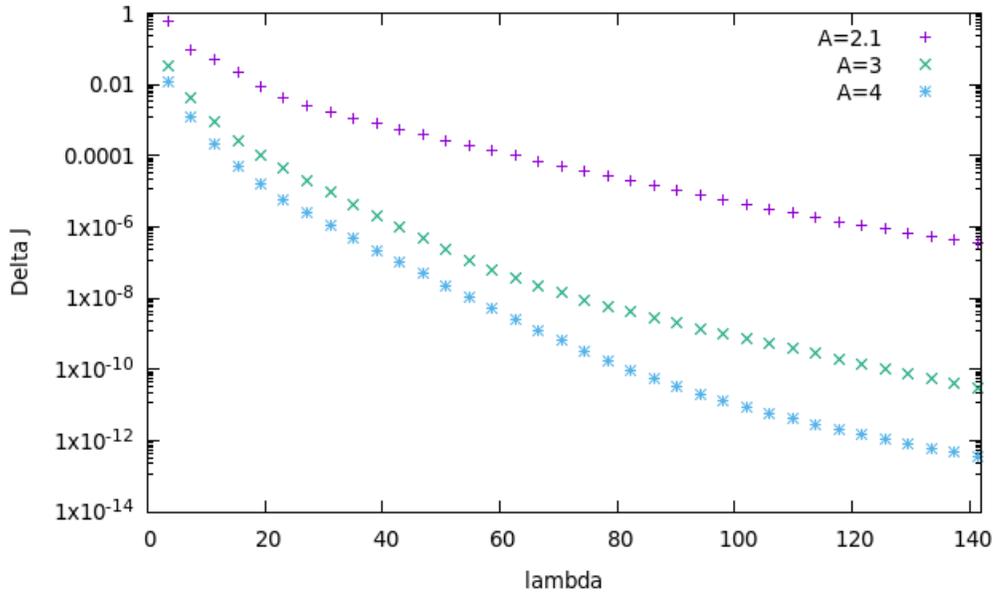


Figura 17: $\overline{\Delta J}$ in funzione di λ

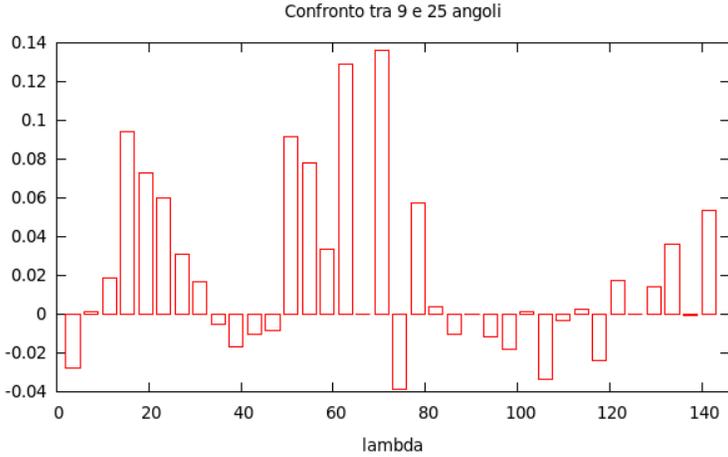
Seppur non sia immediato notarlo, la curva segue l'andamento atteso: osservando in special modo il caso $A = 2.1$, si nota che la curva è formata da parti all'incirca rettilinee che si raccordano in modo liscio. Si può anche notare che il caratteristico "gomito" della curva si sposta al variare di A ; ciò dipende dal diverso comportamento delle componenti di Fourier di g , che fanno sì che il coefficiente dominante della serie sia diverso a λ fissato.

Una delle prime analisi possibili è capire quanti valori degli angoli siano necessari per ottenere stabilità sul calcolo del massimo. Sono stati considerati m valori di φ_1^0 e φ_2^0 , equamente spazati in $[0; 2\pi)$, per un totale di m^2 dati iniziali. Supponiamo di considerare due diversi valori di m , ossia m_1 e m_2 , con $m_2 > m_1$; se $\overline{\Delta J}_1(\lambda)$ e $\overline{\Delta J}_2(\lambda)$ sono i risultati ottenuti rispettivamente con m_1 e m_2 , ci aspettiamo che in media $\overline{\Delta J}_2(\lambda) > \overline{\Delta J}_1(\lambda)$, poiché ad un maggior numero di angoli dovrebbe corrispondere una ricerca più accurata del massimo. Per verificare che effettivamente sia

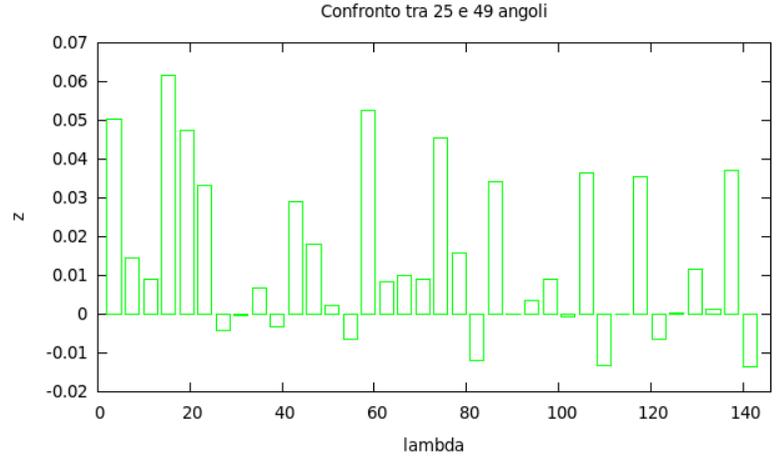
così, possiamo considerare lo scarto $\overline{\Delta J_2}(\lambda) - \overline{\Delta J_1}(\lambda)$, opportunamente normalizzato, per esempio alla media tra i due valori. Prenderemo quindi come riferimento:

$$z = 2 \frac{\overline{\Delta J_2}(\lambda) - \overline{\Delta J_1}(\lambda)}{\overline{\Delta J_1}(\lambda) + \overline{\Delta J_2}(\lambda)}$$

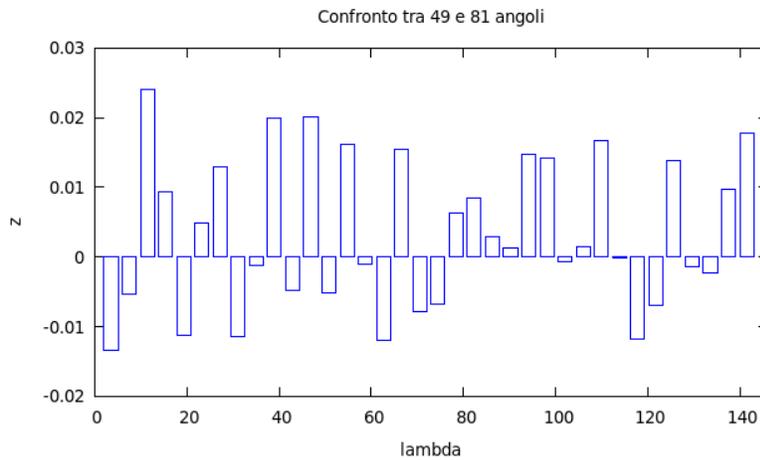
Di seguito mostriamo i risultati fissando $A = 3$ e $\tau = 1$, per $(m_1, m_2) = (3, 5), (5, 7), (7, 9)$:



(a) Confronto per $m_1 = 3, m_2 = 5$



(b) Confronto per $m_1 = 5, m_2 = 7$



(c) Confronto per $m_1 = 7, m_2 = 9$

Figura 18: Confronto di z al variare del numero di dati iniziali

È dunque visibile che effettivamente, in media, all'aumentare degli angoli il massimo aumenta. Altrettanto chiaramente lo scarto tra $\overline{\Delta J_1}$ e $\overline{\Delta J_2}$ diminuisce all'aumentare di m_1 e m_2 . Come prevedibile, sono comunque presenti scarti negativi, di entità però sempre inferiore rispetto a quelli positivi. Si nota che il massimo guadagno di "affidabilità" si ha nel passaggio da $m = 5$ a $m = 7$; volendo quindi trovare un compromesso tra una ricerca accurata del massimo e un tempo di calcolo non troppo lungo, si potrà ad esempio considerare $m = 6$ o $m = 7$.

7.2 Mappa simplettica

Abbiamo visto che un calcolo affidabile di $\overline{\Delta J}$ richiede un numero piuttosto alto di dati iniziali, il che aumenta molto i tempi di esecuzione e rende alquanto complicato ottenere risultati precisi per valori di λ superiori a 150.

Si può però procedere in un modo diverso per stimare $\overline{\Delta J}$, abbandonando il proposito di integrare il sistema hamiltoniano e percorrendo un'altra strada. È possibile infatti impiegare una mappa simplettica, ossia un diffeomorfismo che preservi la struttura simplettica della varietà su cui è definito e che al contempo rappresenti l'interazione descritta dal meccanismo di invarianza adiabatica.

Per definire la mappa, consideriamo l'insieme $A \times \mathbb{R} \times \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}$, su cui sono definite le variabili $(J_1, J_2, p, \varphi_1, \varphi_2, q)$. Definiamo quindi la funzione generatrice di seconda specie a variabili miste:

$$F_2(\tilde{J}_1, \tilde{J}_2, \tilde{p}, \varphi_1, \varphi_2, q) = \tilde{J}_1 \varphi_1 + \tilde{J}_2 \varphi_2 + \tilde{p} q + \frac{\tilde{J}_1^2}{2} + \frac{\tilde{J}_2^2}{2} + \tilde{p} + \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) g(\varphi_1, \varphi_2)$$

Tale funzione definisce una trasformazione simplettica Φ da $A \times \mathbb{R} \times \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}$ in se stesso tramite il sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} J_1 = \frac{\partial F_2}{\partial \varphi_1} = \tilde{J}_1 + \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_1}(\varphi_1, \varphi_2) \\ J_2 = \frac{\partial F_2}{\partial \varphi_2} = \tilde{J}_2 + \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_2}(\varphi_1, \varphi_2) \\ p = \frac{\partial F_2}{\partial q} = \tilde{p} + \varepsilon \frac{\partial f}{\partial q}(\sqrt{\varepsilon} q) g(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{\varphi}_1 = \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{J}_1} = \varphi_1 + \tilde{J}_1 \\ \tilde{\varphi}_2 = \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{J}_2} = \varphi_2 + \tilde{J}_2 \\ \tilde{q} = \frac{\partial F_2}{\partial \tilde{p}} = q + 1 \end{array} \right. \implies \left\{ \begin{array}{l} \tilde{J}_1 = J_1 - \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_1}(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{J}_2 = J_2 - \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_2}(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{p} = p - \varepsilon \frac{\partial f}{\partial q}(\sqrt{\varepsilon} q) g(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{\varphi}_1 = \varphi_1 + J_1 - \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_1}(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{\varphi}_2 = \varphi_2 + J_2 - \varepsilon f(\sqrt{\varepsilon} q) \frac{\partial g}{\partial \varphi_2}(\varphi_1, \varphi_2) \\ \tilde{q} = q + 1 \end{array} \right.$$

Si nota in particolare che la variabile temporale q viene incrementata di un'unità dopo l'applicazione della mappa. Ciò suggerisce di poter definire una dinamica discreta sull'insieme $A \times \mathbb{R} \times \mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}$ mediante l'iterazione della mappa Φ , che fa corrispondere al punto (J, p, φ, q) il punto $\Phi(J, p, \varphi, q)$. In modo intuitivo, si può notare che la mappa ha una forma "simile" al sistema differenziale hamiltoniano.

Vogliamo quindi studiare $\overline{\Delta J}(\lambda)$ tramite questa dinamica. La mappa fornisce un grosso vantaggio: la sua semplicità rende i tempi di esecuzioni estremamente rapidi anche in precisione quadrupla e permette calcoli per molti più valori di λ . Il procedimento è dunque del tutto analogo a quello precedente, con la facile sostituzione del Runge-Kutta con questa mappa. Mostriamo quindi di seguito degli esempi per $A = 3, 4, 5$ e $\tau = 1, 2$:

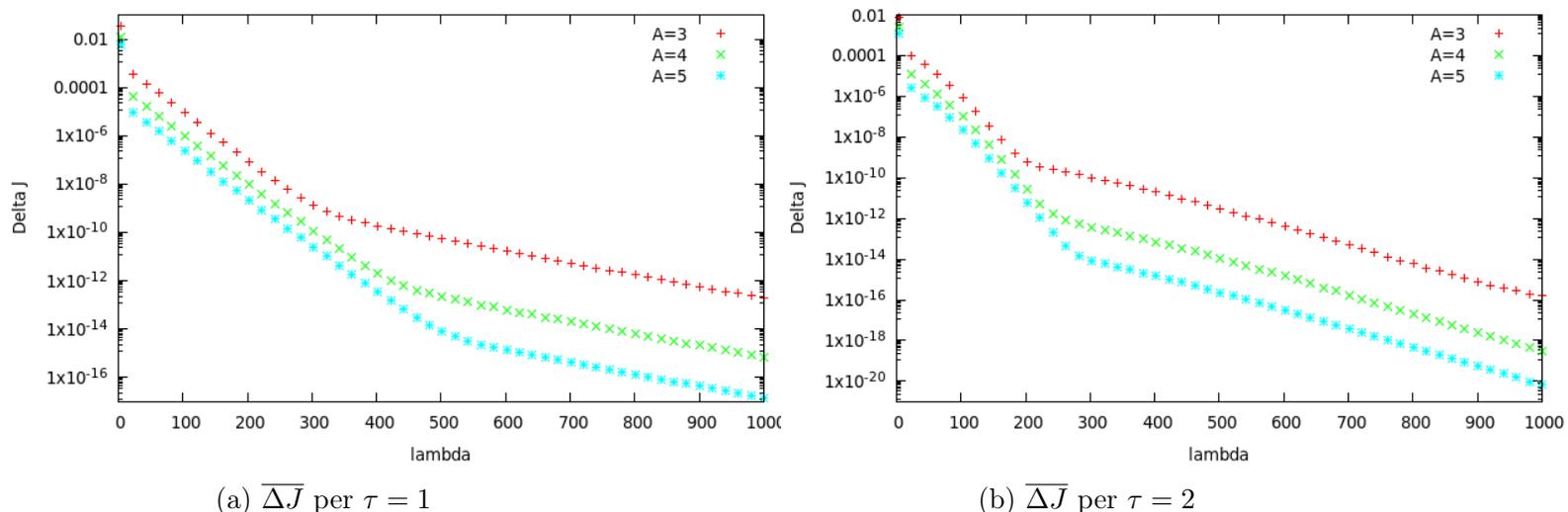


Figura 19: $\overline{\Delta J}$ per $\tau = 1, 2$ e $A = 3, 4, 5$

Appare chiaro che anche qui si presenta il caratteristico andamento a gomito riscontrato nelle sezioni precedenti, che si manifesta in modo molto più evidente. Va comunque osservato che i $\overline{\Delta J}$ qui trovati sono di diversi ordini grandezza superiori rispetto a quanto visto prima; inoltre, gli stessi gomiti risultano spostati rispetto a quanto si osservava per il Runge-Kutta. Possiamo quindi confermare che alcune proprietà caratteristiche del sistema vengono mantenute dalla dinamica discreta, però con sostanziali differenze.

È interessante osservare gli effetti di A e di τ sull'andamento di $\overline{\Delta J}$. Chiaramente al variare di questi due parametri i punti di raccordo si spostano, visto che all'aumentare di A traslano a destra, all'aumentare di τ a sinistra. Si può notare che nel caso $\tau = 2$ i vari tratti deviano dall'andamento rettilineo: con tutta probabilità ciò è dovuto alla correzione logaritmica a cui si è fatto riferimento prima, oltre al fatto che per bassi valori di λ intervengono molti coefficienti di Fourier che smussano ulteriormente la curva. Simulazioni per valori più alti di λ confermano che in effetti questa curvatura tende a scomparire.

7.3 Verifica della JLT

Volendo verificare la validità dell'approssimazione JLT, è ora necessario calcolare le componenti di Fourier di ΔJ . Risulterà particolarmente comodo calcolare i coefficienti di Fourier a partire dall'esperimento, e vedere che seguano l'andamento atteso dall'approssimazione medesima. Sostituiamo quindi l'integrale che definisce il coefficiente J_k con la sua approssimazione discreta, prendendo come angoli iniziali valori equispaziati del tipo $\varphi_1^0 = \frac{2\pi m}{M}, \varphi_2^0 = \frac{2\pi n}{N}$:

$$J_k \approx \frac{1}{M \cdot N} \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} \Delta J \left(\frac{2\pi m}{M}, \frac{2\pi n}{N} \right) e^{-ik \cdot \left(\frac{2\pi m}{M}, \frac{2\pi n}{N} \right)}$$

In [2] viene dimostrato che tale approssimazione corrisponde al calcolo di una somma infinita di termini J_k , e che ovviamente maggiore è il numero di dati iniziali maggiore è l'accordo tra l'approssimazione e il coefficiente effettivo; viene anche discusso il numero minimo di angoli iniziali necessario a separare le varie componenti di Fourier. Il caso esposto in [2] è tuttavia monodimensionale; in due dimensioni le cose sono più complicate. Ciò che si osserva dalle simulazioni è che i coefficienti dominanti in $\overline{\Delta J}$ richiedono un numero piuttosto basso di angoli iniziali affinché la componente di

Fourier venga determinata con sufficiente precisione; gli altri coefficienti di Fourier richiedono invece un numero più elevato di angoli, e se il numero di dati iniziali non è sufficiente, le varie componenti non sono ben separate. In ogni caso, $M = N = 7$ è un numero sufficiente per separare con ottima precisione qualsiasi componente, almeno per $\|k\|$ sufficientemente bassa. Si noti infine che in realtà la norma di J_k va moltiplicata per due, visto che nel passaggio dalla serie complessa a quella reale a $\overline{\Delta J}$ contribuiranno sia k che $-k$ in egual misura.

Siamo ora pronti per verificare almeno qualitativamente la JLT, limitandoci al range di λ visto nella sezione 7.1. Facciamo due esempi: il primo per $A = 4, \tau = 1$, il secondo per $A = 3, \tau = 2$. Nella prima coppia di grafici, le croci in nero rappresentano $\overline{\Delta J}$, mentre le linee colorate sono la norma dei coefficienti di Fourier che dominano nell'intervallo considerato; nella seconda coppia di grafici la linea continua rappresenta la curva ottenuta sommando le norme dei coefficienti dominanti:

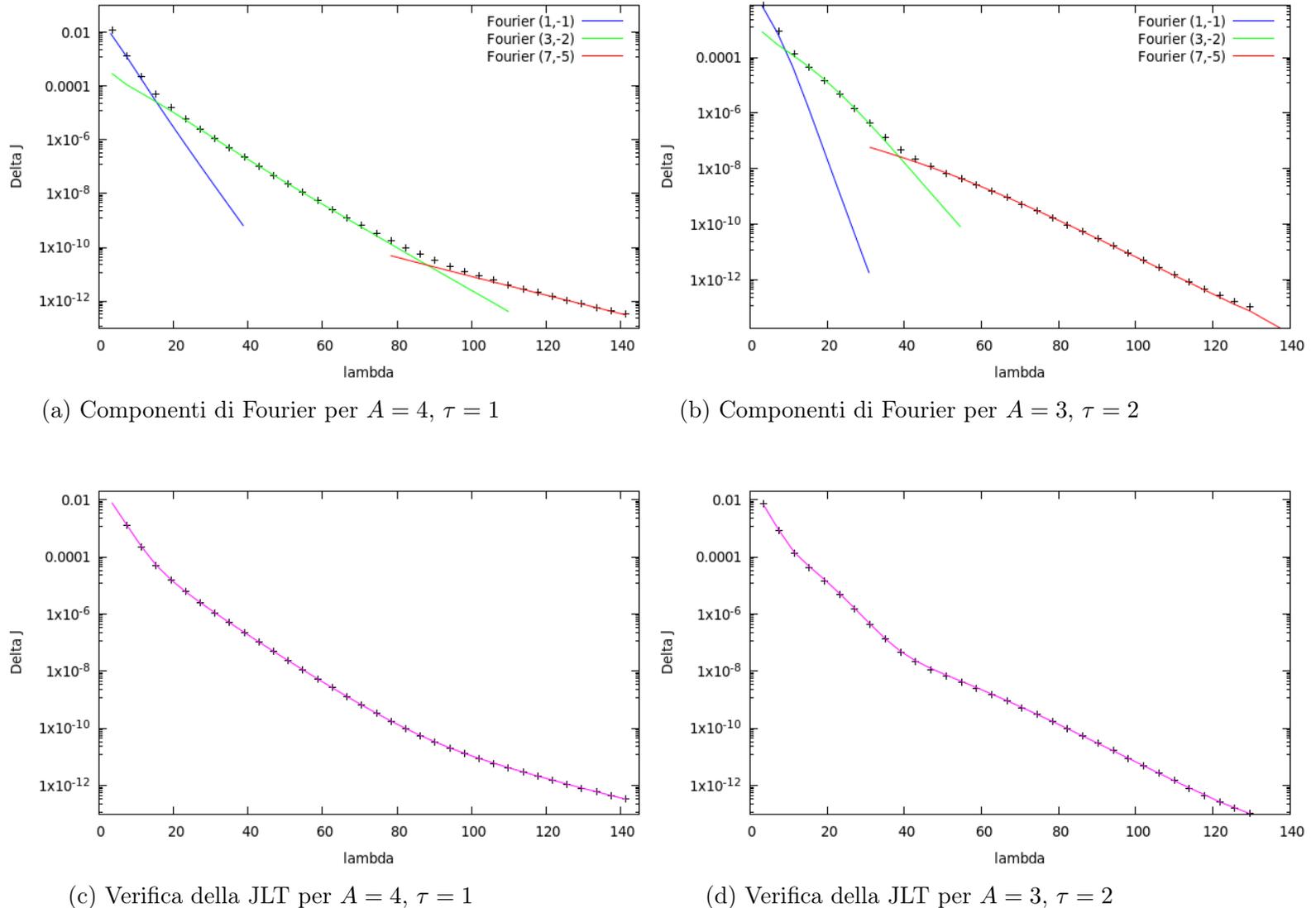


Figura 20: Verifica della JLT

Dai grafici possiamo evincere due cose: in primo luogo, l'andamento delle componenti di Fourier rispetta le attese ed è rettilineo nel primo caso, mentre nel secondo mostra la caratteristica curvatura logaritmica. In secondo luogo, vi è un buon accordo tra i punti di $\overline{\Delta J}$ e la somma delle norme, il che ci dà infine una conferma della validità della JLT.

8 Conclusioni

In questa tesi abbiamo esplorato numerosi concetti relativi alla teoria hamiltoniana delle perturbazioni, applicandola a un problema fisico specifico al fine di verificare l'ipotesi di Boltzmann.

Mediante la teoria delle funzioni generatrici, abbiamo potuto studiare la variazione delle azioni durante il moto, mostrando che esse possono essere coniugate tramite opportune trasformazioni ad altre quantità che variano sempre meno con il raffinarsi della procedura. In particolare, le nostre considerazioni ci hanno portato a concludere che, idealmente dopo un numero ottimale di passi, la variazione delle azioni è limitata unicamente al contributo della funzione f , mentre le oscillazioni intermedie tendono a scomparire. Questo consente di concentrare l'attenzione sulla variazione delle azioni tra l'istante iniziale e finale del moto, processo nel quale si rivela essenziale il contributo dell'approssimazione di Jeans-Landau-Teller. Abbiamo quindi verificato, nonostante numerosi limiti, la validità dell'approssimazione, mostrando che le componenti di Fourier degli scambi di energia sono esponenzialmente piccole in $1/\sqrt{\varepsilon}$, confermando quindi i risultati ottenuti in [1] e [2]. Abbiamo inoltre discusso la possibilità di impiegare delle mappe simplettiche per ottenere preziose informazioni circa la dinamica del sistema, il che consente di superare numerosi limiti legati alla precisione e ai tempi di esecuzione, giungendo a risultati per certi versi analoghi all'integrazione in maniera più agevole.

Riferimenti bibliografici

- [1] G. Benettin, A. Carati, F. Fassò, *On the conservation of adiabatic invariants for a system of coupled rotators*, Physica D 104 (1997) 253-268
- [2] G. Benettin, F. Fassò, *From Hamiltonian perturbation theory to symplectic integrators and back*, Applied Numerical Mathematics 29 (1999) 73-87
- [3] G. Benettin, J. Henrard, S. Ruskin, *Hamiltonian Dynamics Theory and Applications*, Springer-Verlag Heidelberg 2005
- [4] V. I. Arnold, *Metodi matematici della meccanica classica*, Editori Riuniti, Roma, II edizione, 1992
- [5] G. Benettin, *Applicazioni del teorema di Nekhoroshev alla meccanica celeste*, Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. 4-B (2001), n.1, p. 71-95
- [6] G. Benettin, A. Carati, G. Gallavotti, *A rigorous implementation of the Jeans - Landau - Teller approximation for adiabatic invariants*, 1997 Nonlinearity 10 479
- [7] L. Boltzmann, *On certain questions of the theory of gases*, Nature 51 (1895) 413
- [8] J.H. Jeans, *On the vibrations set up in molecules by collisions*, Phil. Mag. 6 (1903) 279
- [9] L. Landau, E. Teller, *On the theory of sound dispersion*, Physik. Z. Sowjetunion 10 (1936) (34); in: Collected Papers of L.D. Landau, ed. D. Ter Haar (Pergamon Press, Oxford, 1965) p. 147.