

Figura 11: (sinistra) Modi vibrazionali in una corda tesa. (destra) catena di punti materiali come nel problema di Fermi Pasta Ulam

## Parte IV

# Il problema di Fermi Pasta Ulam

La formulazione teorica della termodinamica viene spesso espresso tramite i postulati di Gibbs:

*Postulato 0 esistenza degli stati microscopici:* un sistema macroscopico è formato da un insieme di costituenti elementari che possono in principio essere descritti con le leggi fondamentali della fisica.

*Postulato 1 equilibrio:* all'equilibrio in un sistema chiuso tutte le configurazioni possibili (ossia con stessa energia  $E$ ) sono equiprobabili

*Postulato 2 evoluzione fuori dall'equilibrio:* fuori dall'equilibrio un sistema tende ad evolvere verso l'equilibrio.

Dai postulati 0 e 1 si trova facilmente la legge dei gas perfetti nel caso di un sistema di particelle non interagenti. E' interessante notare che la situazione di equilibrio del postulato 1 non può essere raggiunta se non c'è alcuna interazione tra le particelle.

Nel 1955 Fermi, Pasta e Ulam ebbero l'idea di usare uno dei primi computer a valvole (il Maniac I) per provare a verificare il raggiungimento della situazione di equilibrio, anche chiamata *equipartizione dell'energia*, nel caso di un sistema semplificato. La loro idea era di analizzare il moto di una corda elastica tesa posta in oscillazione. Per una tale corda fissata agli estremi nel caso di termini di forza solamente elastici l'equazioni del moto ammette modi normali di oscillazione come raffigurato in Fig. 11. Se ci limitiamo ad una corda ideale elastica e se al tempo  $t_0$  il moto è descritto solo da un certo modo (ad esempio quello fondamentale), allora tutti gli altri modi non contribuiranno mai al moto in istanti di tempo successivi. Viceversa se termini di forza non lineari (non-elastici) sono presenti allora ci si aspetta, dal secondo postulato, che dopo un certo tempo tutti i modi siano equiprobabili.

Per semplicità Fermi Pasta Ulam considerarono una catena unidimensionale di  $N$  punti materiali di massa  $m$  connessi tra di loro con delle molle ideali di costante elastica  $k$ . I punti 1 e  $N$  sono connessi con molle dello stesso tipo a due punti fissi. Indichiamo con  $x_i$  lo *spostamento* del punto materiale  $i$  rispetto alla sua posizione di equilibrio. Nel caso non ci siano termini non lineari le equazioni del moto sono date da:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - x_i) + k(x_{i-1} - x_i) = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \quad (174)$$

cerchiamo ora soluzioni armoniche del tipo:

$$x_i(t) = A e^{i(\bar{k}i - \omega t)} \quad (175)$$

dove assumiamo che la componente immaginaria abbia valore fisico. Sostituiamo e troviamo

$$\begin{aligned}
-m\omega^2 A e^{i(\tilde{k}i-\omega t)} &= kA \left( e^{i(\tilde{k}i-\omega t+\tilde{k})} - 2e^{i(\tilde{k}i-\omega t)} + e^{i(\tilde{k}i-\omega t-\tilde{k})} \right) \\
&= k \left( e^{i\tilde{k}} - 2 + e^{-i\tilde{k}} \right) \\
-m\omega^2 &= 2k \left( \cos \left( \frac{\tilde{k}}{2} \right) - 1 \right) = 2k \left( \cos^2 \left( \frac{\tilde{k}}{2} \right) - \sin^2 \left( \frac{\tilde{k}}{2} \right) - 1 \right) \\
\omega &= \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin \left( \frac{\tilde{k}}{2} \right)
\end{aligned} \tag{176}$$

i numeri d'onda  $\tilde{k}$  devono essere scelti in maniera da far sì che le condizioni agli estremi (o al contorno) siano soddisfatte: costruiamo un'onda stazionaria relativa al modo  $n$ :

$$x_{i,n}(t) = \frac{A_n}{2} \left[ e^{i(\tilde{k}i-\omega t)} - e^{i(-\tilde{k}i-\omega t)} \right] = A_n \sin \left( \frac{\tilde{k}}{2} i \right) e^{-i\omega t} \tag{177}$$

che possiamo scrivere come

$$x_{i,n}(t) = A_n \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin(-\omega t) \tag{178}$$

allora per soddisfare le condizioni al contorno scegliamo:

$$\tilde{k} = \frac{\pi n}{N+1} \quad n = 1, \dots, N \tag{179}$$

dove la frequenza del modo è data da:

$$\omega_n = \sqrt{\frac{4k}{m}} \sin \left( \frac{\pi n}{2(N+1)} \right) \tag{180}$$

il modo di oscillazione con  $n = 1$  viene chiamato modo fondamentale.

Fermi Pasta Ulam aggiunsero dei termini non lineari alle forze cosicché le equazioni del moto diventarono, nel caso di aggiunta di termini quadratici :

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) + \alpha \left[ (x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2 \right] \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \tag{181}$$

o nel caso di aggiunta di termini cubici:

$$\begin{cases} m \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = k(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) + \beta \left[ (x_{i+1} - x_i)^3 - (x_i - x_{i-1})^3 \right] \\ x_0 = 0 \\ x_{N+1} = 0 \end{cases} \tag{182}$$

Se al tempo  $t$  gli spostamenti sono dati da  $x_i(t)$ , il contributo  $C_n(t)$  del modo  $n$  è dato da:

$$C_n(t) = \sum_{i=1,N} x_i(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \tag{183}$$

dove abbiamo usato:

$$\sum_{i=1,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) = N \tag{184}$$

questo ci permette di scrivere:

$$x_i(t) = \sum_{n=1,N} C_n(t) \frac{1}{\sqrt{N}} \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \tag{185}$$

Fermi Pasta Ulam integrarono le equazioni del moto imponendo che il solo modo fondamentale contribuisca al tempo iniziale e si aspettavano di trovare che tutti i modi diventassero attivi dopo un certo periodo di equilibrizzazione. Invece trovarono che solo taluni modi contribuivano al moto e apparentemente dopo un certo tempo il moto tornava ad essere descritto principalmente dal solo modo iniziale. Per analizzare la partizione dell'energia, andarono a considerare il contributo energetico di ciascun modo tenendo conto solo dei termini cinetici ed elastici. Al tempo  $t$  l'energia del modo  $n$  è data da :

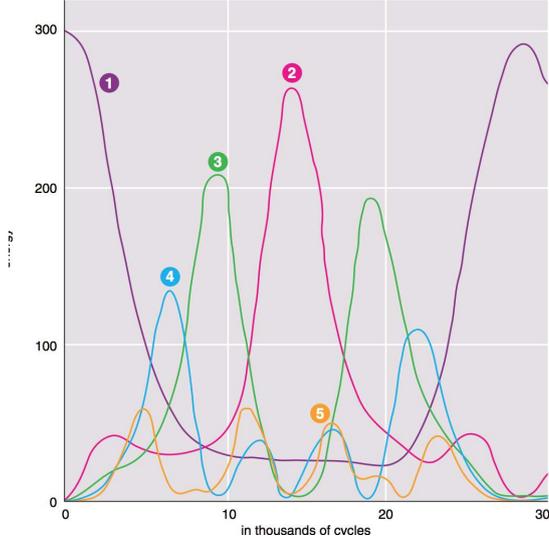


Figura 12: Evoluzione temporale della distribuzione di energia per il problema di Fermi Pasta Ulam. Sistema di 31 punti materiali,  $m = 1$ ,  $k = 1$ ,  $\alpha = \frac{1}{4}$ .

$$\begin{aligned}
 E_n(t) &= \frac{1}{2}m \sum_{i=1,N} \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 \frac{1}{N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) + \sum_{i=0,N} \frac{1}{2}k \frac{1}{N} \left( C_n(t) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) - C_n(t) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right)^2 \\
 E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}k (C_n(t))^2 \frac{1}{N} \times \\
 &\quad \left[ \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) \right) + \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right) - 2 \left( \sum_{i=0,N} \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} (i+1) \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \right) \right] \\
 E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2}k (C_n(t))^2 \times \\
 &\quad \left[ 2 - 2 \frac{1}{N} \left( \sum_{i=0,N} \sin^2 \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) + \sum_{i=0,N} \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) \right) \right] \\
 E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + k (C_n(t))^2 \left( 1 - \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} \right) \right) \\
 E_n(t) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dC_n(t)}{dt} \right)^2 + 2k (C_n(t))^2 \sin^2 \left( \frac{\pi n}{2(N+1)} \right)
 \end{aligned} \tag{186}$$

dove abbiamo usato la proprietà:

$$\sum_{i=0,N+1} \cos \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) \sin \left( \frac{\pi n}{N+1} i \right) = 0 \tag{187}$$

In Fig. 7 si vede che invece di equipartirsi, l'energia è data solo da alcuni modi. Inoltre si vede che apparentemente dopo un certo tempo il sistema ritorna (quasi) nelle condizioni iniziali. Tale comportamento continua in maniera ciclica per tempi successivi. Cosicché apparentemente sembra non si arrivi mai all'equipartizione. Studi successivi indicano che l'equilibrio viene raggiunto solo per tempo ancora maggiori. Il tempo per giungere all'equipartizione è più grande se il numero di punti materiali  $N$  è piccolo e se l'energia totale iniziale è piccola.

## Parte V

# Equazioni differenziali ordinarie con condizioni al contorno

## 17 Equazioni che studieremo

Vogliamo introdurre dei metodi che ci permettano, ad esempio, di trovare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria in una sola dimensione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (188)$$

Per ottenere un metodo più generale consideriamo equazioni differenziali del secondo ordine del tipo:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = f(x) \quad (189)$$
$$\begin{cases} \alpha_0 y(a) + \alpha_1 \frac{d}{dx} y(a) = \lambda_1 \\ \beta_0 y(b) + \beta_1 \frac{d}{dx} y(b) = \lambda_2 \end{cases}$$

dove la funzione incognita  $y(x)$  è definita nell'intervallo  $[a, b]$  e le condizioni al contorno sono disaccoppiate. Le condizioni al contorno vengono poi chiamate **di Dirichlet** se hanno la forma:

$$\begin{aligned} y(a) &= \alpha \\ y(b) &= \beta \end{aligned} \quad (190)$$

sono invece chiamate **di Neumann** se hanno la forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} y(a) &= \alpha \\ \frac{d}{dx} y(b) &= \beta \end{aligned} \quad (191)$$

## 18 Metodo delle differenze finite:

Vogliamo trasformare il problema della soluzione dell'equazione differenziale in un problema matriciale. Cominciamo col definire sull'intervallo  $[a, b]$  dell'asse  $x$  una griglia di  $N$  punti equispaziati, chiamiamo  $h$  il parametro di spaziatura e usiamo la notazione  $y_i = y(x_i)$  e  $y_i^{(n)} = \frac{d^n}{dx^n} y(x_i)$ . Notiamo che con tale scelta risulta:

$$\begin{aligned} y_1 &= y(a) \\ y_N &= y(b) \\ h &= \frac{b-a}{N-1} \end{aligned} \quad (192)$$

Possiamo quindi usare le formule di Eq. 24. Per  $i = 2, \dots, N-1$  abbiamo:

$$\begin{aligned} y_i^{(2)} &\approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \\ y_i^{(1)} &\approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \end{aligned} \quad (193)$$

allora per ogni  $i = 2, \dots, N-1$  otteniamo un'equazione lineare:

$$a_i \left( \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right) + b_i \left( \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right) + c_i y_i = f_i \quad (194)$$

che scriviamo come:

$$\left( \frac{a_i}{h^2} + \frac{b_i}{2h} \right) y_{i+1} + \left( -\frac{2a_i}{h^2} + c_i \right) y_i + \left( \frac{a_i}{h^2} - \frac{b_i}{2h} \right) y_{i-1} = f_i \quad (195)$$

Ora dobbiamo occuparci dei punti  $i = 1$  e  $i = N$ . Introduciamo i punti  $x_0$  e  $x_{N+1}$  e abbiamo le equazioni per le condizioni al contorno:

$$\begin{aligned}\alpha_0 y_1 + \alpha_1 \left( \frac{y_2 - y_0}{2h} \right) &= \lambda_1 \\ \beta_0 y_N + \beta_1 \left( \frac{y_{N+1} - y_{N-1}}{2h} \right) &= \lambda_2\end{aligned}\quad (196)$$

nel caso in cui  $\alpha_1 \neq 0$  risolvendo troviamo:

$$y_0 = \frac{\alpha_0 y_1 + \frac{\alpha_1 y_2}{2h} - \lambda_1}{\frac{\alpha_1}{2h}} = y_2 + 2h \frac{\alpha_0 y_1 - \lambda_1}{\alpha_1} \quad (197)$$

che possiamo utilizzare in Eq: 195:

$$\left( \frac{a_1}{h^2} + \frac{b_1}{2h} \right) y_2 + \left( -\frac{2a_1}{h^2} + c_1 \right) y_1 + \left( \frac{a_1}{h^2} - \frac{b_1}{2h} \right) \left( y_2 + 2h \frac{\alpha_0 y_1 - \lambda_1}{\alpha_1} \right) = f_1 \quad (198)$$

che scriviamo come:

$$2 \frac{a_1}{h^2} y_2 + \left( -\frac{2a_1}{h^2} + c_1 + \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right) \right) y_1 = f_1 + \frac{\lambda_1}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right) \quad (199)$$

mentre nel caso  $\alpha_1 = 0$  possiamo porre direttamente:

$$y_1 = \frac{\lambda_1}{\alpha_0} \quad (200)$$

Per  $i = N$  e  $\beta_1 \neq 0$  otteniamo:

$$y_{N+1} = y_{N-1} + 2h \frac{(-\beta_0 y_N + \lambda_2)}{\beta_1} \quad (201)$$

che ci permette di scrivere:

$$\left( \frac{a_N}{h^2} + \frac{b_N}{2h} \right) \left( y_{N-1} + 2h \frac{(-\beta_0 y_N + \lambda_2)}{\beta_1} \right) + \left( -\frac{2a_N}{h^2} + c_N \right) y_N + \left( \frac{a_N}{h^2} - \frac{b_N}{2h} \right) y_{N-1} = f_N \quad (202)$$

che scriviamo come:

$$\left( -\frac{2a_N}{h^2} + c_N - \frac{\beta_0}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right) \right) + 2 \frac{a_N}{h^2} y_{N-1} = f_N - \frac{\lambda_2}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right) \quad (203)$$

mentre nel caso  $\beta_1 = 0$  possiamo porre direttamente:

$$y_N = \frac{\lambda_2}{\beta_0} \quad (204)$$

E' utile *pensare* al problema come a un prodotto di matrici, definiamo il vettore  $\mathbf{Y}$ :

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} \quad (205)$$

ed il vettore  $\mathbf{F}$ , nel caso  $\alpha_1, \beta_1 \neq 0$ :

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_1 + \frac{\lambda_1}{\alpha_1} \left( \frac{2a_1}{h} - b_1 \right) \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \\ f_N - \frac{\lambda_2}{\beta_1} \left( \frac{2a_N}{h} + b_N \right) \end{pmatrix} \quad (206)$$

mentre nel caso  $\alpha_1 = \beta_1 = 0$  definiamo:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1}{\alpha_0} \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \\ \frac{\lambda_2}{\beta_0} \end{pmatrix} \quad (207)$$



che scriverò come

$$\begin{aligned}
 y_N &= y_1 \\
 a_N &= a_1 \\
 b_N &= b_1 \\
 c_N &= c_1 \\
 f_N &= f_1
 \end{aligned}
 \tag{218}$$

e che posso anche pensare come:

$$\begin{aligned}
 y_{i+N-1} &= y_i \\
 a_{i+N-1} &= a_i \\
 b_{i+N-1} &= b_i \\
 c_{i+N-1} &= c_i \\
 f_{i+N-1} &= f_i
 \end{aligned}
 \tag{219}$$

allora definisco:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_{N-1} \end{pmatrix}
 \tag{220}$$

e

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_{N-1} \end{pmatrix}
 \tag{221}$$

l'equazione da risolvere  $\mathbf{M} \cdot \mathbf{Y} = \mathbf{F}$  è definita dalla matrice:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} D_1 & U_1 & & & & L_1 \\ L_2 & D_2 & U_2 & & & \\ & \dots & \dots & \dots & & \\ & & L_i & D_i & U_i & \\ & & & \dots & \dots & \dots \\ U_{N-1} & & & & L_{N-1} & D_{N-1} \end{pmatrix}
 \tag{222}$$

in questo caso possiamo utilizzare le routine LAPACK per le matrici a bande.

## 19 Il problema agli autovalori

Nel caso della soluzioni dell'equazione di Schödinger stazionaria e di problemi analoghi dal punto di vista formale vogliamo trovare per  $x \in [a, b]$  gli (auto-)valori  $E$  e le (auto-)funzioni  $y(x)$  tali che:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = E y(x)
 \tag{223}$$

consideriamo condizioni al contorno del tipo:

$$\begin{cases} y(a) = 0 \\ y(b) = 0 \end{cases}
 \tag{224}$$

possiamo trasformare il problema in un problema matriciale come visto prima, chiamiamo:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_2 \\ \dots \\ \dots \\ y_{N-1} \end{pmatrix}
 \tag{225}$$

e poniamo

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} D_2 & U_2 & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & & \\ & L_i & D_i & U_i & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & L_{N-1} & D_{N-1} \end{pmatrix} \quad (226)$$

con:

$$L_i = \left( \frac{a_i}{h^2} - \frac{b_i}{2h} \right) \quad (227)$$

$$D_i = \left( -\frac{2a_i}{h^2} + c_i \right) \quad (228)$$

e

$$U_i = \left( \frac{a_i}{h^2} + \frac{b_i}{2h} \right) \quad (229)$$

quindi il problema agli autostati-autovalori che dobbiamo risolvere è:

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{Y} = E\mathbf{Y} \quad (230)$$

questo problema è facilmente risolvibile con i metodi di algebra lineari per le matrici tridiagonali. Oltretutto non è necessario salvare in memoria tutta la matrice ma soltanto la diagonale e la diagonale superiore ed inferiore.

## 19.1 Il metodo Shooting e quello di Numerov

Consideriamo il problema agli autovalori:

$$a(x) \frac{d^2}{dx^2} y(x) + b(x) \frac{d}{dx} y(x) + c(x) y(x) = E y(x) \quad (231)$$

con le condizioni al contorno:

$$\begin{cases} y(a) = 0 \\ y(b) = 0 \end{cases} \quad (232)$$

il metodo di shooting per trovare le coppie autostati-autovalori consiste nello scegliere un certo valore per  $y^{(1)}(a)$  e poi risolvere un'equazione differenziale ordinaria alle condizioni iniziali. Usiamo il formalismo di Sezione 8:

$$\mathbf{y}(x) = \begin{pmatrix} y(x) \\ \frac{d}{dx} y(x) \end{pmatrix} \quad (233)$$

e

$$\mathbf{f}(x) = \begin{pmatrix} \frac{d}{dx} y(x) \\ -\frac{b(x)}{a(x)} \frac{d}{dx} y(x) + \frac{(E-c(x))}{a(x)} y(x) \end{pmatrix} \quad (234)$$

questo ci permette dato un valore per  $E$  di propagare  $y(x)$  da  $a$  a  $b$ . L'  $E$  usato nella propagazione sarà un buon autovalore solo se la condizione  $y(b) = 0$  è soddisfatta. In tal caso  $E$  sarà un autovalore e  $y(x)$  sarà la corrispondente auto-funzione. E' facile mostrare che la scelta del  $y^{(1)}(a)$  non incide sugli  $E$  trovati ma solo sulla norma delle autofunzioni  $y(x)$ .

Nel caso particolare di un'equazione analoga a quella di Schrödinger:

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) + c(x) y(x) = E y(x) \quad (235)$$

che posso scrivere come:

$$y_i^{(2)} = (E - c_i) y_i \quad (236)$$

Il metodo di Numerov permette di propagare  $y(x)$  in maniera veloce e precisa. Si parte dallo sviluppo in serie di Taylor

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + y_i^{(1)} h + \frac{1}{2} y_i^{(2)} h^2 + \frac{1}{6} y_i^{(3)} h^3 + \frac{1}{24} y_i^{(4)} h^4 + \frac{1}{120} y_i^{(5)} h^5 + O(h^6) \\ y_{i-1} = y_i - y_i^{(1)} h + \frac{1}{2} y_i^{(2)} h^2 - \frac{1}{6} y_i^{(3)} h^3 + \frac{1}{24} y_i^{(4)} h^4 - \frac{1}{120} y_i^{(5)} h^5 + O(h^6) \end{cases} \quad (237)$$

ora sommo le due equazione membro a membro:

$$y_{i+1} + y_{i-1} = 2y_i + y_i^{(2)}h^2 + \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^4 + O(h^6) \quad (238)$$

da cui ricavo:

$$y_i^{(2)} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^2 + O(h^4) \quad (239)$$

ora uso Eq.236 e trovo:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{1}{12}y_i^{(4)}h^2 + O(h^4) = (E - c_i)y_i \quad (240)$$

ora scrivo  $y_i^{(4)}$  come:

$$y_i^{(4)} = \frac{y_{i+1}^{(2)} - 2y_i^{(2)} + y_{i-1}^{(2)}}{h^2} = \frac{(E - c_{i+1})y_{i+1} - 2(E - c_i)y_i + (E - c_{i-1})y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (241)$$

e inserisco nella precedente equazione:

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{(E - c_{i+1})y_{i+1} - 2(E - c_i)y_i + (E - c_{i-1})y_{i-1}}{12} + O(h^4) = (E - c_i)y_i \quad (242)$$

ora risolvo per  $y_{i+1}$  e trovo il propagatore cercato:

$$y_{i+1} = \frac{1}{12 - (E - c_{i+1})h^2} [(10h^2(E - c_i) + 24)y_i + ((E - c_{i-1})h^2 - 12)y_{i-1}] + O(h^4) \quad (243)$$

## Parte VI

# Equazioni differenziali alle derivate parziali

Questa parte del corso è dedicata ad alcune delle equazioni differenziali alle derivate parziali di solo tipo lineare che rivestono particolare importanza nello studio della fisica.

## 20 Equazione di Poisson

Uno dei casi più frequenti in cui siamo richiesti di risolvere un'equazione di Poisson è quello del calcolo di un campo elettrico data una distribuzione di carica  $\rho(\mathbf{r})$ . Le equazioni di Maxwell pongono:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\epsilon_0} \rho(\mathbf{r}) \quad (244)$$

invece di risolvere direttamente questo problema andiamo a trovare il potenziale elettrostatico  $\phi(\mathbf{r})$  tale che  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$ , tramite la soluzione dell'equazione di Poisson:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = -\frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad (245)$$

dove per il potenziale dobbiamo considerare delle condizioni al contorno.

Per avere un formalismo più generale consideriamo la soluzione del problema:

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) \quad (246)$$

con  $\mathbf{r}$  all'interno di un volume  $\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y] \times [a_z, b_z]$ . Le condizioni al contorno sono del tipo  $\phi(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r})$  per  $\mathbf{r}$  sul bordo del volume  $\Omega$  che indichiamo con  $\partial\Omega$ . Scriviamo ora il problema in termini della coordinate di  $\mathbf{r}$ ,  $(x, y, z)$ :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\phi(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\phi(x, y, z) = f(x, y, z) & (x, y, z) \in \Omega \\ \phi(x, y, z) = g(x, y, z) & (x, y, z) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (247)$$

Ora discretizziamo i tre intervalli  $[a_x, b_x], [a_y, b_y], [a_z, b_z]$ , con un numero di punti  $N_x, N_y, N_z$  e distanza tra punti  $h_x, h_y, h_z$ , rispettivamente.

$$\begin{cases} x_1 & = a_x \\ x_{N_x} & = b_x \\ h_x = \frac{b_x - a_x}{N_x - 1} & \\ \\ y_1 & = a_y \\ y_{N_y} & = b_y \\ h_y = \frac{b_y - a_y}{N_y - 1} & \\ \\ z_1 & = a_z \\ z_{N_z} & = b_z \\ h_z = \frac{b_z - a_z}{N_z - 1} & \end{cases} \quad (248)$$

Indichiamo con  $\phi_{ijk} = \phi(x_i, y_j, z_k)$  Abbiamo che le condizioni al contorno vengono espresse da:

$$\begin{cases} \phi_{1ij} & = g_{1ij} \\ \phi_{N_x ij} & = g_{N_x ij} \\ \phi_{i1j} & = g_{i1j} \\ \phi_{iN_y j} & = g_{iN_y j} \\ \phi_{ij1} & = g_{ij1} \\ \phi_{ijN_z} & = g_{ijN_z} \end{cases} \quad \forall i, j \quad (249)$$

l'equazione di Poisson viene allora scritta usando le note formule per le derivate:

$$\frac{\phi_{i+1jk} - 2\phi_{ijk} + \phi_{i-1jk}}{h_x^2} + \frac{\phi_{ij+1k} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ij-1k}}{h_y^2} + \frac{\phi_{ijk+1} - 2\phi_{ijk} + \phi_{ijk-1}}{h_z^2} = f_{ijk} \quad (250)$$

Possiamo facilmente trasformare questo problema in un problema matriciale. Per prima cosa introduciamo un nuovo indice unico  $l \in [0, N_x N_y N_z - 1]$  per individuare i punti  $(i, j, k)$ :

$$(i, j, k) \rightarrow l = (k - 1) N_x N_y + (j - 1) N_x + (i - 1) \quad (251)$$

la trasformazione inversa è data da:

$$l \rightarrow (i, j, k) = \begin{cases} k & = \text{floor}(l / (N_x N_y)) + 1 \\ j & = \text{floor}((l - (k - 1) N_x N_y) / N_x) + 1 \\ i & = l - (k - 1) N_x N_y - (j - 1) N_x + 1 \end{cases} \quad (252)$$

Dove con  $\text{floor}(x)$  con  $x > 0$  intendiamo il numero intero minore o uguale a  $x$  più grande possibile. Quindi possiamo scrivere la funzione cercata nei punti del nostro reticolo come  $\phi_l$  e analogamente scriveremo  $f_l$ . Introduciamo la matrice  $M$ , che definiamo in questo modo, sia  $l \longleftrightarrow (i, j, k)$  e  $m \longleftrightarrow (i', j', k')$  se  $l$  non appartiene al bordo poniamo:

$$M_{lm} = \begin{cases} \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i + 1, j, k) \\ -2 \left( \frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) & (i', j', k') = (i, j, k) \\ \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i - 1, j, k) \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j + 1, k) \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j - 1, k) \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k + 1) \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k - 1) \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (253)$$

inoltre se  $l$  individua un punto sul bordo poniamo

$$\begin{cases} M_{ll} = 1 \\ M_{lm} = 0 \end{cases} \quad m \neq l \quad (254)$$

In questa maniera il mio problema viene scritto come:

$$\sum_m M_{lm} \phi_m = (f_l + b_l) \quad (255)$$

dove il vettore  $\mathbf{b}$  è definito da:

$$\begin{cases} b_l = g_l & l \in \partial\Omega \\ b_l = 0 & l \notin \partial\Omega \end{cases} \quad (256)$$

per risolverlo una possibilità è quella di invertire la matrice  $M$ :

$$\phi_l = \sum_m M_{lm}^{-1} (f_l + b_l) \quad (257)$$

Per invertire la matrice posso usare le routines di algebra lineare come quelle della libreria LAPACK. Tale metodo però potrebbe non essere fattibile nel caso che la dimensione di  $M$  ossia  $N_x N_y N_z$  sia grande. Ad esempio se  $N_x = N_y = N_z = 100$  per allocare in memoria la matrice in doppia precisione ho bisogno di  $100^6 * 8 \text{ bytes} = 7.45 \text{ TB}$ .

Per ovviare a questo problema vengono usati **algoritmi iterativi**. Questi sono basati sul fatto che anche se immagazzinare  $M$  in memoria è non possibile è (ancora) possibile calcolare  $\sum_m M_{lm} \phi_m$ .

## 20.1 Metodo di Jacobi e di Gauss-Seidel

Un metodo largamente usato è quello di Gauss-Seidel. Partiamo dal problema:

$$M \cdot \phi = \mathbf{f} \quad (258)$$

in cui  $\phi$  è l'incognita e introduciamo la matrice  $A$  definita come:

$$\begin{cases} A_{ll} = \frac{1}{M_{ll}} \\ A_{lm} = 0 \end{cases} \quad m \neq l \quad (259)$$

allora otteniamo:

$$AM \cdot \phi = A \cdot \mathbf{f} \quad (260)$$

dove:

$$(AM)_{lm} = \begin{cases} 1 & l = m \\ \frac{M_{lm}}{M_{ll}} & l \neq m \end{cases} \quad (261)$$

introduciamo la matrice  $\tilde{M}$ :

$$\tilde{M}_{lm} = \begin{cases} 0 & l = m \\ -\frac{M_{lm}}{M_{ll}} & l \neq m \end{cases} \quad (262)$$

ed il vettore

$$\tilde{f}_l = \frac{f_l}{M_{ll}} \quad (263)$$

Il nostro problema allora diventa:

$$\phi = \tilde{M}\phi + \tilde{\mathbf{f}} \quad (264)$$

possiamo allora provare a risolvere il problema iterando. Parto da:

$$\phi^{(0)} = \tilde{\mathbf{f}} \quad (265)$$

poi pongo:

$$\phi^{(1)} = \tilde{M}\phi^{(0)} + \tilde{\mathbf{f}} \quad (266)$$

e così via per le iterazioni successive:

$$\phi^{(i+1)} = \tilde{M}\phi^{(i)} + \tilde{\mathbf{f}} \quad (267)$$

se ad una certa iterazione viene raggiunta la *convergenza* ossia  $\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)}$  (in pratica considererò un valore soglia per il modulo del vettore differenza  $\phi^{(i+1)} - \phi^{(i)}$ ) allora tale vettore è proprio la soluzione che cerchiamo. Formalmente possiamo anche scrivere:

$$\phi = \frac{1}{\mathbb{I} - \tilde{M}} \tilde{\mathbf{f}} = \left( \mathbb{I} + \tilde{M} + \tilde{M}^2 + \tilde{M}^3 + \dots \right) \tilde{\mathbf{f}} = \tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^2\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^3\tilde{\mathbf{f}} + \tilde{M}^4\tilde{\mathbf{f}} + \dots \quad (268)$$

quindi ritrovando i termini che calcoliamo con il procedimento iterativo. Questo algoritmo prende il nome di metodo di Jacobi.

Si può renderlo più veloce aggiornando un elemento di matrice dopo l'altro ossia rimpiazzando Eq. 267:

$$\phi_j^{(i+1)} = \sum_{k < j} \tilde{M}_{jk} \phi_k^{(i+1)} + \sum_{l \geq j} \tilde{M}_{jl} \phi_l^{(i)} \tilde{f}_l \quad (269)$$

Tale variante prende il nome di algoritmo di Gauss-Seidl.

## 20.2 Il Metodo di Richardson

Un altro metodo iterativo frequentemente usato è quello di Richardson, come nel caso precedente vogliamo risolvere:

$$M \cdot \phi = \mathbf{f} \quad (270)$$

Iniziamo l'algoritmo ciclico scegliendo un coefficiente  $\alpha > 0$  e scegliamo  $\phi^{(0)}$  in maniera casuale. Poi iteriamo con la regola:

$$\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)} + \alpha \left( \mathbf{f} - M \cdot \phi^{(i)} \right) \quad (271)$$

Si vede subito che nel caso si giunga a convergenza ossia se vale  $\phi^{(i+1)} = \phi^{(i)}$  allora anche l'equazione 270 è soddisfatta.

### 20.3 Relazione con problema di minimizzazione

Risolvere Eq. 270 è equivalente a trovare il minimo del funzionale che scriviamo usando la notazione di Dirac per i vettori  $|\phi\rangle$ :

$$E(|\phi\rangle) = \langle\phi|M|\phi\rangle - (\langle f|\phi\rangle + \langle\phi|f\rangle) \quad (272)$$

infatti la condizione di minimo viene scritta come

$$\frac{\partial E(|\phi\rangle)}{\partial\langle\phi|} = M|\phi\rangle - f = 0 \quad (273)$$

Per il problema generale di trovare il minimo di una funzione reale generica  $e(\mathbf{x})$ , con  $\mathbf{x}$  appartenente ad un opportuno spazio vettoriale, uno dei metodi più semplici da implementare anche se generalmente alquanto lento è quello del *steepest descent*. Cominciamo con una prima scelta  $\mathbf{x}^{(0)}$  poi applichiamo il seguente algoritmo

1. calcoliamo il gradiente  $\mathbf{g}^{(i)} = -\frac{\partial e(\mathbf{x}^{(i)})}{\partial\mathbf{x}}$
2. consideriamo la funzione reale  $f(\lambda) = e(\mathbf{x}^{(i)} + \lambda\mathbf{g}^{(i)})$  con  $\lambda \in \mathbb{R}$
3. calcolo  $\lambda_{min}$  che minimizza  $f(\lambda)$  imponendo  $\frac{df}{d\lambda} = 0$
4. troviamo il nuovo vettore  $\mathbf{x}$  con  $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \lambda_{min}\mathbf{g}^{(i)}$
5. Torniamo al punto 1

Vediamo che Richardson corrisponde alla minimizzazione steepest-descent con la scelta di porre sempre  $\lambda_{min} = \alpha$ .

## 21 Equazione di Schrödinger stazionaria a tre dimensioni

L'equazione di Schrödinger stazionaria ha la forma:

$$\Delta\psi(\mathbf{r}) + c(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (274)$$

consideriamo il caso in cui  $\mathbf{r}$  appartenga al volume  $\Omega$  descritto in Sezione 20 con condizioni al contorno  $\psi(\mathbf{r}) = 0$   $\mathbf{r} \in \partial\Omega$ , trasformiamo il problema in un problema matriciale usando le definizioni della Sezione 20 definiamo la matrice  $H_{lm}$   $l, m \notin \partial\Omega$  di dimensione  $(N_x - 2)(N_y - 2)(N_z - 2)$ , con  $i \in [2, N_x - 1]$ ,  $j \in [2, N_y - 1]$ ,  $k \in [2, N_z - 1]$  e abbiamo  $l \longleftrightarrow (i, j, k)$  e  $m \longleftrightarrow (i', j', k')$

$$H_{lm} = \begin{cases} \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i + 1, j, k), \quad i + 1 \neq N_x \\ -2\left(\frac{1}{h_x^2} + \frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}\right) + c_l & (i', j', k') = (i, j, k) \\ \frac{1}{h_x^2} & (i', j', k') = (i - 1, j, k) \quad i - 1 \neq 0 \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j + 1, k) \quad j + 1 \neq N_y \\ \frac{1}{h_y^2} & (i', j', k') = (i, j - 1, k) \quad j - 1 \neq 0 \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k + 1) \quad k + 1 \neq N_z \\ \frac{1}{h_z^2} & (i', j', k') = (i, j, k - 1) \quad k - 1 \neq 0 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (275)$$

il nostro problema diventa:

$$\sum_m H_{lm}\psi_m = E\psi_l \quad (276)$$

dove voglio trovare le coppie  $(\psi, E)$  di autofunzioni-autovalori soluzioni del problema tali che le  $\psi$  trovate siano ortogonali tra di loro. Per la soluzione di questo problema posso usare gli algoritmi di algebra lineare per diagonalizzare la matrice  $H$  nel caso la sua dimensione non sia proibitiva (ad esempio potrò usare le routine LAPACK) altrimenti potrò ricorrere ad algoritmi iterativi.

## 22 Formulazione del problema agli autovalori/autostati come problema di minimo

Trovare lo stato fondamentale di  $H$  risolvendo l' Eq. 276 è equivalente a trovare il minimo rispetto a  $|\psi\rangle$  del seguente funzionale che scriviamo usando la notazione di Dirac:

$$E(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle \quad (277)$$

soggetto alla condizione di (orto-) normalizzazione

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad (278)$$

Possiamo trattare tale vincolo inserendo un moltiplicatore di Lagrange  $\lambda$  e minimizzando rispetto a  $|\psi\rangle$  e  $\lambda$  il funzionale:

$$E'(|\psi\rangle) = \langle\psi|H|\psi\rangle - \lambda(\langle\psi|\psi\rangle - 1) \quad (279)$$

Infatti nel minimo devono essere soddisfatte le seguenti equazioni:

$$\begin{cases} \frac{\partial E'}{\partial \langle\psi|} = 0 \\ \frac{\partial E'}{\partial \lambda} = 0 \\ H|\psi\rangle - \lambda|\psi\rangle = 0 \\ \langle\psi|\psi\rangle - 1 = 0 \end{cases} \quad (280)$$

quindi nel minimo il valore del moltiplicatore di Lagrange è pari all'energia dello stato fondamentale. Per trovare il minimo l'algoritmo più semplice è lo steepest-descent, poniamo  $\alpha$  parametro reale costante (es. 0.1):

1. Partiamo da guess iniziale  $\psi^{(0)}$  che soddisfa  $\langle\psi^{(0)}|\psi^{(0)}\rangle = 1$
2. Calcoliamo per la  $i$ -esima iterazione il gradiente cambiato di segno  $|G(\lambda)\rangle = -H|\psi^{(i)}\rangle + \lambda|\psi^{(i)}\rangle$
3. Scegliamo  $\lambda$  in maniera che  $|\psi^{(i)}\rangle + \eta|G(\lambda)\rangle|^2 = 1 + O(\eta^2)$  che porge  $\lambda^{(i)} = \langle\psi^{(i)}|H|\psi^{(i)}\rangle$
4. Poniamo  $|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle = |\psi^{(i)}\rangle + \alpha|G(\lambda^{(i)})\rangle$
5. Normalizziamo  $|\psi^{(i+1)}\rangle = \frac{|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle}{\sqrt{\langle\tilde{\psi}^{(i+1)}|\tilde{\psi}^{(i+1)}\rangle}}$
6. Torniamo al punto 2

Tale procedura permette il calcolo dello stato fondamentale. Possiamo trovare gli autostati di autoenergia via via maggiore proiettando ad ogni passo i vettori coinvolti sul sottospazio ortogonale al sottospazio degli autostati che sono già stati calcolati.

## 23 Equazione di diffusione

Consideriamo il solo caso dell'equazione di diffusione con costante di diffusione costante:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) = D\Delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (281)$$

per semplicità ci limitiamo al caso unidimensionale:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x, t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\rho(x, t) \quad (282)$$

con  $x \in [a, b]$  e con le condizioni al contorno  $\rho(a, t) = g_a$  e  $\rho(b, t) = g_b$  e con le condizioni iniziali  $\rho(x, t_0) = \rho^0(x)$ . Come al solito introduciamo una griglia di  $N$  punti su  $[a, b]$  con spaziatura  $h$ , in maniera tale che  $x_1 = a$ ,  $x_N = b$  e  $h = (b - a)/(N - 1)$ . Inoltre introduciamo una griglia sull'asse temporale di istanti di tempo con spaziatura  $\Delta t$ , e poniamo:

$$t_n = t_0 + n\Delta t \quad (283)$$

e

$$\rho_i^{(n)} = \rho(x_i, t_n) \quad (284)$$

Per discretizzare il termine a sinistra dell'uguale in Eq. 282 possiamo scegliere tra i propagatori che abbiamo introdotto in Sezione 8. La scelta più semplice è quella di utilizzare il metodo di Eulero esplicito:

$$\begin{aligned}\rho_i^{(n+1)} &= \rho_i^{(n)} + D \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, t) \right|_{\substack{x = x_i \\ t = t_n}} \times \Delta t \\ \rho_i^{(n+1)} &= \rho_i^{(n)} + D \left( \frac{\rho_{i+1}^{(n)} - 2\rho_i^{(n)} + \rho_{i-1}^{(n)}}{h^2} \right) \Delta t\end{aligned}\quad (285)$$

Si vede e si può mostrare analiticamente che tale algoritmo diventa instabile se

$$\frac{D\Delta t}{h^2} > \frac{1}{2} \quad (286)$$

limitando quindi la scelta del time-step a valori piccoli. Tale relazione può essere argomentata ( e dimostrata) nel seguente modo:

la propagazione temporale di  $\rho(\mathbf{r}, t)$  può essere scritta come:

$$\rho(\mathbf{r}, t') = \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t' - t) \rho(\mathbf{r}', t) \quad (287)$$

con  $G$  funzione di Green per l'equazione di diffusione:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t' - t) = \left( \frac{1}{4\pi D(t' - t)} \right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}{4D(t' - t)}} \quad (288)$$

con  $N$  dimensione dello spazio Cartesiano di  $\mathbf{r}$ . Tale funzione è quindi una Gaussiana, normalizzata nello spazio  $N$  dimensionale, la cui ampiezza varia come  $\sigma = \sqrt{2D(t' - t)}$ . Con l'algoritmo di Eulero esplicito (vediamo qui il caso unidimensionale) il valore di  $\rho_i^{(n)}$  dipende solamente dalla funzione  $\rho$  al tempo  $t_{n-1}$  entro una distanza  $h$ . Precisamente dipende solo da  $\rho_{i-1}^{(n-1)}, \rho_i^{(n-1)}, \rho_{i+1}^{(n-1)}$ . Se in  $\Delta t$  la nostra Gaussiana 'avanza' per più di  $h$  allora il valore di  $\rho_i^{(n)}$  dovrà dipendere anche dal valore di  $\rho^{(n-1)}$  in punti più distanti. Per avere convergenza bisognerà che:

$$\sqrt{2D\Delta t} < h \quad (289)$$

, elevando al quadrato si trova Eq. 289

Per ovviare a questo problema si può usare come propagatore il metodo di Eulero implicito, infatti con questo propagatore il valore di  $\rho_i^{(n)}$  dipende da tutta la  $\rho^{(n-1)}$ :

$$\rho_i^{(n+1)} = \rho_i^{(n)} + D \left( \frac{\rho_{i+1}^{(n+1)} - 2\rho_i^{(n+1)} + \rho_{i-1}^{(n+1)}}{h^2} \right) \Delta t \quad (290)$$

ora però risulta meno immediato calcolare  $\rho^{(n+1)}$  e dobbiamo ricorrere ad una formulazione matriciale. Introduciamo la matrice :

$$M_{ij} = \begin{cases} \frac{D}{h^2} \Delta t & j = i + 1, i \neq 1, i \neq N \\ -\frac{2D}{h^2} \Delta t & j = i, i \neq 1, i \neq N \\ \frac{D}{h^2} \Delta t & j = i - 1, i \neq 1, i \neq N \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (291)$$

che risulta essere tridiagonale. In forma matriciale il nostro problema diviene:

$$\rho^{(n+1)} = \rho^{(n)} + M \cdot \rho^{(n+1)} \Delta t \quad (292)$$

che posso scrivere come:

$$(\mathbb{I} - M) \cdot \rho^{(n+1)} = \rho^{(n)} \quad (293)$$

risolvo questo equazione con i metodo dell'algebra lineare o usando metodi iterativi.

## 24 Equazione delle onde

Vogliamo trovare soluzioni all'equazione delle onde in una dimensione in un mezzo non dispersivo:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \quad (294)$$

nel caso siano date le condizioni iniziali  $u(x, t_0)$  e  $\frac{\partial}{\partial t} u(x, t_0)$ . Cominciamo col introdurre una griglia equispaziata sull'asse  $x$  dove  $h$  è la spaziatura ed una griglia equispaziata sull'asse  $t$  dove  $\Delta t$  è la spaziatura. Indichiamo con  $u_i^{(n)} = u(x_i, t_n)$ . La formula di Eq. 24 permette di scrivere

$$\frac{u_i^{(n+1)} - 2u_i^{(n)} + u_i^{(n-1)}}{\Delta t^2} = c^2 \frac{u_{i+1}^{(n)} - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)}}{h^2} \quad (295)$$

dove il termine incognito è  $u_i^{(n+1)}$  che diviene:

$$u_i^{(n+1)} = 2u_i^{(n)} - u_i^{(n-1)} + \frac{c^2 \Delta t^2}{h^2} (u_{i+1}^{(n)} - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)}) \quad (296)$$

Quindi per propagare la funzione d'onda  $u(x, t)$  dal tempo  $t_0$  abbiamo bisogno non solo di  $\{u_i^{(0)}\}$  ma anche di  $\{u_i^{(1)}\}$  che possiamo calcolare utilizzando lo sviluppo in serie di Taylor:

$$u_i^{(1)} = u_i^{(0)} + \left( \frac{\partial}{\partial t} u_i^{(0)} \right) \Delta t + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} u_i^{(0)} \right) \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad (297)$$

dove  $\frac{\partial}{\partial t} u_i^{(0)} = g_i$  è una funzione data e sostituiamo  $\left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} u_i^{(0)} \right) = c^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_i^{(0)} \right)$ . Quindi si arriva alla formula:

$$u_i^{(1)} = u_i^{(0)} + g_i \Delta t + \frac{c^2}{2} \frac{u_{i+1}^{(0)} - 2u_i^{(0)} + u_{i-1}^{(0)}}{h^2} \Delta t^2 \quad (298)$$

Si vede numericamente e si può mostrare numericamente che tale algoritmo è stabile solo se:

$$\frac{c \Delta t}{h} \leq 1 \quad (299)$$

che viene chiamata condizione di *Courant-Friedrichs-Lewy*.

Infatti, con il propagatore che abbiamo trovato il valore di  $u_i^{(n)}$  dipende solo da  $u_i^{(n-1)}, u_{i+1}^{(n-1)}, u_{i-1}^{(n-1)}$ . Però, se in  $\Delta t$  l'onda 'avanza' più di  $h$ ,  $u_i^{(n)}$  sarà determinato, nella soluzione esatta, anche da valore di  $u^{(n-1)}$  più lontani.

Inoltre come fatto nelle sezioni precedenti possono essere facilmente scelte delle condizioni al contorno.

## 25 Equazione di Schrödinger tempo dipendente

Consideriamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger tempo dipendente:

$$H \psi(x, t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (300)$$

con

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (301)$$

dove  $H$  non dipende dal tempo e  $x \in [a, b]$  con le condizioni al contorno  $\psi(a, t) = 0$  e  $\psi(b, t) = 0$ . Inoltre le condizioni iniziali  $\psi(x, t_0)$  sono date. Come nella sezione precedente consideriamo una griglia sull'asse  $x$  di  $N_x$  punti spazati  $h$  e time steps di  $\Delta t$ . La soluzione formale di Eq. 300 viene scritta come:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi_0(x) \quad (302)$$

che incorporando le condizioni iniziali scriviamo come:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)} \psi(x, t_0) = U(t, t_0) \psi(x, t_0) \quad (303)$$

dove  $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H (t-t_0)}$  è l'operatore di evoluzione temporale. Esso è un operatore unitario e questo garantisce la conservazione della norma di  $\psi$ :  $\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1$ .

Il metodo più semplice per risolvere numericamente è approssimare:

$$\psi(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H \Delta t\right) \psi(x, t) \quad (304)$$

con la solita notazione  $\psi_i^{(n)} = \psi(x_i, t_n)$  la formula diventa:

$$\psi_i^{(n+1)} = \psi_i^{(n)} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_i^{(n)}\right) + V_i \psi_i^{(n)}\right) \quad (305)$$

che approssimiamo come:

$$\psi_i^{(n+1)} = \psi_i^{(n)} - \frac{i\Delta t}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n)} - 2\psi_i^{(n)} + \psi_{i-1}^{(n)}}{h^2}\right) + V_i \psi_i^{(n)}\right) \quad (306)$$

tale metodo è equivalente a quello di Eulero esplicito quindi equivalente all'integrazione con il metodo dei rettangoli naif. Per una soddisfacente conservazione della norma della funzione d'onda bisogna però ricorrere a  $\Delta t$  piccoli visto che l'operatore approssimato  $U(t + \Delta t, t) \approx (1 - \frac{i}{\hbar} H \Delta t)$  non è unitario. Per usare un  $\Delta t$  maggiore possiamo basarci sul metodo di Crank Nicolson ossia sul metodo di integrazione con i trapezi. Formalmente procediamo nel seguente modo:

$$\psi\left(t_n + \frac{1}{2}\Delta t\right) = U\left(t_{n+\frac{1}{2}}, t_n\right) \psi(t_n) = U\left(t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1}\right) \psi(t_{n+1}) \quad (307)$$

che discretizziamo con:

$$\psi_i^{(n)} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n)} - 2\psi_i^{(n)} + \psi_{i-1}^{(n)}}{h^2}\right) + V_i \psi_i^{(n)}\right) = \psi_i^{(n+1)} + \frac{i\Delta t}{2\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{i+1}^{(n+1)} - 2\psi_i^{(n+1)} + \psi_{i-1}^{(n+1)}}{h^2}\right) + V_i \psi_i^{(n)}\right) \quad (308)$$

Anche in questo caso il problema può essere posto come un'equazione matriciale e per ottenere una forma più snella dividiamo ambo i membri per  $-i\hbar\Delta t/(4mh^2)$ :

$$\sum_{\substack{i=2, N_x-1 \\ j=2, N_x-1}} M_{ij} \psi_j^{(n+1)} = F_i \quad (309)$$

con:

$$M_{ij} = \begin{cases} i\frac{4mh^2}{\hbar\Delta t} - 2 - \frac{2mh^2}{\hbar^2} V_i & j = i \\ 1 & j = i + 1 \\ 1 & j = i - 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (310)$$

e con:

$$F_i = -\psi_{i+1}^{(n)} + 2\psi_i^{(n)} - \psi_{i-1}^{(n)} + i\frac{4mh^2}{\hbar\Delta t} \psi_i^{(n)} + \frac{2mh^2}{\hbar^2} V_i \psi_i^{(n)} \quad (311)$$

## 26 Metodo risolutivo per matrici tridiagonali

Consideriamo il problema generico di calcolare il vettore  $\mathbf{a}$  tale che :

$$M\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (312)$$

con M matrice di tridiagonale di dimensione  $N$ . Il problema è equivalente ad un sistema di  $N$  equazioni lineari. La prima di queste è:

$$M_{11}a_1 + M_{12}a_2 = b_1 \quad (313)$$

che possiamo scrivere come:

$$a_2 = \alpha_1 a_1 + \beta_1 \quad (314)$$

dove:

$$\alpha_1 = -\frac{M_{11}}{M_{12}} \quad (315)$$

e

$$\beta_1 = \frac{b_1}{M_{12}} \quad (316)$$

per le altre equazioni possiamo sempre scrivere:

$$a_{i+1} = \alpha_i a_i + \beta_i \quad (317)$$

dove i coefficienti  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  vengono trovati tramite il seguente procedimento iterativo, dove usiamo  $a_{i-1} = \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} - \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$  :

$$\begin{aligned} M_{i,i-1}a_{i-1} + M_{ii}a_i + M_{i,i+1}a_{i+1} &= b_i \\ M_{i,i-1} \left( \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} - \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \right) + M_{ii}a_i + M_{i,i+1}a_{i+1} &= b_i \\ M_{i,i+1}a_{i+1} &= \left( -\frac{M_{i,i-1}}{\alpha_{i-1}} - M_{ii} \right) a_i + b_i + \frac{M_{i,i-1}}{\alpha_{i-1}} \beta_{i-1} \end{aligned} \quad (318)$$

da cui:

$$\alpha_i = \left( -\frac{M_{i,i-1}}{M_{i,i+1}\alpha_{i-1}} - \frac{M_{ii}}{M_{i,i+1}} \right) \quad (319)$$

e

$$\beta_i = \frac{b_i}{M_{i,i+1}} + \frac{M_{i,i-1}}{M_{i,i+1}} \frac{\beta_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \quad (320)$$

questo ci permette di trovare tutti i coefficienti fino a:

$$a_N = \alpha_{N-1}a_{N-1} + \beta_{N-1} \quad (321)$$

l'ultima equazione del sistema invece porge:

$$M_{NN}a_N + M_{N,N-1}a_{N-1} = b_N \quad (322)$$

metto a sistema le ultime due equazioni e trovo:

$$\frac{a_N}{\alpha_{N-1}} - \frac{\beta_{N-1}}{\alpha_{N-1}} = -\frac{M_{N,N}}{M_{N,N-1}}a_N + \frac{b_N}{M_{N,N-1}} \quad (323)$$

da cui trovo:

$$a_N = \left( \frac{1}{\alpha_{N-1}} + \frac{M_{N,N}}{M_{N,N-1}} \right)^{-1} \left( \frac{b_N}{M_{N,N-1}} + \frac{\beta_{N-1}}{\alpha_{N-1}} \right) \quad (324)$$

trovato  $a_N$  posso trovare tutti gli altri  $\{a_i\}$  utilizzando Eq. 317

## Parte VII

# Metodi stocastici

In quest'ultima parte del corso vediamo come possiamo usare metodi basati sulla generazione di numeri casuali per risolvere alcune delle equazioni della fisica. Vedremo che non saremo limitati alla trattazione di soli processi stocastici (o casuali).

## 27 Generazione di numeri casuali

Ci interessa generare dei numeri casuali nell'intervallo  $[0, 1[$ . Per un numero casuale  $r$  si intende che la densità lineare di probabilità di generare tale numero è:

$$p(r) = 1 \quad (325)$$

Anche se in pratica è possibile la generazione di *veri* numeri casuali, ad esempio tirando un dado o misurando il decadimento radioattivo di un isotopo, essa è fuori portata per le applicazioni di fisica computazionale. Quindi dobbiamo ricorrere a metodi *pseudo-casuali* in cui generiamo dei numeri con una probabilità simile a quella ideale. Tali algoritmi generano serie di numeri  $\{r_i\}$  nell'intervallo  $[0, 1[$ . Il numero di  $\{r_i\}$  diversi che vengono generati è determinato dall'algoritmo usato e prende il nome di *periodo massimo*. Vediamo ora alcuni algoritmi:

### 27.1 Generatori LCG

Gli algoritmi (LCG) (linear congruential generators) sono basati sul seguente algoritmo:

1. Inizializzo  $x_0 \in \mathbb{N}$  detto seme o *seed*.
2. scelgo due parametri  $a, c \in \mathbb{N}$  e  $m \in \mathbb{N}$  con  $m > a, c$
3. uso l'iterazione  $x_{i+1} = (ax_i + c) \bmod m$
4. I numeri finali sono ottenuti come  $r_i = \frac{x_i}{m}$

Di solito i parametri  $a, c, m$  sono tenuti costanti mentre il seme  $x_0$  viene cambiato tra un *run* del programma ed il successivo in maniera da non generare la stessa sequenza di numeri. Per cambiare  $x_0$  un metodo frequentemente usato è quello di ricavarlo dall'orologio di sistema del computer.

Una scelta di parametri usata frequentemente è quella di PARK-MILLER:  $a = 7^5$ ,  $c = 0$ ,  $m = 2^{31} - 1$  che ha quindi un periodo di  $2^{31}$ . Per ottenere periodi maggiori e quindi numeri pseudo-casuali di qualità maggiore è frequentemente usata la seguente variante che prende il nome di *shuffling*:

1. Scelgo un parametro  $N > 0 \in \mathbb{N}$  e i quattro parametri  $x_0, a, c, m$
2. con l'algoritmo LCG calcolo i primi  $N$  numeri  $x_i$   $i = 1, N$
3. pongo  $k = N, l = 1$
4. Calcolo il numero intero  $j = 1 + \text{floor}(N * x_k / M)$  nell'intervallo  $[1, N]$
5. Pongo  $r_l = x_j / m$
6. Pongo  $x_j = x_k = (ax_i + c)$
7. Pongo  $k = j$  e  $l = l + 1$
8. Chiudo il loop tornando al punto 4

### 27.2 Test statistici sui numeri casuali

Per un insieme di numeri distribuiti secondo la distribuzione di Eq. 325 mi aspetto che il calcolo dei loro momenti sia in accordo con quello per la funzione  $p(x)$ :

$$\langle x^k \rangle = \int_0^1 x^k p(x) dx = \int_0^1 x^k dx = \frac{1}{k+1} \quad (326)$$

questi li confronto con i valori medi ottenuti dai miei numeri pseudo casuali:

$$\overline{x^k} = \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} r_i^k \quad (327)$$

inoltre posso andare ad investigare se i numeri pseudo-casuali sono *scorrelati* ossia se, dato  $l > 0$ :

$$\langle r_i r_{i+l} \rangle = \langle r_i \rangle \langle r_{i+l} \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{2} = \frac{1}{4} \quad (328)$$

per calcolare la funzione di correlazione per i miei numeri uso:

$$\overline{r_i r_{i+l}} = \frac{1}{N-l} \sum_{i=1, N-l} r_i r_{i+l} \quad (329)$$

Infine un test grafico della correlazione può essere effettuato plottando i punti  $(r_i, r_{i+1})$  su di un grafico cartesiano e andando a vedere se ci sono delle periodicità evidenti.

## 28 Sampling di funzioni densità di probabilità

Ora vogliamo che i nostri numeri casuali siano distribuiti secondo una funzione densità di probabilità  $p(x)$  con  $x \in [a, b]$  normalizzata

$$\int_a^b p(x) dx = 1 \quad (330)$$

ossia vogliamo che dati  $y_1 < y_2$  se generiamo  $N$  numeri casuali  $\{x_i\}$  e  $N_{y_1, y_2}$  è il numero di numeri  $\in [y_1, y_2]$  nel limite di grande  $N$  si verifichi:

$$\frac{N_{y_1, y_2}}{N} \rightarrow \int_{y_1}^{y_2} p(x) dx \quad (331)$$

inoltre vogliamo generare i numeri (pseudo-)casuali  $\{x_i\}$  a partire dai numeri  $\{r_i\}$  uniformemente distribuiti nell'intervallo  $[0, 1]$ . Per questo compito sono disponibili alcuni metodi:

### 28.1 Metodo della trasformata inversa

Cominciamo con il calcolare la funzione cumulante:

$$P(x) = \int_a^x p(x) dx \quad (332)$$

essa è una funzione monotona ( $p$  è positiva) con  $p(a) = 0$   $p(b) = 1$  quindi (almeno in principio) invertibile. Supponiamo ora di generare  $N$  numeri casuali distribuiti uniformemente tra 0 e 1 e sia  $N_{r_1, r_2}$  il numero di numeri casuali tra  $0 \leq r_1 < r_2 \leq 1$ . Consideriamo ora i numeri casuali ottenuti dalla trasformazione  $x_i = P^{-1}(r_i)$  corrispondenti a quelli  $\in [r_1, r_2]$  essi saranno tutti compresi nell'intervallo  $[x_1 = P^{-1}(r_1), x_2 = P^{-1}(r_2)]$  dove  $r_1 = P(x_1)$  e  $r_2 = P(x_2)$  da cui:

$$N_{x_1, x_2} = N_{r_1, r_2} = \frac{r_2 - r_1}{1} N = [P(x_2) - P(x_1)] N = \left[ \int_a^{x_2} p(x) dx - \int_a^{x_1} p(x) dx \right] N = N \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \quad (333)$$

quindi i numeri  $x_i = P^{-1}(r_i)$  sono distribuiti secondo la funzione densità di probabilità  $p(x)$ . Il metodo della trasformata inversa può essere applicato però solo nel caso in cui la funzione  $P$  è invertibile.

### 28.2 Sampling della funzione Gaussiana

Vediamo ora come trovare numeri casuali distribuiti secondo la densità di probabilità Gaussiana:  $p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}}$ . In questo caso l'applicazione diretta del metodo della precedente sezione non è possibile visto che non riusciamo ad avere una formula analitica per la funzione cumulante. Riformulando il problema si arriva alla seguente ricetta: si prendono due numeri casuali  $r_1$  e  $r_2$ . Poi viene ottenuto un numero casuale  $z$  distribuito secondo la densità di probabilità Gaussiana usando la seguente formula:

$$z = \cos(2\pi r_2) \sqrt{-2 \ln(r_1)} \quad (334)$$

### 28.3 Metodo accetta/nega

Abbiamo già visto questo metodo nella Sezione 16. Consideriamo una densità di probabilità  $p(x)$  con  $x \in [a, b]$  indichiamo con  $p_{max} = \max(p)$ . L'algoritmo è il seguente:

1. Generiamo un numero casuale  $r_1$  nell'intervallo  $[0, 1]$
2. Consideriamo il corrispondente numero casuale  $x = (b - a)r_1 + a$  distribuito uniformemente in  $[a, b]$
3. Generiamo un numero casuale  $r_2$  nell'intervallo  $[0, 1]$
4. Solo se  $r_2 < p(x)/p_{max}$ , aggiungiamo il numero casuale  $x$  ai numeri generati dall'algoritmo
5. Torna al numero 1

Si vede facilmente che i numeri generati dall'algoritmo soddisfano la distribuzione richiesta

## 29 Integrazione con numeri casuali o Monte Carlo

Cominciamo con considerare l'integrazione di una funzione generica  $f(x)$  sull'intervallo  $[a, b]$ :

$$\int_a^b f(x) dx = \bar{f}(b - a) \quad (335)$$

dove il valore medio  $\bar{f}$  della funzione è definito come:

$$\bar{f} = \frac{\int_a^b f(x) dx}{b - a} \quad (336)$$

Però noi possiamo calcolare  $\bar{f}$  con una certa precisione generando  $N$  numeri casuali  $x_i$  distribuiti uniformemente su  $[a, b]$  e mediando gli  $f_i = f(x_i)$ , dalle formule di teoria della probabilità si trova:

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} f_i \pm \sqrt{\frac{\text{var}(f)}{N}} \quad (337)$$

dove la varianza è definita come:

$$\text{var}(f) = \overline{(f - \bar{f})^2} = \overline{f^2} - 2\bar{f}\bar{f} + \bar{f}^2 = \overline{f^2} - \bar{f}^2 \quad (338)$$

con

$$\overline{f^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} f_i^2 \quad (339)$$

la varianza  $\text{var}(f)$  può quindi essere calcolata esattamente come:

$$\text{var}(f) = \frac{\int_a^b (f(x))^2 dx}{b - a} - \left( \frac{\int_a^b f(x) dx}{b - a} \right)^2 \quad (340)$$

quindi l'accuratezza di integrazione è di ordine  $O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ . Ci ricordiamo che il metodo dei rettangoli naif ha un'accuratezza  $O\left(\frac{1}{N}\right)$  mentre quello dei rettangoli e quello dei trapezi hanno un'accuratezza  $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$ . Quindi per integrare funzioni definite su  $\mathbb{R}$  usare numeri casuali non è conveniente.

Il discorso cambia invece se consideriamo funzioni definite su  $\mathbb{R}^M$ . Supponiamo quindi di usare il metodo dei rettangoli (o trapezi) e di valutare la funzione in  $N$  punti, distribuiti in maniera regolare, cosicché lungo ogni dimensione di  $\mathbb{R}^M$  io ho  $N^{\frac{1}{M}}$  punti. L'accuratezza con cui integriamo (coi rettangoli-trapezi) è determinata dal numero di punti lungo le singole dimensioni quindi risulta essere  $O\left(\frac{1}{N^{\frac{1}{M}}}\right)$ .

Usando invece il metodo dei numeri casuali, l'accuratezza è sempre di ordine  $O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$ . Quindi per  $M > 4$  il metodo dei numeri casuali (o Monte Carlo) risulta essere più accurato a parità di costo computazionale.

## 29.1 Integrazione di funzione composte

Consideriamo ora l'integrazione (per semplicità di sola notazione consideriamo funzioni su  $\mathbb{R}$ ) di una funzione del tipo  $f(x)p(x)$  su  $[a, b]$  dove  $p(x)$  è una densità di probabilità definita sullo stesso intervallo  $[a, b]$ . E' facile vedere che posso calcolare:

$$\int_a^b f(x)p(x)dx = (b-a) \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1, N} f_i \pm \sqrt{\frac{\text{var}(f)}{N}} \right) \quad (341)$$

dove gli  $N$  numeri casuali  $x_i$  sono distribuiti secondo la distribuzione  $p(x)$  e  $f_i = f(x_i)$

Infatti consideriamo un numero  $N$  grande di numeri casuali distribuiti secondo  $p(x)$ . Il numero  $dN$  di numeri casuali in  $dx$  è pari a:

$$dN = Np(x) \frac{dx}{b-a} \quad (342)$$

e il contributo al termine di destra in Eq. 341 è:

$$(b-a) \frac{dN}{N} f(x) = (b-a) f(x) \frac{Np(x) \frac{dx}{b-a}}{N} = f(x)p(x)dx \quad (343)$$

quindi pari al termine che compare nell'integrale nel membro di sinistra di Eq. 341.

## 30 L'algoritmo di Metropolis

Spesso è richiesto di calcolare integrali del tipo:

$$\int dx O(x)p(x) \quad (344)$$

dove la densità di probabilità  $p(x)$  è definita come:

$$\begin{cases} p(x) &= \frac{q(x)}{Z} \\ Z &= \int dx q(x) \end{cases} \quad (345)$$

dove con  $x$  indichiamo un elemento di uno spazio generico,  $O$  è una generica funzione corrispondente ad un osservabile e  $q(x)$  è una funzione densità di probabilità NON normalizzata. La costante di normalizzazione è  $Z$  cosicché  $p(x)$  è una buona funzione densità di probabilità.

Ad esempio per un sistema di particella classiche, come quelli che abbiamo visto in Sezione 10, il valore medio di un osservabile  $O$  in condizioni di equilibrio termico alla temperatura  $T$  viene calcolato come:

$$\langle O \rangle_T = \int dq_1 \dots \int dq_N \int dp_1 \dots \int dp_N O(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N) \frac{e^{-\frac{1}{k_B T} E(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)}}{Z} \quad (346)$$

con la funzione di partizione  $Z$  definita come:

$$Z = \int dq_1 \dots \int dq_N \int dp_1 \dots \int dp_N e^{-\frac{1}{k_B T} E(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)} \quad (347)$$

Quindi per calcolare  $p(x)$  abbiamo bisogno di  $Z$  ma per calcolare  $Z$  dobbiamo calcolare un integrale della stessa complessità. Quindi integrare con il metodo di Monte Carlo le formule di Eqs. 344,346 non è possibile a meno di generare i punti casuali  $\{x_i\}$  secondo la distribuzione  $p(x)$  e poi usare il metodo di Sezione 29.1. Siccome non conosciamo  $p_{max} = \max(p(x))$  il metodo accetta-nega può essere utilizzato solo usando un valore massimo  $p'_{max}$  sufficientemente grande da essere sicuri che  $p'_{max} > p_{max}$ . Questo può risultare altamente inefficiente.

Metropolis invece introdusse un algoritmo efficiente per generare i punti casuali  $\{x_i\}$  secondo la distribuzione  $p(x)$  usando solo la funzione  $q(x)$ . L'algoritmo è il seguente:

1. Generiamo casualmente il primo punto  $x_1$ , poniamo  $i = 1$
2. Generiamo casualmente il punto  $x_{trial}$
3. Se  $p(x_{trial}) > p(x_i)$  ossia se  $q(x_{trial}) > q(x_i)$ , aggiungiamo il punto ai numeri generati:  $x_{i+1} = x_{trial}$ ,  $i = i + 1$ ,  
TORNIAMO A 2
4. Altrimenti generiamo casualmente un numero  $r \in [0, 1]$

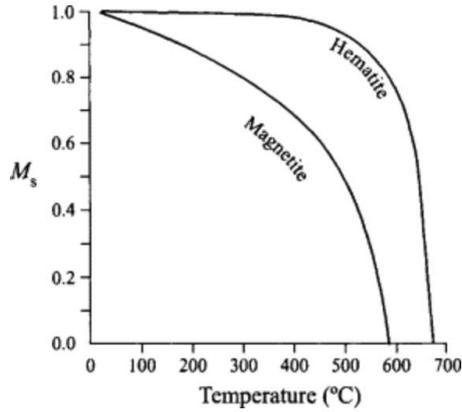


Figura 13: Andamento della magnetizzazione relativa rispetto alla temperatura.

5. Se  $\frac{p(x_{trial})}{p(x_i)} = \frac{q(x_{trial})}{q(x_i)} > r$  aggiungiamo il punto ai numeri generati:  $x_{i+1} = x_{trial}$ ,  $i = i + 1$ , TORNIAMO A 2
6. Altrimenti aggiungiamo  $x_i$  ai numeri generati:  $x_{i+1} = x_i$ ,  $i = i + 1$ , TORNIAMO A 2

L'algoritmo di Metropolis definisce una funzione probabilità  $c(x)$  che un punto venga generato dato un certo numero di passi. Inoltre soddisfa la condizione di bilancio dettagliato ossia il numero medio di  $x_j$  generato subito dopo (o a partire da)  $x_i$  è pari al numero di punti  $x_i$  generati a partire da  $x_j$ . Questa proprietà è indicata nel lavoro originale di Metropolis e collaboratori come dovuta alla semplice condizione di equilibrio in un sistema ergodico (e invariante per inversione temporale) e si può dimostrare in maniera rigorosa tramite la teoria delle catene di Markov. Ora dimostriamo che il bilancio dettagliato implica il fatto che  $c(x)$  è proporzionale a  $p(x)$  come auspicato. Indichiamo con  $p(x_j|x_i)$  la probabilità di generare  $x_j$  da  $x_i$ :

$$p(x_j|x_i) = \begin{cases} 1 & p(x_j) > p(x_i) \\ \frac{p(x_j)}{p(x_i)} = \frac{q(x_j)}{q(x_i)} & p(x_j) \leq p(x_i) \end{cases} \quad (348)$$

allora il bilancio dettagliato viene scritto come:

$$p(x_j|x_i) c(x_i) = p(x_i|x_j) c(x_j) \quad (349)$$

se siamo nel caso  $p(x_j) > p(x_i)$ , il bilancio dettagliato diviene:

$$c(x_i) = \frac{p(x_i)}{p(x_j)} c(x_j) \quad (350)$$

mentre se  $p(x_j) \leq p(x_i)$ , il bilancio dettagliato diviene:

$$\frac{p(x_j)}{p(x_i)} c(x_i) = c(x_j) \quad (351)$$

in entrambi i casi si ottiene:

$$\frac{c(x_i)}{c(x_j)} = \frac{p(x_i)}{p(x_j)} \quad (352)$$

quindi la funzione  $c(x)$  che posso scrivere come  $c(x) = \frac{p(x)}{p(x_1)} c(x_1)$  è come voluto proporzionale a  $p(x)$ .

## 31 Modello di Ising per il magnetismo

Il magnetismo nei materiali è dovuto ai gradi di libertà elettronici e in particolare alla loro componente di spin. I materiali chiamati ferromagnetici esibiscono magnetizzazione spontanea (ossia presente anche in assenza di campo magnetico esterno) fino ad una certa temperatura critica chiamata temperatura di Curie. Il tipico andamento temperatura magnetizzazione è raffigurato in Figura 13. Alla temperatura di Curie i materiali esibiscono una transizione di fase di secondo ordine, ossia la magnetizzazione è continua ma con derivata discontinua. La magnetizzazione è dovuta alla presenza nel materiale di atomi di metalli di transizione (es. Fe) che contengono una shell di orbitali d incompleta con un numero di elettroni dispari. Siccome tali orbitali sono localizzati è sensato introdurre un semplice modello per descrivere l'energia (o

meglio l'operatore di Hamilton) del sistema. Gli unici gradi di libertà sono l'orientazione degli spin che indichiamo con  $\sigma_l$  dove  $l$  indica il sito atomico di appartenenza. La variabile  $\sigma_l$  può assumere solo i valori  $\pm 1$ . La funzione Hamiltoniana modello che descrive il sistema è data da:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} J_{ll'} \sigma_l \sigma_{l'} - h \sum_l \sigma_l \quad (353)$$

dove i coefficienti  $J_{ll'}$  rendono conto del termine di scambio tra il sito  $l$  e quello  $l'$  e abbiamo  $J_{ll'} = J_{l'l}$ . L'ultimo termine nel membro di destra tiene conto dell'accoppiamento con un eventuale campo magnetico esterno e abbiamo  $h = -\mu_B g B / 2$  con  $\mu_B$  momento magnetico dell'elettrone e dove il fattore  $g$ , detto di Landé rende conto del fatto della perturbazione introdotta dagli altri elettroni del cristallo.

Se  $O(\{\sigma\})$  è un generico osservabile, il suo valore di aspettazione alla temperatura  $T$  è dato da:

$$\langle O \rangle_T = \frac{\sum_{\{\sigma\}} O(\{\sigma\}) e^{-\frac{1}{k_B T} H(\{\sigma\})}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{1}{k_B T} H(\{\sigma\})}} \quad (354)$$

dove con  $\{\sigma\} = (\sigma_1, \dots, \sigma_{N_{siti}})$  indichiamo una configurazione di spin per tutti gli  $N$  atomi o siti del nostro sistema. Gli osservabili che ci interesseranno maggiormente sono:

l'energia per unità di sito:

$$E(\{\sigma\}) = \frac{H(\{\sigma\})}{N} \quad (355)$$

e la magnetizzazione per sito:

$$M(\{\sigma\}) = \frac{1}{N} \sum_l \sigma_l \quad (356)$$

Inoltre si può mostrare che i termini di scambio che contribuiscono maggiormente sono quelli le coppie di siti più vicini (detti *primi-vicini*). Allora possiamo ulteriormente semplificare il nostro modello, che diviene il noto modello di Ising:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} \widetilde{J}_{ll'} \sigma_l \sigma_{l'} - h \sum_l \sigma_l \quad (357)$$

dove con  $\widetilde{\sum}$  indichiamo che la somma è limitata ai primi vicini. Si vede subito che se  $J > 0$  l'ordine ferromagnetico è preferito ossia con gli spin con medesimo orientazione mentre se  $J < 0$  l'ordine antiferromagnetico è preferito ossia con gli spin con orientazioni opposte.

Il modello di Ising ammette soluzioni analitiche nei casi 1D e 2D per il limite di numero di siti infiniti. Nel caso 1D non è osservata alcuna transizione di fase mentre il modello 2D mostra una transizione di fase analoga a quella misurata.

Nel caso 3D invece non è stato possibile ancora trovare soluzioni analitiche. Pertanto il modello di Ising (e modelli simili) vengono studiati con metodi Monte Carlo ed in particolare con l'algoritmo di Metropolis.

Notiamo che per  $h = 0$  il sistema è simmetrico (ossia l'energia è invariante) per inversione di tutti gli spin. Quindi ci aspettiamo che per ogni temperatura  $T$ :  $\langle M \rangle_{T, h=0} = 0$ . In questa maniera però non riusciamo studiare la magnetizzazione permanente. Il problema si risolve andando a definire e poi a studiare:

$$\langle M \rangle_{T, h=0^+} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \langle M \rangle_{T, h} \quad (358)$$

Nel applicare il metodo di Metropolis al modello di Ising di solito ci si limita la generazione della configurazione di prova ( $\sigma_{trial}$ ) all'inversione di uno solo spin scelto a caso rispetto alla configurazione precedente. Questo da un lato rende l'algoritmo molto più efficiente dall'altro *tende a bloccare* il sistema in un sottospazio dello spazio delle configurazioni con maggior parte degli spin aventi medesima orientazione tanto che per temperature basse e per numero di configurazioni generate relativamente limitato si trova  $\overline{M}_{h=0} \neq 0$  e  $|\overline{M}_{h=0}| \cong \langle M \rangle_{T, h=0^+}$ .

Nelle Figure 14,15,16 riportiamo l'energia per sito e la magnetizzazione per sito nel caso del modello 2D con condizioni al contorno periodiche e una griglia di  $50 \times 50$  spin. Notiamo che lo stato fondamentale ad energia più bassa corrisponde a tutti gli spin aventi la medesima orientazione ed è quindi doppiamente degenero. Per tale stato l'energia per sito è  $-2J$  e la magnetizzazione per sito è  $\pm 1$ .

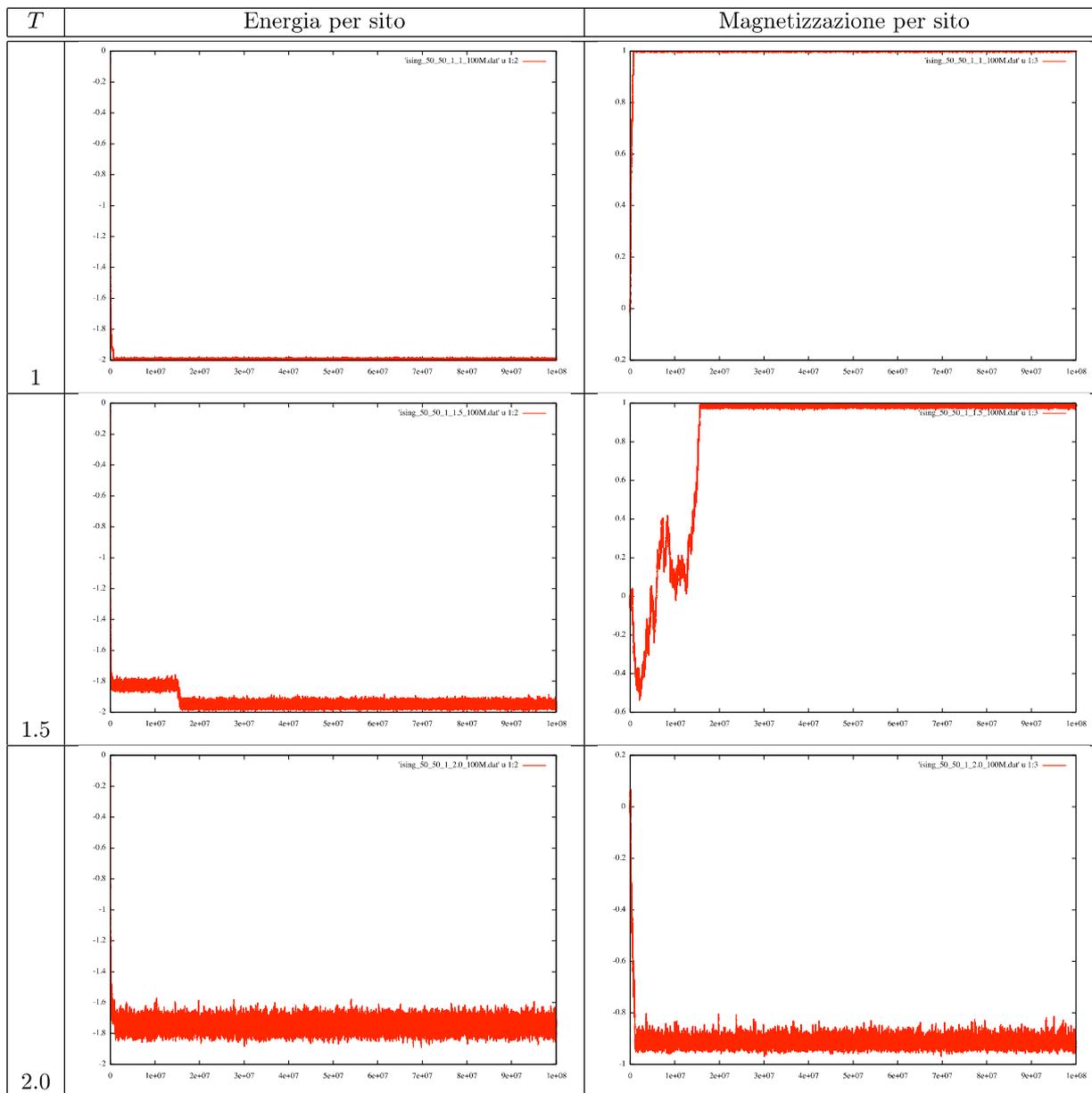


Figura 14: Simulazione Monte Carlo con l'algoritmo di Metropolis per il modello di Ising 2D con dimensioni 50x50 e condizioni al contorno periodiche.  $J = 1$  e  $h = 0$ . Ogni simulazione consta di  $100 \cdot 10^6$  di passi.

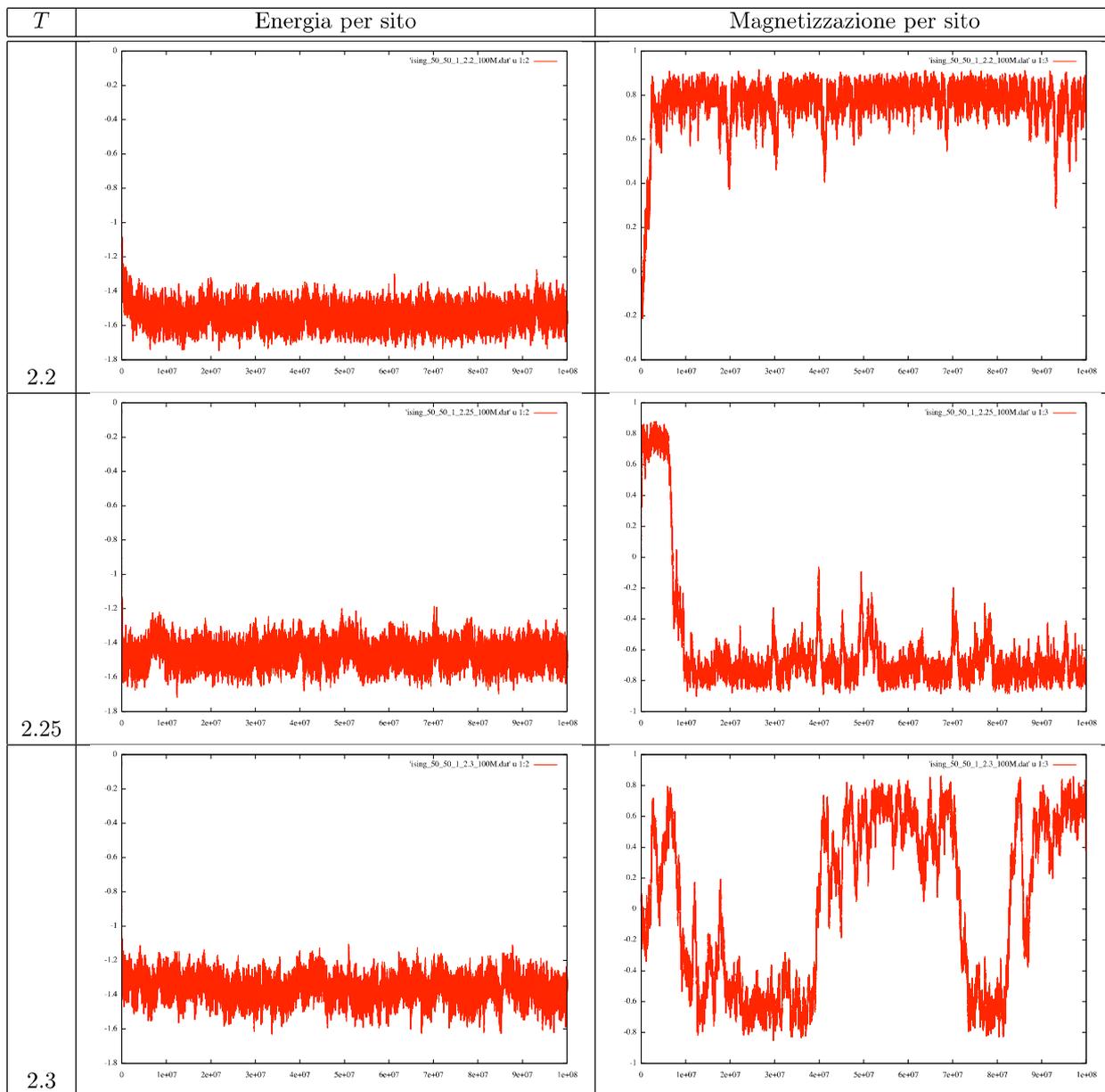


Figura 15: Simulazione Monte Carlo con l'algoritmo di Metropolis per il modello di Ising 2D con dimensioni 50x50 e condizioni al contorno periodiche.  $J = 1$  e  $h = 0$ . Ogni simulazione consta di  $100 \cdot 10^6$  di passi.

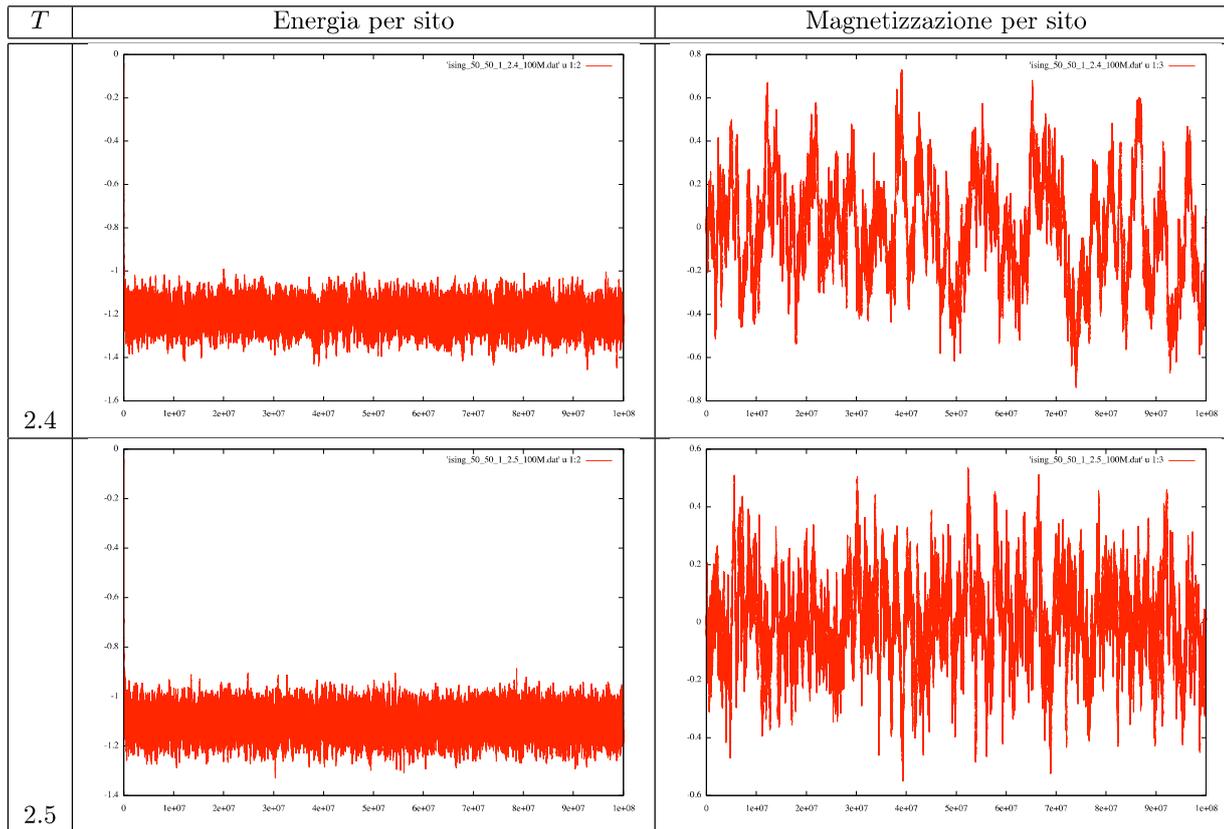


Figura 16: Simulazione Monte Carlo con l'algoritmo di Metropolis per il modello di Ising 2D con dimensioni 50x50 e condizioni al contorno periodiche.  $J = 1$  e  $h = 0$ . Ogni simulazione consta di  $100 \cdot 10^6$  di passi.

## Parte VIII

# Algoritmi di ottimizzazione

Cominciamo con il problema di trovare il minimo (o il massimo) di una funzione  $f(x) \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ . Qui parleremo sempre di minimi. Basta moltiplicare  $f$  per  $-1$  per passare da un problema di minimo a uno di massimo.

## 32 Metodo della sezione aurea

Consideriamo  $f(x) \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  continua e tre punti lungo  $x : a < b < c$ . Supponiamo valga:  $f(b) < f(a)$  e  $f(b) < f(c)$  allora c'è sicuramente (almeno) un minimo di  $f$  in  $[a, c]$ . Possiamo trovarlo con il seguente algoritmo iterativo (vedi Fig. 17) :

1. prendiamo  $a < b < c$  tali che  $f(b) < f(a)$  e  $f(b) < f(c)$
2. se  $(c - b) > (b - a)$  prendiamo  $x_0 \in [b, c]$ :
  - (a) se  $f(x_0) > f(b)$  allora ho un minimo in  $[a, x_0]$ , pongo  $c = x_0$  e torno a (1)
  - (b) altrimenti ho un minimo in  $[b, c]$ , pongo  $a = b$ ,  $b = x_0$  e torno a (1)
3. se  $(c - b) < (b - a)$  prendiamo  $x_0 \in [a, b]$ :
  - (a) se  $f(x_0) > f(b)$  allora ho un minimo in  $[x_0, c]$ , pongo  $a = x_0$  e torno a (1)
  - (b) altrimenti ho un minimo in  $[a, b]$ , pongo  $b = x_0$ ,  $c = b$  torno a (1)

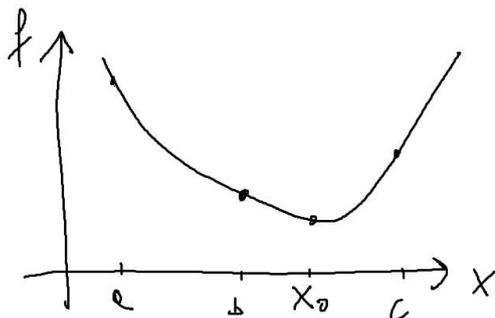


Figura 17: Minimizzazione di una funzione tramite il metodo della sezione aurea

Vogliamo trovare un metodo per scegliere  $x_0$  in maniera tale che i due possibili nuovi intervalli di ricerca abbiano lunghezza uguale. Supponiamo di essere nel caso  $(c - b) > (b - a)$  e poniamo:

$$w = \frac{b - a}{c - a} \quad (359)$$

$$z = \frac{x_0 - b}{c - a} \quad (360)$$

Se  $f(x_0) > b$  allora il nuovo intervallo di ricerca è  $[a, x_0]$  con lunghezza  $(w + z)(c - a)$ , altrimenti l'intervallo è  $[b, c]$  con lunghezza  $(1 - w)(c - a)$ . I due intervalli sono uguali se:

$$z = 1 - 2w \quad (361)$$

Quindi dato  $w$  possiamo ricavare  $z$  e quindi  $x_0$ . Dobbiamo però ancora determinare il primo  $w$ . Supponiamo  $f(x_0) < f(b)$ . Imponiamo di avere sempre le stesse proporzioni tra i punti  $a, b, x_0$  e  $b, x_0, c$ , ossia:

$$\frac{b - a}{c - a} = \frac{x_0 - b}{b - x_0} \quad (362)$$

$$w = \frac{z}{1 - w} \quad (363)$$

Sostituiamo Eq. 361 e troviamo:

$$w = \frac{1 - 2w}{1 - w} \quad (364)$$

$$w^2 - 3w + 1 = 0 \quad (365)$$

Prendiamo la sola soluzione soluzione entro  $[0, 1]$ :

$$w = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \simeq 0.38197 \quad (366)$$

Vediamo ora in pratica come funziona. Cominciamo con scegliere  $a, c$  e poi poniamo  $b = a + w(c - a)$ . Abbiamo un minimo se  $f(b) < f(a)$  e  $f(b) < f(c)$  in tal caso, scegliamo  $x_0 = b + z(c - a)$ . Ora abbiamo due casi:

Se  $f(x_0) < b$  ricominciamo con  $b, x_0, c$  e si verifica facilmente che  $(x_0 - b)/(c - b) = w$ .

Se  $f(x_0) > b$  ricominciamo con  $a, x_0, b$ , in tal caso la situazione è *ribaltata* infatti si verifica facilmente che  $(x_0 - b)/(x_0 - a) = w$  Quindi sceglieremo il nuovo punto di prova  $x'_0 = b - z(x_0 - a)$ . Notiamo che  $w$  è proprio la sezione aurea.

### 33 Approssimazione con una parabola

In molti casi  $f(x)$  è approssimabile con una parabola in prossimità del minimo con una parabola. Valutiamo  $f$  in  $a < b < c$ . e approssimiamo:

$$f(x) \approx \alpha + \beta x + \gamma x^2 \quad (367)$$

I coefficienti  $\alpha, \beta, \gamma$  sono univocamente determinati dalla richiesta che la funzione approssimante passi per  $(a, f(a)), (b, f(b)), (c, f(c))$ . Poi il minimo approssimato di  $f$  è nel punto:

$$x_0 = -\frac{\beta}{2\gamma} \quad (368)$$

svolgendo i calcoli si trova:

$$x_0 = b - \frac{1}{2} \frac{(b-a)^2(f(b)-f(c)) - (b-c)^2(f(b)-f(a))}{(b-a)(f(b)-f(c)) - (b-c)(f(b)-f(a))} \quad (369)$$

In diversi casi è disponibile anche la derivata di  $f$ ,  $f'(x) = df(x)/dx$ . In tal caso mi bastano due punti  $a < b$  per trovare la parabola. Mi basta conoscere  $f'$  in uno dei due punti che supponiamo sia  $b$ . Allora, i parametri  $\beta$  e  $\gamma$  sono dati da:

$$\beta = f'(b) - 2\gamma b \quad (370)$$

$$\gamma = \frac{(f(a) - f(b)) - f'(b)(a - b)}{(a^2 - b^2) - 2b(a - b)} \quad (371)$$

## 34 Metodi basati sul gradiente

Consideriamo il problema di trovare il minimo (o i minimi) di una generica funzione  $F(x_1, \dots, x_N)$  rispetto ai parametri  $x_1, \dots, x_N$ .

Supponiamo sia possibile calcolare il gradiente:

$$\nabla F(x_1, \dots, x_N) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} F(x_1, \dots, x_N) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} F(x_1, \dots, x_N) \\ \dots \\ \frac{\partial}{\partial x_N} F(x_1, \dots, x_N) \end{pmatrix} \quad (372)$$

allora possiamo trovare il minimo spostandoci lungo la direzione opposta al gradiente. Secondo il seguente algoritmo detto *Steepest descend*.

1. Dati i valori iniziali  $x_1^i, \dots, x_N^i$ . calcolo  $\nabla F(x_1^i, \dots, x_N^i)$
2. Calcolo il parametro  $\lambda$  tale che  $F\left(x_1^i - \lambda \frac{\partial}{\partial x_1} F(x_1^i, \dots, x_N^i), \dots, x_N^i - \lambda \frac{\partial}{\partial x_N} F(x_1^i, \dots, x_N^i)\right)$  sia minimo
3. Pongo per il valore di  $\lambda$  trovato  $x_1^{i+1} = x_1^i - \lambda \frac{\partial}{\partial x_1} F(x_1^i, \dots, x_N^i), \dots, x_N^{i+1} = x_N^i - \lambda \frac{\partial}{\partial x_N} F(x_1^i, \dots, x_N^i)$  e ritorno al punto 2

Talvolta è conveniente usare un valore di  $\lambda$  prefissato senza ricavarlo ad ogni iterazione.

Una metodo affine basato sui gradiente è quello del *Gradiente Coniugato* che permette di scegliere la direzione lineare di minizzazione in maniera più efficiente. Indichiamo con  $\mathbf{u}$  il vettore direzione di ricerca. Il metodo steepest-descent pone:

$$\mathbf{u}^i = -\frac{\nabla f(\mathbf{x}^i)}{|\nabla f(\mathbf{x}^i)|} \quad (373)$$

Il metodo del gradiente coniugato genera delle direzioni di ricerca in maniera tale che la minimizzazione lungo la direzione successiva non rovini le minimizzazioni lungo le direzioni precedenti. Supponiamo di approssimare  $f$  in serie di Taylor attorno all'origine del sistema di riferimento:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(0) + \sum_{i=1, N} \frac{\partial f(0)}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i, j=1, N} \frac{\partial^2 f(0)}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j \quad (374)$$

che scriviamo in forma vettoriale come:

$$f(\mathbf{x}) = c - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x} + \frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \hat{A} \mathbf{x} \quad (375)$$

con:

$$\mathbf{b} = -\nabla f(0) \quad (376)$$

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 f(0)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (377)$$

Supponiamo di minimizzare lungo  $\mathbf{u}$  fino al punto di minimo  $\mathbf{x}_u$  in quel punto il gradiente di  $f$  sarà ortogonale a  $\mathbf{u}$ . Vogliamo ora trovare la direzione di minimizzazione  $\mathbf{v}$  tale che spostandoci da  $\mathbf{x}_u$  lungo  $\mathbf{v}$  il gradiente di  $f$  non acquisti componenti lungo  $\mathbf{u}$ . Tale gradiente lo scrivo come:

$$\nabla f(\mathbf{x}_u + \epsilon \mathbf{v}) = -\mathbf{b} + \hat{A}(\mathbf{x}_u + \epsilon \mathbf{v}) \quad (378)$$

quindi richiediamo che

$$\mathbf{u} \cdot (-\mathbf{b} + \hat{A}(\mathbf{x}_u + \epsilon \mathbf{v})) = 0 \quad (379)$$

Siccome la relazione

$$\mathbf{u} \cdot (-\mathbf{b} + \hat{A}(\mathbf{x}_u)) = 0 \quad (380)$$

è soddisfatta per dalla condizione di minimo di  $\mathbf{x}_u$  allora la direzione  $\mathbf{v}$  deve soddisfare la relazione:

$$\mathbf{u} \cdot \hat{A}\mathbf{v} = 0 \quad (381)$$

Il metodo del gradiente coniugato genera una serie di direzioni  $\mathbf{h}^i$  tutte coniugate tra di loro. Poniamo per la prima iterazione:

$$\mathbf{g}^0 = \mathbf{h}^0 \quad (382)$$

e per le iterazioni successive usiamo la regola:

$$\mathbf{g}^{i+1} = \mathbf{g}^i - \lambda_i \hat{A}\mathbf{h}^i \quad (383)$$

$$\mathbf{h}^{i+1} = \mathbf{g}^{i+1} + \gamma_i \mathbf{h}^i \quad (384)$$

con:

$$\lambda_i = \frac{\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^i}{\mathbf{h}^i \hat{A}\mathbf{h}^i} = \frac{\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{h}^i}{\mathbf{h}^i \hat{A}\mathbf{h}^i} \quad (385)$$

$$\gamma_i = \frac{\mathbf{g}^{i+1} \cdot \mathbf{g}^{i+1}}{\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^i} \quad (386)$$

Si può mostrare che questo assicura che per  $j < i$

$$\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^j = 0 \quad (387)$$

$$\mathbf{h}^i \hat{A}\mathbf{h}^j = 0 \quad (388)$$

$$\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{h}^j = 0 \quad (389)$$

Ora ci poniamo il problema che la matrice  $\hat{A}$  non è conosciuta. Possiamo usare il seguente teorema: Se per un  $i$  ho che  $\mathbf{g}^i = -\nabla f(\mathbf{x}^i)$  e minimizzando lungo  $\mathbf{h}^i$  trovo il minimo di  $f$  nel punto  $\mathbf{x}^{i+1}$  allora risulta  $\mathbf{g}^{i+1} = -\nabla f(\mathbf{x}^{i+1})$ .

Dimostrazione: Abbiamo:

$$\mathbf{g}^i = \mathbf{b} - \hat{A}\mathbf{x}^i \quad (390)$$

$$\mathbf{g}^{i+1} = \mathbf{b} - \hat{A}(\mathbf{x}^i + \lambda \mathbf{h}^i) = \mathbf{g}^i - \lambda \hat{A}\mathbf{h}^i \quad (391)$$

con  $\lambda$  determinato dalla relazione di minimo  $\mathbf{g}^{i+1} \cdot \mathbf{h}^i = 0$  ossia  $0 = \mathbf{g}^i \cdot \mathbf{h}^i - \lambda \mathbf{h}^i \cdot \hat{A}\mathbf{h}^i$  da cui si ritrova:

$$\lambda = \frac{\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{h}^i}{\mathbf{h}^i \cdot \hat{A}\mathbf{h}^i} \quad (392)$$

Come si voleva dimostrare.

La scelta di  $\gamma$  in Eq. 385 prende il nome di Fletcher-Reeves. Spesso viene preferita la variante di Polak-Ribiere

$$\gamma_i = \frac{(\mathbf{g}^{i+1} - \mathbf{g}^i) \cdot \mathbf{g}^{i+1}}{\mathbf{g}^i \cdot \mathbf{g}^i} \quad (393)$$

che risulta più stabile.

## 35 Dynamic relaxation

Introduciamo un sistema dinamico fittizio associando ad ogni parametro  $\lambda_i$  un'energia cinetica fittizia  $\frac{1}{2} \left( \frac{d\lambda_i}{dt} \right)^2$  e una forza frenante (frizione)  $-f(t) \frac{d\lambda_i}{dt}$  quindi andremo a propagare le equazioni del moto fittizie:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \lambda_1(t)}{dt^2} &= -f(t) \frac{d\lambda_1}{dt} - \frac{\partial F(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{\partial \lambda_1} \\ \dots & \dots \\ \frac{d^2 \lambda_N(t)}{dt^2} &= -f(t) \frac{d\lambda_N}{dt} - \frac{\partial F(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{\partial \lambda_N} \end{cases} \quad (394)$$

abbassando il termine di frizione fino al suo annullarsi in modo da trovare un punto di equilibrio in cui i parametri restano costanti nel tempo. Tale punto è un punto di minimo perché avremo  $\frac{\partial F(\lambda_1^i, \dots, \lambda_N^i)}{\partial \lambda_i} = 0$  per tutti gli  $i$ .

## 36 Simulated annealing

L'idea è quella di considerare il sistema dinamico fittizio dal punto di vista termodinamico. Consideriamo una distribuzione canonica per i parametri  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ :

$$p(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{F(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{T}} \quad (395)$$

dove  $T$  è una temperatura fittizia e  $Z$  è una costante di normalizzazione che non conosciamo. L'idea è quella di usare un algoritmo come quello di Metropolis per campionare lo spazio dei parametri ad una certa temperatura che verrà poi abbassata in maniera da portare il sistema nel suo stato di energia (o meglio di  $F$ ) più basso.