Descrizione di un sistema Hamiltoniano

$\{q_i\}$ coordinate (generalizzate)
indice di coordinata

$\{p_i\}$ momenti generalizzati

$$H(\{q_i\},\{p_i\}) = T(\{q_i\},\{p_i\}) + V(\{q_i\},\{p_i\})$$

$$\frac{d}{dt} q_i = + \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad \frac{d}{dt} p_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

A osservabile

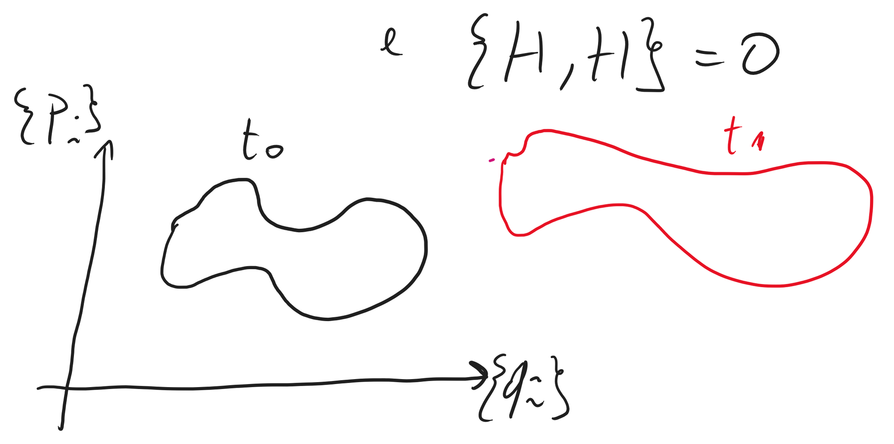
$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

con parentesi di Poisson

$$\{A,B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

allora H è una costante del moto

e $\{H,H\} = 0$



Il teorema di Liouville dice che il volume si conserva nello spazio delle fasi

I propagatori che conservano il volume vengono chiamati simplettici

SIMPLETTICI → CONSERVANO L'ENERGIA

NON-SIMPLETTICI → NON CONSERVANO L'ENERGIA

Eulero esplicito/implicito, RK2, RK3, sono non-simplettici

PROPAGATORE DI EULERO SIMPLETTICO

Usiamo la notazione

$q_{i,n}$ — indice di passo temporale; indice di coordinata

$$\begin{cases} q_{i,n+1} = q_{i,n} + \dfrac{\partial H(\{q_{j,n}\},\{p_{j,n+1}\})}{\partial p_i}\Delta t \\[2ex] p_{i,n+1} = p_{i,n} - \dfrac{\partial H(\{q_{j,n}\},\{p_{j,n+1}\})}{\partial q_i}\Delta t \end{cases}$$

Caso in cui $T = T(\{p_i\})$ e $V = V(\{q_i\})$

Es. oscillatore armonico

$$T = \frac{p^2}{2m} \qquad e \quad V = kq^2$$

allora implementazione

$$\begin{cases} p_{i,n+1} = p_{i,n} - \dfrac{\partial V(\{q_{j,n}\})}{\partial q_i}\Delta t + O(\Delta t^2) \\[2ex] q_{i,n+1} = q_{i,n} + \dfrac{\partial T}{\partial p_i}\{p_{j,n+1}\}\Delta t + O(\Delta t^2) \end{cases}$$

Sistema Hamiltoniano con vincolo olonomo

$$f(\{q_i\}) = c$$

$$H(\{q_i\},\{p_i\}) \to H(\{q_i\},\{p_i\}) - \lambda\left(f(\{q_i\}) - c\right) = H'(\{q_i\},\{p_i\};\lambda)$$

es. con Eulero simplettico

$$p_{i,n+1}(\lambda) = p_{i,n} - \frac{\partial V(\{q_j\})}{\partial q_i}\Delta t + \lambda \frac{\partial f}{\partial q_i}(\{q_i\})\Delta t$$

$$q_{i,n+1}(\lambda) = q_i + \frac{\partial T(\{p_{j,n+1}(\lambda)\})}{\partial p_i}\Delta t$$

scelgo λ tale che il vincolo sia soddisfatto