

Figure 1. Illustrazione del metodo della sezione di Poincaré. L'orbita uscente dal punto P_0 in una certa direzione interseca successivamente la superficie, nella stessa direzione, nei punti P_1 , P_2 e così via.

Sezione di Poincaré:

Metodo per trasformare un flusso continuo di un'equazione differenziale autonoma in \mathbb{R}^n in una mappa $\Pi : \Sigma \mapsto \Sigma$, dove $\Sigma \subset \mathbb{R}^n$ è una superficie di dimensione n-1.

• Si consideri una superficie Σ trasversale al flusso in ogni suo punto e si fissi un verso di attraversamento di Σ . Sia P_0 un punto di Σ , allora $P_1 = \Pi(P_0)$ è il punto in cui l'orbita che parte da P_0 reinterseca Σ con verso concorde a quello fissato. Analogamente, si definisce $\Pi(P_1)$ e Π su ogni punto di Σ .

Modello di Hénon e Heiles

$$H(\underline{p},\underline{q}) = \frac{\omega_1}{2} \left(p_1^2 + q_1^2 \right) + \frac{\omega_2}{2} \left(p_2^2 + q_2^2 \right) + q_1^2 q_2 - \frac{1}{3} q_2^3 .$$

- Per piccoli valori dell'energia $\|\underline{q}\| \ll 1$, il sistema si comporta come la sua approssimazione quadratica (una coppia di oscillatori di frequenze $\omega_1 > 0 \in \omega_2 > 0$) con una perturbazione costituita dai termini cubici.
- Scegliamo la superficie tridimensionale Σ individuata dall'equazione $q_1 = 0$. Dalle equazioni di Hamilton segue immediatamente che se l'energia E è positiva, allora Σ è trasversa al flusso.
- Studiamo il flusso del modello di Hénon e Heiles a valori fissati dell'energia (quindi su una superficie 3D) con le sezioni di Poincaré relative alla superficie Σ. L'intersezione giace quindi sulla superficie 2D individuata dall'equazione:

$$H(p_1, p_2, 0, q_2) = \frac{\omega_1}{2}p_1^2 + \frac{\omega_2}{2}(p_2^2 + q_2^2) - \frac{1}{3}q_2^3 = E ;$$

quindi un punto (p_2, q_2) delle sezioni di Poincaré individua un'orbita (poiché $q_1 = 0 e p_1$ è dato dall'equazione precedente, con segno assunto positivo).

• Dallo studio del potenziale associato al modello di Hénon e Heiles, ovvero $V(q_1, q_2) = \frac{\omega_1}{2}q_1^2 + \frac{\omega_2}{2}q_2^2 + q_1^2q_2 - \frac{1}{3}q_2^3$ segue che la sezione di Poincaré del flusso è limitata alla regione

$$\frac{\omega_2}{2}(p_2^2 + q_2^2) - \frac{1}{3}q_2^3 \le E \; ,$$

purché *E* sia minore di un'energia di fuga $E_f = \min \left\{ \frac{\omega_1^3}{24} + \frac{\omega_1^2 \omega_2}{8}, \frac{\omega_2^3}{6} \right\}.$



Figure 2. Schema del metodo RK2. Le curve rappresentano il moto vero per un tempo τ . L'incremento $\underline{x}_{n+1} - \underline{x}_n$ è calcolato utilizzando il valore del campo f nel punto indicato con n + 1/2 dentro a un \bigcirc .

Integratori numerici

Si consideri l'eq. differenziale

$$\underline{\dot{x}} = \underline{f}(\underline{x}, t) \; ,$$

il metodo più semplice (di Eulero) per approssimare numericamente un moto con condizione iniziale $\underline{x}(0) = \underline{x}_0$ consiste nel calcolo della successione $\{\underline{x}_n\}_{0 \le n \le N}$ tale che $\underline{x}_{n+1} = \underline{x}_n + \tau \underline{f}(\underline{x}_n, n\tau)$. L'errore sul singolo passo è $\mathcal{O}(\tau^2)$ e quindi, a un fissato tempo $T = N(\tau)\tau$, $\|\underline{x}(T) - \underline{x}_{N(\tau)}\| = \mathcal{O}(\tau)$.

Metodi di Runge–Kutta

I metodi di Runge–Kutta sono un raffinamento ad ordini superiori di quello di Eulero. Per esempio, il metodo RK2 richiede la valutazione del campo vettoriale \underline{f} a metà dell'intervallo di integrazione; le formule iterative di calcolo dei punti della successione di approssimanti del moto sono le seguenti:

$$d\underline{x}_{n+\frac{1}{2}} = 1/2\tau \underline{f}(\underline{x}_n, n\tau) , \qquad \underline{x}_{n+1} = \underline{x}_n + \tau \underline{f}(\underline{x}_n + d\underline{x}_{n+\frac{1}{2}}, (n+1/2)\tau) .$$

Dallo sviluppo in serie della soluzione $\underline{x}(t)$ in prossimità del punto $n\tau$ si deduce immediatamente che l'errore effettuato sul singolo passo è $\mathcal{O}(\tau^3)$ e quindi, a un fissato istante T, $\|\underline{x}(T) - \underline{x}_{N(\tau)}\| = \mathcal{O}(\tau^2)$.

- Analogamente, il metodo RK4 (molto usato) è basato su delle formule iterative che richiedono ad ogni passo 4 valutazioni del campo \underline{f} ed è tale che l'errore finale sia $\mathcal{O}(\tau^4)$.
- **Pregio:** Il comportamento degli integratori di tipo Runge–Kutta è buono anche in condizioni di bassa regolarità del campo f.

- **Difetto:** Sono integratori piuttosti lenti rispetto a quelli a passo variabile.
- Difetto: I metodi di tipo Runge–Kutta non sono simplettici.

Integratori numerici simplettici

Consideriamo ora un sistema Hamiltoniano autonomo, cioè dotato di un sistema di coordinate $(\underline{p}, \underline{q})$ (definite su un opportuno insieme detto spazio delle fasi) e di una Hamiltoniana H = H(p, q) tale che le eq. del moto sono

$$\dot{q}_j = \partial H / \partial p_j$$
 $\dot{p}_j = -\partial H / \partial q_j$ $\forall j = 1, \dots, n$

Ogni integratore numerico definisce (in modo più o meno esplicito) una mappa Ψ^{τ} dallo spazio delle fasi in se stesso. Un integratore si dice simplettico se $(\underline{P}, \underline{Q}) = \Psi^{\tau}(\underline{p}, \underline{q})$ è una trasformazione canonica univalente. Ricordiamo che uno dei criteri di canonicità è che la trasformazione preservi la somma delle aree proiettate sui piani $(p_j, q_j) \forall j = 1, \ldots, n$, cioè:

$$\sum_{j=1}^n dP_j \wedge dQ_j = \sum_{j=1}^n dp_j \wedge dq_j \; .$$

• **Pregio:** gli integratori simplettici rispettano tutte le proprietà essenziali di un sistema Hamiltoniano; chi è interessato a un breve approfondimento che ne spiega le ragioni veda il punto seguente.

• Le conseguenze di un teorema sugli integratori simplettici Supponiamo che l'integratore simplettico definisca una mappa Ψ^{τ} tale che $|\Psi^{\tau} - \Phi_{H}^{\tau}| \lesssim \mathcal{O}(\tau^{m+1})$, dove Φ_{H}^{τ} è il flusso indotto da H; allora esistono una Hamiltoniana $K = H + K_{\tau}$, dove $|K_{\tau}| \lesssim \mathcal{O}(\tau^{m+1})$, e una costante $\tau^* > 0$ tali che

$$|\Psi^{\tau} - \Phi_K^{\tau}| \lesssim \mathcal{O}(\tau \exp(-\tau^*/\tau))$$
.

Ciò significa che anche per tempi esponenzialmente grandi rispetto a $1/\tau$, la differenza tra l'integrazione simplettica e il flusso indotto da $K \in \mathcal{O}(\tau^m)$. Quali sono le differenze tra l'integrazione simplettica e il flusso indotto dalla Hamiltoniana H del sistema in considerazione? Se effettuiamo il confronto per tempi $\leq \mathcal{O}(\tau^m \exp(\tau^*/\tau))$, le discrepanze sono sostanzialmente quelle dovute alla piccola perturbazione K_{τ} . Ciò implica, ad esempio, che quando il moto si svolge su una superficie compatta dell'energia $H(\underline{p},\underline{q}) = E$, ogni costante del moto per H, durante l'integrazione numerica, subirà delle oscillazioni dello stesso ordine di grandezza di K_{τ} (si veda figura 5).



Figure 3. Schema del metodo leap-frog. Le curve rappresentano il moto vero per un tempo τ . I segmenti tratteggiati e continui indicano, rispettivamente, il flusso indotto da $A \in B$.

Metodo leap-frog (o del punto centrale)

Supponiamo che la Hamiltoniana del sistema in studio possa essere scissa in due parti che siano entrambe integrabili, ad esempio sia H del tipo:

$$H(\underline{p},\underline{q}) = A(\underline{p}) + B(\underline{q}) \; .$$

Il metodo leap–frog determina una successione finita $\{(\underline{p}_n,\underline{q}_n)\}_{0\leq n\leq N}$ che approssima il moto uscente da $(\underline{p}_0,\underline{q}_0)$. La formula iterativa è la seguente:

$$(\underline{p}_{n+1},\underline{q}_{n+1}) = \Phi_B^{\tau/2} \circ \Phi_A^\tau \circ \Phi_B^{\tau/2}(\underline{p}_n,\underline{q}_n) \ ,$$

dove Φ_A^{τ} e $\Phi_B^{\tau/2}$ sono rispettivamente i flussi indotti da A dopo un tempo τ e da B al tempo $\tau/2$.

- Il metodo leap-frog è evidentemente simplettico, poiché il flusso Hamiltoniano a un tempo fissato è una trasformazione canonica univalente e la composizione di trasformazioni canoniche è a sua volta canonica.
- L'errore effettuato dal metodo leap-frog ad ogni singolo passo è $\mathcal{O}(\tau^3)$ e quindi, a un tempo T indipendente da τ , è $\mathcal{O}(\tau^2)$ (si veda fig. 4).

Dim. (cenno) Si ricordi l'espressione del flusso che fa uso della serie di Lie: \forall Hamiltoniana autonoma H se τ è sufficientemente piccolo allora sussiste l'uguaglianza $\exp(\tau L_H)f := \sum_{j=0}^{\infty} 1/j! \tau^j L_H^j f = \Phi_H^{\tau} f$, dove $L_H f$ indica la parentesi di Poisson di f con H, \forall funzione f definita sullo spazio delle fasi. Scrivendo i primi termini delle espansioni in serie, si verifica che

$$\exp(\tau L_{A+B})f = \exp(1/2\tau L_B)\exp(\tau L_A)\exp(1/2\tau L_B)f + \mathcal{O}(\tau^3) .$$

Poiché ciascuna delle coordinate può sostituire f, la tesi è provata.



Figure 4. Studio del massimo errore relativo sull'energia indotto dalle integrazioni numeriche in funzione del passo di integrazione τ . La condizione iniziale corrisponde a un'orbita caotica per il modello di Hénon e Heiles risonante ($\omega_1 = \omega_2 = 1$) con valore di E = 1/8; per ciascuna delle prime 20 sezioni di Poincaré è stato effettuato il confronto tra l'energia data dall'integrazione numerica e quella iniziale. I dati corrispondenti ai metodi RK2 e leap-frog sono rispettivamente indicati con i simboli $\Delta e \oplus$. Alla fine del grafico, l'errore é crescente al decrescere di τ , ciò è dovuto all'accumulo degli errori di round-off.

• Dopo aver esplicitato l'iterazione, l'espressione che fornisce l'*N*-esimo punto della successione di approssimanti del moto si scrive come segue:

$$(\underline{p}_N,\underline{q}_N) = \Phi_B^{\tau/2} \circ \Phi_A^\tau \circ \left(\Phi_B^\tau \circ \Phi_A^\tau\right)^{N-1} \circ \Phi_B^{\tau/2}(\underline{p}_0,\underline{q}_0)$$

dove abbiamo usato l'uguaglianza $\Phi_B^{\tau/2} \circ \Phi_B^{\tau/2} = \Phi_B^{\tau}$ (*B* è autonomo!). Dovrebbe essere ora chiara l'origine del nome leap–frog (ovvero il gioco della "scavalchina"), ad ogni *j*–esimo passo (eccettuato il ricongiungimento finale) la quantità di tempo totale per cui si è calcolato flusso di *B* è prima $(j - 1/2)\tau$ e poi $(j + 1/2)\tau$ e quindi è alternativamente maggiore o minore del tempo per cui si è iterato il flusso di *A*. Si ricordi che, in generale, $\Phi_A^{\tau} \circ \Phi_B^{\tau} = \Phi_B^{\tau} \circ \Phi_A^{\tau} = \Phi_{A+B}^{\tau}$ solo se $\{A, B\} = 0$.

• La fig. 4 evidenzia che entrambi i metodi RK2 e leap–frog sono di ordine 2 (ovvero, a un tempo T indipendente da τ , l'errore è $\mathcal{O}(\tau^2)$): si osservi in particolare il comportamento "a regime" per $10^{-5} \leq \tau \leq 10^{-3}$.



Figure 5. Studio del massimo errore relativo sull'energia indotto dalle integrazioni numeriche in funzione del numero di sezioni di Poincaré (ovvero, del tempo totale di integrazione). Il modello, le condizioni iniziali e la simbologia sono i medesimi rispetto a quelli già considerati in fig. 4. Sia per il metodo RK2 che per il leap-frog, il passo di integrazione scelto è $\tau = 10^{-4}$.

- La fig. 5 mette in evidenza il diverso comportamento su tempi lunghi di un integratore simplettico rispetto a uno che non lo è.
 Il metodo leap-frog preserva l'energia a meno di un errore che è oscillante nel tempo (ma quest'ultima informazione non è riportata in figura) e che raggiunge abbastanza rapidamente un valore massimo; in seguito, l'errore massimo non varia anche per tempi lunghissimi (numericamente, ciò è vero finché non comincia a manifestarsi l'accumulo degli errori di round-off). Questo comportamento talmente buono è in accordo con le considerazioni teoriche riportate in precedenza.
 La precisione con cui il metodo RK2 preserva l'energia si deteriora inesorabilmente con lo scorrere del tempo. Tutti i metodi di integrazione non simplettici, anche a ordini superiori, manifestano un analogo tipo di peggioramento delle prestazioni.
- Le migliori caratteristiche degli integratori simplettici rispetto agli altri sono numericamente evidenti, anche quando si studia la conservazione di superfici invarianti che non corrispondono all'esistenza di costanti del moto globali del sistema. I tori KAM (che verranno discussi in dettaglio nel prosieguo del corso) costituiscono un esempio di tali superfici.



Figure 6. Sezione di Poincaré per il caso non risonante ($\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = (\sqrt{5} - 1)/2$) del modello di Hénon e Heiles corrispondente al valore dell'energia E = 0.030.

Sezioni di Poincaré del modello di Hénon e Heiles: visione d'assieme

• Nel caso non risonante la zona centrale è costituita da delle curve invarianti racchiuse una dentro l'altra. Inoltre, si possono osservare delle orbite periodiche (in fig. 6 ne sono ben visibili alcune, rispettivamente di periodo 3, 7 e 4), con il loro corredo di curve separatrici. Per valori dell'energia non troppo vicini all'energia di fuga, permangono delle curve invarianti nelle zone libere tra una curva separatrice relativa a un'orbita periodica e l'altra.



Figure 7. Sezione di Poincaré per il caso non risonante ($\omega_1 = 1$ e $\omega_2 = (\sqrt{5} - 1)/2$) del modello di Hénon e Heiles corrispondente al valore dell'energia E = 0.039344, che è leggermente inferiore a quello di fuga.

• Al crescere dell'energia, la regione centrale con curve chiuse invarianti concentriche permane, ma occupa un'area che in percentuale è decrescente. Si possono ancora osservare delle regioni costituite da moti ordinati attorno a delle orbite periodiche (in fig. 7 sono ancora visibili le regioni "dominate" dalle orbite di periodo 3, 7 e 4, già presenti in fig. 6). Al crescere dell'energia, aumenta l'area della superficie che viene riempita in modo abbastanza uniforme anche da una sola orbita che parte da un qualsiasi punto iniziale all'interno della superficie stessa.



Figure 8. Sezione di Poincaré per il caso risonante ($\omega_1 = \omega_2 = 1$) del modello di Hénon e Heiles corrispondente al valore dell'energia $E = 0.0833333 \simeq 1/12$.

- *Nel caso risonante*, anche ad energie molto basse, il grafico non è mai costituito solo da curve invarianti racchiuse l'una dentro l'altra.
- Si ricordi che il modello di Hénon e Heiles è un sistema reversibile, poiché esso è autonomo e pari nei momenti; cioè, se $(\underline{p}(t), \underline{q}(t))$ è una soluzione, allora lo è anche la sua riflessa temporale $(\underline{\tilde{p}}(t), \underline{\tilde{q}}(t))$ data da: $\underline{\tilde{p}}(t) = -\underline{p}(-t)$ e $\underline{\tilde{q}}(t) = \underline{q}(-t)$.



Figure 9. Sezione di Poincaré per il modello di Hénon e Heiles nella stessa situazione di fig. 8. Le condizioni iniziali delle 8 orbite sono evidenziate da uno 0 circondato da un simbolo \bigcirc . Le condizioni iniziali sono le stesse di fig. 8, ma ora la sezione di Poincaré è stata tracciata solo per valori positivi del momento p_1 , mentre in fig. 8 sono state considerate anche le sezioni a momento negativo.

• Il confronto delle fig. 8 e 9 evidenzia che ciascuna delle orbite invarianti topologicamante coniugate a un cerchio ha una sua curva corrispondente per inversione temporale, che è in una regione completamente diversa del grafico. Inoltre, si osservi che la curva separatrice si sovrappone a se stessa e delimita le regioni in cui abbiamo diversi insiemi di curve invarianti racchiuse l'una dentro l'altra.



Figure 10. Sezione di Poincaré per il caso risonante ($\omega_1 = \omega_2 = 1$) del modello di Hénon e Heiles corrispondente al valore dell'energia E = 1/8.

• Anche nel caso risonante, ovviamente, *al crescere dell'energia* aumenta la superficie occupata dalle separatrici di orbite periodiche, che sono riempite in modo uniforme e casuale da una sola orbita. Ricordando una famosa descrizione dovuta ad Hénon, si osserva che persistono delle isole di moti ordinati in un mare di orbite caotiche.



Figure 11. Sezione di Poincaré per il modello di Hénon e Heiles nella stessa situazione di fig. 10. Le condizioni iniziali delle 6 orbite sono evidenziate da uno 0 circondato da un simbolo (). Inoltre, è specificato il numero progressivo (sempre all'interno di un ()) di tracciamento della sezione di Poincaré relativa all'orbita periodica di periodo 5. Sono tracciati 1500 sezioni dell'orbita caotica.

Sezioni di Poincaré del modello di Hénon e Heiles: alcuni dettagli

• Le curve chiuse attorno a un'orbita periodica (che sono dette di librazione) vengono descritte dai punti di sezione di una sola orbita. Questi punti saltano da una curva chiusa all'altra, seguendo la stessa legge temporale dell'orbita periodica.



Figure 12. Sezione di Poincaré per il modello di Hénon e Heiles nella stessa situazione e con le stesse condizioni iniziali di fig. 11. In questo grafico sono tracciati 10000 sezioni dell'orbita caotica.

• Le orbite caotiche possono stazionare per lungo tempo nei pressi di una particolare orbita periodica. In seguito, "dopo aver trovato il passaggio" verso un'altra regione del grafico possono riempire completamente questa seconda zona, prima di trovarne un'eventuale terza e così via.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [1] Cap. VI delle "Dispense di Meccanica Celeste" di A. Giorgilli.
- [2] "Numerical Recipes in C" di AA. VV., Cambridge University Press, paragrafi 16.0 e 16.1 (per quanto riguarda i metodi di integrazione numerica Runge–Kutta).
- [3] Benettin, G. e Giorgilli, A.: "On the Hamiltonian Interpolation of Nearto-the-Identity Symplectic Mappings with Application to Symplectic Integration Algorithms", *Journal of Statistical Physics*, vol. 74, N. 5/6, 1117–1143 (1994) (per quanto riguarda una discussione delle proprietà degli integratori simplettici; in particolare, si consiglia la lettura del primo e dell'ultimo paragrafo).