

## Integrazione delle equazioni del moto

In generale, le equazioni del moto della meccanica newtoniana si presentano nella forma di sistemi di equazioni differenziali del secondo ordine in cui le derivate seconde delle variabili dinamiche (le coordinate) sono espresse mediante il rapporto tra la legge di forza e la massa del corpo.

La più generale legge di forza compatibile con un sistema di equazioni in forma normale (in cui cioè le accelerazioni non dipendono da derivate delle coordinate di ordine superiore al primo) permette di esprimere le accelerazioni come funzioni (in genere non lineari) delle posizioni e velocità di tutti i gradi di libertà ed eventualmente funzione esplicita del tempo (il caso di forzanti esterne).

Formalmente significa lavorare con un sistema del tipo

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1(t) &= a_1(x_1(t), \dots, x_N(t), \dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_N(t), t) \\ \ddot{x}_2(t) &= a_2(x_1(t), \dots, x_N(t), \dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_N(t), t) \\ &\dots \\ \ddot{x}_N(t) &= a_N(x_1(t), \dots, x_N(t), \dot{x}_1(t), \dots, \dot{x}_N(t), t)\end{aligned}$$

Una volta imposte le condizioni iniziali (posizioni e velocità all'istante iniziale  $t_0$ ):

$$\begin{aligned}x_1(t_0) &= x_0^{(1)} \\ \dot{x}_1(t_0) &= v_{x0}^{(1)} \\ x_2(t_0) &= x_0^{(2)} \\ \dot{x}_2(t_0) &= v_{x0}^{(2)} \\ &\dots \\ x_N(t_0) &= x_0^{(N)} \\ \dot{x}_N(t_0) &= v_{x0}^{(N)},\end{aligned}$$

sotto opportune condizioni sulle proprietà delle accelerazioni come funzioni dei loro argomenti, sappiamo che esiste una soluzione unica per il problema.

Risolvere numericamente il problema delle equazioni del moto significa trasformare le equazioni differenziali in relazioni che permettano di calcolare l'evoluzione di posizioni e velocità su piccoli intervalli discreti di tempo

con accuratezza controllata. L'idea di base è che se abbiamo uno schema numerico che permette di passare dalle condizioni iniziali alle posizioni e velocità al tempo  $t_0 + \Delta t$ , questo potrà essere reiterato un numero arbitrario di volte. Naturalmente è cruciale che si possa tenere sotto controllo gli errori numerici così introdotti.

Esistono molti algoritmi per la soluzione di generici sistemi di equazioni differenziali. In questo corso ci limiteremo ad approfondire l'utilizzo di un unico algoritmo che, accanto ad alcune limitazioni superabili, ha molti vantaggi, uniti ad un'estrema semplicità di derivazione e di implementazione.

L'algoritmo è noto in contesti diversi con nomi diversi. Qui ci riferiremo ad esso come algoritmo di Verlet (da Loup Verlet che lo riscoprì negli anni '60 del secolo scorso). Una derivazione elementare è la seguente. Per semplicità consideriamo il caso di un solo grado di libertà. L'estensione a più gradi di libertà è banale.

Indichiamo per brevità con un indice 0 le quantità calcolate al tempo generico  $t$  e con indice + quelle calcolate al tempo  $t + \Delta t$ . Abbreviamo anche  $\Delta t$  con  $\Delta$ . Se per piccoli intervalli di tempo  $\Delta$  approssimiamo la forza con una forza costante, possiamo ottenere l'evoluzione locale mediante le formule

$$\begin{aligned}x_+ &= x_0 + \Delta v_0 + \frac{\Delta^2}{2} a_0 \\v_+ &= v_0 + \Delta a_0\end{aligned}\tag{1}$$

Questa discretizzazione delle equazioni del moto, nota come formula di Eulero, corrisponde a prendere i termini fino a quelli contenenti l'accelerazione in un'espansione in serie di Taylor della posizione e della velocità al tempo  $t + \Delta$  attorno al tempo  $t$ .

La qualità dell'integrazione delle equazioni fornita dall'algoritmo di Eulero non è eccezionale. Uno dei problemi collegati a questo algoritmo è la mancanza di reversibilità per inversione temporale dello stesso nelle situazioni in cui ci si aspetterebbe che la dinamica esatta sia reversibile. Per reversibilità nel tempo del moto del sistema intendiamo che la stessa legge oraria,  $x(t)$  che descrive il moto dal tempo 0 al tempo  $T$ , permette di ottenere il moto dal tempo  $T$  a  $2T$ , corrispondente a partire dal tempo  $T$  in  $x(T)$  con velocità  $-\dot{x}(T)$ , secondo la legge  $x(T + t) = x(T - t)$ .

In genere leggi orarie reversibili nel tempo implicano la presenza di interazioni non dipendenti né dalla velocità né dal tempo. Nel seguito considereremo questa situazione.

Invertendo la velocità al tempo  $t + \Delta$  e seguendo il sistema per un ulteriore intervallo  $\Delta$  il sistema dovrebbe tornare al punto iniziale con la stessa velocità

iniziale ma invertita. Se facciamo questo con le (1) troviamo (indicando con un apice le quantità ottenute quando il sistema “torna indietro”):

$$\begin{aligned}x'_0 &= x_0 + \frac{\Delta^2}{2}(a_+ - a_0) \\v'_0 &= -v_0 - \Delta(a_0 - a_+)\end{aligned}\tag{2}$$

Per cercare di risolvere il problema (e sperabilmente migliorare l' algoritmo) si può procedere nel seguente modo:

l' equazione meno precisa è quella per le velocità. Infatti il termine successivo dell' espansione in serie sarebbe proporzionale a  $\Delta^2$ . Aggiungiamo allora all' equazione per la velocità un termine correttivo cercando di ripristinare anche per l' algoritmo discretizzato l' esatta simmetria per inversione temporale. Avremo allora:

$$\begin{aligned}x_+ &= x_0 + \Delta v_0 + \frac{\Delta^2}{2}a_0 \\v_+ &= v_0 + \Delta a_0 + \Delta c_0\end{aligned}\tag{3}$$

Se adesso invertiamo le velocità e seguiamo il sistema per un ulteriore  $\Delta$  troviamo i nuovi valori:

$$\begin{aligned}x'_0 &= x_+ - \Delta v_+ + \frac{\Delta^2}{2}a_+ \\v'_0 &= -v_+ + \Delta a_+ + \Delta c_+\end{aligned}$$

ovvero

$$x'_0 = x_0 + \frac{\Delta^2}{2}(a_+ - a_0) - \Delta^2 c_0\tag{4}$$

$$v'_0 = -v_0 - \Delta(a_0 - a_+) - \Delta(c_0 - c_+)\tag{5}$$

se richiediamo che  $x'_0 = x_0$  e  $v'_0 = -v_0$  abbiamo dalla (4)  $c_0 = \frac{a_+ - a_0}{2}$  e dalla (5)  $c_+ = \frac{a_0 - a_+}{2}$ . Quindi l' algoritmo (Verlet) è:

$$\begin{aligned}x_+ &= x_0 + \Delta v_0 + \frac{\Delta^2}{2}a_0 \\v_+ &= v_0 + \frac{\Delta}{2}(a_0 + a_+)\end{aligned}\tag{6}$$

che differisce da quello di Eulero solo per aver sostituito all' accelerazione che appare nel termine di velocità il valor medio tra l' accelerazione all' istante iniziale ( $a_0$ ) e quella all' istante  $t + \Delta$  ( $a_+$ ). Da notare che l' algoritmo resta esplicito perché l' accelerazione  $a_+$  può essere calcolata appena è stata aggiornata la posizione al valore  $x_+$ .

Questo spiega anche la limitazione a forze che non dipendano dalla velocità (anche se una generalizzazione è possibile per questo caso).

Un' analisi elementare dell' errore introdotto dalla discretizzazione può essere svolta a partire dalla differenza tra le quantità ottenute al tempo  $\Delta$  mediante le (6) e la formula di Taylor di posizione e velocità arrestata al termine di accelerazione.

La formula per  $x(t + \Delta)$  è corretta fino (incluso) il secondo ordine in  $\Delta$ . Nella formula per la velocità appare  $a(t + \Delta) = a(x(t + \Delta))$ . Sostituendo l'espressione per  $x(t + \Delta)$  abbiamo:

$$\begin{aligned} a(t + \Delta) &= a\left(x_0 + v_0\Delta + a_0\frac{\Delta^2}{2}\right) \\ &= a(x_0) + \left.\frac{da}{dx}\right|_{x=x_0} \cdot \left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=0} \Delta + O(\Delta^2) \end{aligned} \quad (7)$$

$$= a(x_0) + \dot{a}_0\Delta + O(\Delta^2) \quad (8)$$

che inserita nell'equazione per la velocità (eq. 6) dà l'espansione corretta fino al secondo ordine in  $\Delta$ . E' un semplice esercizio di analisi mostrare che il termine successivo non viene dato in modo esatto, in generale.

In tal modo possiamo dedurre:

$$\begin{aligned} x(t + \Delta) - x_+ &= A\Delta^3\dot{a}(\tau) \\ v(t + \Delta) - v_+ &= B\Delta^3\ddot{a}(\tau') \end{aligned} \quad (9)$$

Dove A e B sono due costanti numeriche e  $\tau$  e  $\tau'$  sono due istanti di tempo appartenenti all' intervallo  $[t, t + \Delta]$  (cfr. appendice). Se integriamo la traiettoria per un intervallo di tempo finito il numero di step di integrazione sarà inversamente proporzionale a  $\Delta$  e quindi l' errore globale su un tempo finito sarà maggiore di un ordine di grandezza rispetto a quello locale (cfr. appendice).

## Estensione al caso di forze dipendenti dalla velocità

Nel caso di forze dipendenti dalla velocità, una semplice modifica dell'algoritmo di Verlet (Groot e Warren, 1997) permette di ottenere un algoritmo di qualità confrontabile (ordine  $\Delta^2$  globale su velocità e posizione).

$$x_+ = x_0 + \Delta v_0 + \frac{\Delta^2}{2} a_0$$
$$\tilde{v} = v_0 + \Delta a_0 \quad (10)$$

$$\tilde{a} = a(x_+, \tilde{v}) \quad (11)$$

$$v_+ = v_0 + \frac{\Delta}{2} (a_0 + \tilde{a}). \quad (12)$$

$$a_+ = a(x_+, v_+) \quad (13)$$

Si lascia come esercizio la verifica che l'errore locale per posizione e velocità è di ordine  $\Delta^3$ .

## Controllo dell' accuratezza mediante verifica della conservazione dell' energia meccanica

Nel caso di sistemi conservativi con forze che dipendano dalle sole coordinate, la verifica dell' adeguatezza del time-step di integrazione può essere basata sul controllo dell' accuratezza con cui si conserva l' energia totale meccanica (cinetica + potenziale). Infatti, per un sistema di questo tipo, l' integrazione esatta garantisce la conservazione esatta dell' energia totale: è una costante del moto. All' integrazione approssimata, affetta da un errore su posizione e velocità dell' ordine  $\Delta^2$ , corrisponderà una conservazione dell' energia solo allo stesso ordine. L' accuratezza da richiedere nella conservazione dell' energia dipenderà in genere dai requisiti di precisione dell' integrazione. Quello che appare evidente quando si analizzano le deviazioni dal valore iniziale dell' energia con l' algoritmo di Verlet è che queste, per un ampio intervallo di valori di  $\Delta$ , fluttuano attorno al valore iniziale. Per stabilire se le fluttuazioni osservate sono grandi o piccole occorre una seconda scala significativa di energia. Questa è costituita in modo naturale dalle variazioni lungo la traiettoria dei singoli termini che contribuiscono all' energia totale.

## Appendice

Per piccoli  $\Delta t$  l' errore locale sulla posizione è dato dal resto della formula di Taylor al terzo ordine:

$$\frac{1}{3!}\dot{a}(\tau)\Delta^3 \quad (14)$$

Per calcolare l' errore sulla velocità occorre confrontare l' espansione in serie di Taylor per la velocità con il risultato della formula per  $v_+$  dell' eq. (6), espandendo  $a_+$  attorno a zero.

Abbiamo:

$$a_+ = a_0 + \dot{a}_0\Delta + \ddot{a}_0\Delta^2/2 + O(\Delta^3) \quad (15)$$

e quindi:

$$v_+ = v_0 + \frac{1}{2}(a_0 + a_0)\Delta + \frac{1}{2}\dot{a}_0\Delta^2 + \frac{1}{4}\ddot{a}_0\Delta^3 + O(\Delta^4) \quad (16)$$

che differisce dai primi termini dall' espansione esatta

$$v_+ = v_0 + a_0\Delta + \frac{1}{2}\dot{a}_0\Delta^2 + \frac{1}{3!}\ddot{a}_0\Delta^3 + O(\Delta^4) \quad (17)$$

sul termine proporzionale a  $\Delta^3$ .

Per passare dalle formule sull' errore locale all' errore globale dopo un tempo  $T = N\Delta$  è sufficiente notare che sommando  $N$  termini di errore locale abbiamo (per la posizione, calcoli analoghi per la velocità):

$$A\Delta^3(\dot{a}(\tau_1) + \dot{a}(\tau_2) + \dots + \dot{a}(\tau_N)). \quad (18)$$

Moltiplicando e dividendo per  $N$  e ricordando che  $T = N\Delta$ :

$$\frac{(\dot{a}(\tau_1) + \dot{a}(\tau_2) + \dots + \dot{a}(\tau_N))}{N}AT\Delta^2. \quad (19)$$

E' immediato riconoscere nella frazione la media aritmetica dei valori di  $\dot{a}$  ai tempi  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N$ . D'altra parte la media aritmetica è sempre minore del massimo dei valori mediati e maggiore del minimo. E sotto la ragionevole ipotesi che  $\dot{a}$  sia una funzione continua, possiamo dire che esisterà sicuramente un tempo  $\tau$  nell' intervallo  $(0, T)$  tale che

$$\dot{a}(\tau) = \frac{(\dot{a}(\tau_1) + \dot{a}(\tau_2) + \dots + \dot{a}(\tau_N))}{N}. \quad (20)$$