

POLITECNICO DI TORINO

Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Matematica

Tesi di Laurea Magistrale

Elettrodinamica non lineare e oscillatore di Born: studio analitico e numerico



Relatore
Prof. Gianni Coppa

Candidato
Stefano Greco
S287705

Anno Accademico 2021-2022

Sommario

Nell'ambito della teoria dell'elettrodinamica non lineare l'oscillatore di Born rappresenta un possibile analogo dell'oscillatore armonico della meccanica.

In questo lavoro, dopo aver introdotto i concetti di base che hanno permesso lo sviluppo di tale teoria, sono state studiate alcune proprietà per il comportamento dell'oscillatore di Born dal punto di vista classico e quantistico: nel primo caso tramite l'approccio dei sistemi dinamici, nel secondo ricavando delle leggi di convergenza sperimentali per l'approssimazione degli autovalori di un opportuno operatore hermitiano che deriva dalla quantizzazione dell'hamiltoniana classica.

In entrambi i casi sono state ricavate alcune particolari relazioni analitiche che coinvolgono le variabili dinamiche e gli operatori oggetto dello studio.

Ringraziamenti

Ci tengo a ringraziare particolarmente il mio relatore, Prof. Gianni Coppa, per il supporto alla stesura di questo lavoro di tesi. Si è dimostrato un professore competente e disponibile ma anche una persona buona ed umile: per me un esempio da seguire.

Aggiungo inoltre un sentito ringraziamento a tutti coloro che durante il mio percorso di laurea magistrale hanno mostrato interesse nei miei confronti per ciò che ho studiato, per l'andamento dei vari esami e della stesura della tesi.

Indice

1	L'oscillatore armonico	7
1.1	Introduzione	7
1.2	Applicazione delle equazioni di Eulero-Lagrange	8
2	La teoria di Born-Infeld	11
2.1	Introduzione	11
2.2	Lagrangiana "di Born"	11
2.3	Lagrangiana "di Born e Infeld"	13
2.4	Campo elettrico generato da una carica puntiforme	14
3	L'oscillatore di Born	17
3.1	Introduzione	17
3.2	Equazioni del moto	17
3.3	Studio di un caso con un termine forzante	22
3.4	Cambio di variabili dinamiche	25
4	L'oscillatore armonico quantistico	27
4.1	Introduzione	27
4.2	Risoluzione del problema: metodo analitico	27
4.3	Risoluzione del problema: metodo algebrico	29
5	Quantizzazione dell'hamiltoniana classica	31
5.1	Introduzione	31
5.2	Costruzione dell'operatore \hat{J}	31
5.3	Studio analitico dello spettro di \hat{J} e \hat{H}_B	33
5.4	Studio numerico dello spettro di \hat{J}	37
5.5	Cambio di variabili	49
6	Considerazioni finali	53
6.1	Possibili modelli regressivi	53
A	Equazioni di Eulero-Lagrange e di Hamilton	61
A.1	Introduzione	61
A.2	Derivazione delle equazioni	61

B	Proprietà degli operatori in meccanica quantistica	65
B.1	Introduzione	65
B.2	Proprietà fondamentali	65
B.3	Regole di calcolo	67
C	Principali codici utilizzati (MATLAB, R)	69
C.1	<i>main.m</i>	69
C.2	<i>autovalori.m</i>	71
C.3	<i>regressione.r</i>	73

Capitolo 1

L'oscillatore armonico

1.1 Introduzione

Lo studio di sistemi dal punto di vista teorico ed applicativo (matematico, fisico, ingegneristico, biologico...) non può prescindere dalla conoscenza e dall'applicazione del modello dell'oscillatore armonico.

Ogni volta che si studia un sistema in prossimità di un suo punto di equilibrio stabile, esso si comporta, approssimativamente, come un oscillatore armonico. Tale modello approssimato è dunque utilizzato nei più disparati esempi tra i quali: vibrazioni di corpi, oscillazioni di atomi nei reticoli, comportamento di circuiti... nel limite delle "piccole oscillazioni".[20]

Un classico esempio di studio dell'oscillatore armonico, che è anche il caso più semplice possibile, è quello del moto di una particella di massa m vincolata all'estremità di una molla di lunghezza a riposo l_0 (di massa trascurabile) con costante elastica k . La molla è vincolata all'origine di un sistema di riferimento xyz . Quando la molla è a riposo (cioè nella posizione di equilibrio), sulla massa non agisce alcuna forza. Allontanandosi da tale posizione di equilibrio, la massa subisce una forza di richiamo direttamente proporzionale all'allungamento rispetto alla posizione di equilibrio (legge di Hooke). Un esempio di sistema fisico unidimensionale con moto lungo l'asse x , che si comporta come appena descritto è rappresentato in Figura 1.1.

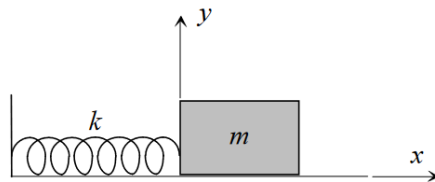


Figura 1.1. Rappresentazione schematica del moto oscillatorio lungo l'asse x di un corpo di massa m vincolato da una molla di costante elastica k . [17]

1.2 Applicazione delle equazioni di Eulero-Lagrange

Utilizzando le equazioni di Eulero-Lagrange e di Hamilton (A.8), (A.11) è possibile ottenere la soluzione al problema dell'oscillatore armonico in una dimensione. Si assume quindi per semplicità che $q = x$ e quindi $\dot{q} = \dot{x}$; segue quindi che $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$, $V = \frac{1}{2}kx^2$ sono rispettivamente l'energia cinetica e potenziale del sistema considerato. La funzione lagrangiana L sarà

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2, \quad (1.1)$$

da cui si procede applicando le equazioni di Eulero-Lagrange per ottenere

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{d}{dt}(m\dot{x}) = m\ddot{x}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -kx. \quad (1.3)$$

Segue $m\ddot{x} = -kx$ cioè la ben nota legge di Hooke. La funzione H definita come in (A.10) invece assumerà la forma

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2, \quad (1.4)$$

dove $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$. Le funzioni (1.1), (1.4) non dipendono esplicitamente dal tempo, quindi è possibile ricavare un integrale primo dell'energia (cioè una funzione differenziabile con continuità che rimane costante lungo le soluzioni del problema). Utilizzando quindi la (A.9) si ottiene la relazione

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E, \quad (1.5)$$

che mostra come l'hamiltoniana sia un modo per quantificare l'energia meccanica complessiva posseduta dall'oscillatore armonico. Le equazioni di Hamilton (A.11) (di seguito riportate per comodità) sono

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \end{cases} \quad (1.6)$$

che, per la (1.4), diventano

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} = -kx. \end{cases} \quad (1.7)$$

Il sistema appena ottenuto è un esempio di sistema hamiltoniano, quindi (come ricavato in (A.12)) le traiettorie sono le curve di livello per $H = E$.

È possibile analizzare il comportamento nel piano delle fasi (x, p) del sistema appena ottenuto: lo studio procede secondo la teoria dei sistemi dinamici cioè ricavando i punti di equilibrio di (1.7): $\dot{x} = 0 \implies p = 0, \dot{p} = 0 \implies x = 0$, quindi l'unico punto di equilibrio è $(x_{eq}, p_{eq}) = (0, 0)$. Considerando la matrice Jacobiana del sistema linearizzato

$$J_B = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} \\ \frac{\partial \dot{p}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{x}}{\partial x} & \frac{\partial \dot{x}}{\partial p} \\ \frac{\partial \dot{p}}{\partial x} & \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \end{bmatrix}, \quad (1.8)$$

calcolata in (x_{eq}, p_{eq}) , essa assume la forma

$$J_B(x_{eq}, p_{eq}) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -k & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.9)$$

il cui determinante vale $\frac{k}{m}$ che può essere identificato con ω^2 . Gli autovalori di tale matrice sono ottenuti risolvendo l'equazione

$$\det(J_B - \lambda I) = 0 \implies (-\lambda)^2 + \omega^2 = 0, \quad (1.10)$$

che, risolta, restituisce le soluzioni $\lambda_1 = -i\omega, \lambda_2 = i\omega$. Tale risultato porta a concludere che il punto di equilibrio è un centro e che, nel piano delle fasi, le traiettorie sono delle curve chiuse, dette cicli, rappresentate in Figura 1.2.

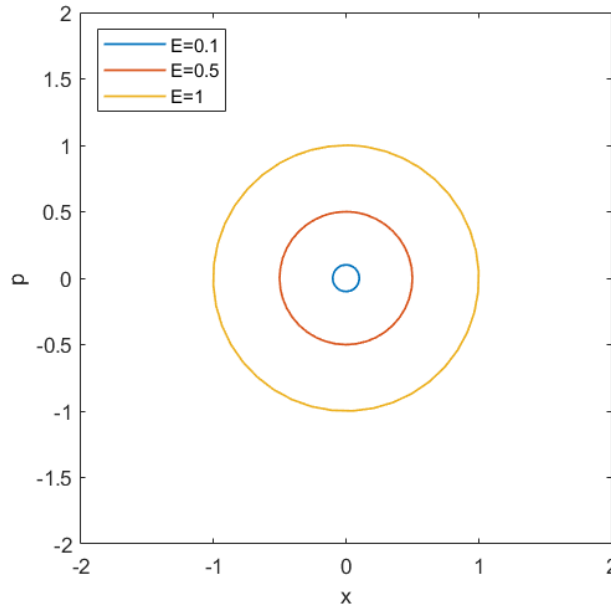


Figura 1.2. Traiettorie nel piano delle fasi, per differenti energie per il sistema (1.7).

Le equazioni del moto, dunque, hanno la nota forma

$$x(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t), \quad (1.11)$$

$$p(t) = C\cos(\omega t) + D\sin(\omega t), \quad (1.12)$$

con A, B, C, D costanti da determinare in base alle condizioni iniziali imposte dal particolare problema. Le espressioni (1.11) e (1.12) possono in generale essere riscritte nella forma più compatta

$$y(t) = \tilde{A}\cos(\omega t + \phi), \quad (1.13)$$

il cui andamento è mostrato in Figura 1.3.

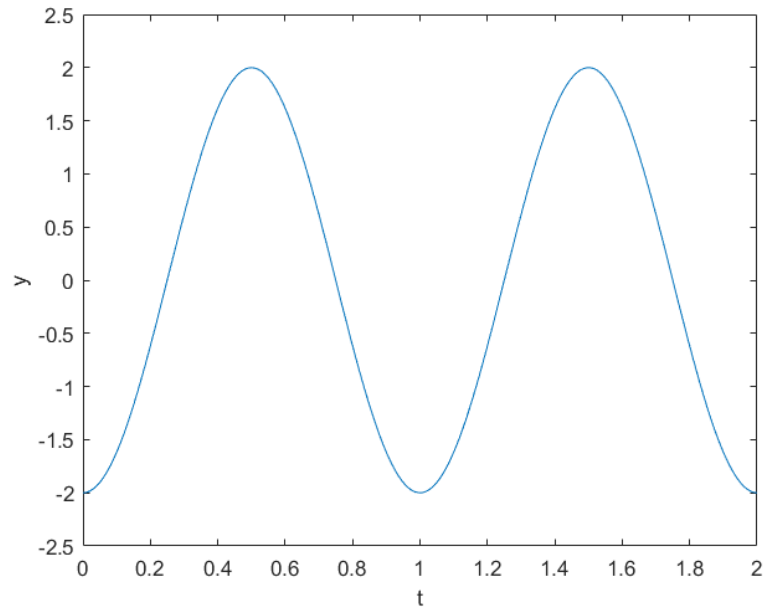


Figura 1.3. Esempio di andamento di un'equazione generica del moto $y(t)$ per $\tilde{A} = 2, \omega = 2\pi, \phi = \pi$.

Capitolo 2

La teoria di Born-Infeld

2.1 Introduzione

Il modello fu proposto inizialmente nel 1933 da M. Born in "On the Quantum Theory of the Electromagnetic Field" e nel 1934 da M. Born e L. Infeld in "Foundations of the New Field Theory".[4] [5]

Esso si proponeva come possibile risoluzione di un problema di fisica in elettromagnetismo: il valore del campo elettromagnetico di una sorgente puntiforme di carica, al tendere della distanza dalla carica a zero, cresce indefinitamente; ciò era in netta contraddizione con il principio di conservazione dell'energia. Con la formulazione di tale modello, si è posto un limite superiore al valore raggiungibile dal modulo del campo, senza andare ad alterare sensibilmente la teoria dell'elettromagnetismo, già ritenuta completa a fine '800.

Il modello di Born-Infeld è quello che si può definire il punto di partenza per lo studio di una nuova branca della Fisica, che prende il nome di elettrodinamica non lineare sviluppatasi principalmente nella prima metà del '900, ma ancora oggi oggetto di approfondimento, soprattutto a livello teorico.[21] [16]

In questo Capitolo viene introdotto il modello alla base di tale teoria e viene visto come esso porta a risolvere il problema della singolarità del campo elettrico nell'intorno di una carica puntiforme.

2.2 Lagrangiana "di Born"

M. Born, nel 1933, propose la lagrangiana "di Born" L_B [4] che si proponeva come sostituta della ben nota lagrangiana del campo elettromagnetico L_{EM}

$$L_{EM} = \frac{1}{2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2), \quad (2.1)$$

$$L_B = \beta^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{\beta^2}(\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2)} \right), \quad (2.2)$$

in cui il parametro $\beta > 0$ è stato opportunamente introdotto per limitare superiormente il valore del modulo del campo elettromagnetico. È immediato notare l'analogia con le equazioni della teoria della relatività speciale di Einstein: infatti in tale circostanza era stato imposto un limite alla velocità raggiungibile da una particella libera in moto, denominata con c (velocità della luce nel vuoto) e quindi la descrizione del moto nell'ambito della relatività ristretta si basava sulla lagrangiana

$$L_R = mc^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right). \quad (2.3)$$

Si può quindi notare, per confronto, una forte somiglianza con la (2.2). Se $E^2 - B^2 \ll \beta^2$ allora la (2.2) si può approssimare con la (2.1). La lagrangiana appena ottenuta, L_B , è anch'essa, come L_{EM} , un invariante di Lorentz in quanto nella (2.2) compaiono solo termini proporzionali a $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$, dove F indica il tensore di Faraday.

Applicando il principio di minima azione per la lagrangiana L_B è possibile ottenere le equazioni del moto. Si procede quindi ad ottenere dalla (2.2)

$$\frac{\partial(L_B - A_\nu j^\nu)}{\partial(\partial_\mu A_\nu)} = -\frac{F^{\mu\nu}}{\sqrt{\left(1 - 2\frac{L_{EM}}{\beta^2}\right)}}, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(L_B - A_\nu j^\nu)}{\partial A_\nu} = -j^\nu, \quad (2.5)$$

dalle quali segue

$$\partial_\mu F^{*\mu\nu} = j^\nu. \quad (2.6)$$

Così come $F^{\mu\nu}$, anche $F^{*\mu\nu}$ è un tensore antisimmetrico nella forma

$$F^{*\mu\nu} = \begin{bmatrix} 0 & -E_x^* & -E_y^* & -E_z^* \\ E_x^* & 0 & -B_z^* & B_y^* \\ E_y^* & B_z^* & 0 & -B_x^* \\ E_z^* & -B_y^* & B_x^* & 0 \end{bmatrix}; \quad (2.7)$$

secondo la (2.4) si ricavano le relazioni per $\mathbf{E}^*, \mathbf{B}^*$

$$\mathbf{E}^* = \frac{\mathbf{E}}{\sqrt{\left(1 - 2\frac{L_{EM}}{\beta^2}\right)}}, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{B}^* = \frac{\mathbf{B}}{\sqrt{\left(1 - 2\frac{L_{EM}}{\beta^2}\right)}}. \quad (2.9)$$

Utilizzando la (2.6) si giunge quindi al calcolo

$$\nu = 0 \implies \partial_\mu F^{*\mu 0} = j^0 \implies \partial_0 F^{*00} + \partial_1 F^{*10} + \partial_2 F^{*20} + \partial_3 F^{*30} = j^0, \quad (2.10)$$

essendo $j^0 = \rho$ si ottiene dunque tramite le componenti del tensore (2.7)

$$\frac{\partial E_x^*}{\partial x} + \frac{\partial E_y^*}{\partial y} + \frac{\partial E_z^*}{\partial z} = \rho, \quad (2.11)$$

che è equivalente a

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^* = \rho, \quad (2.12)$$

che, come è possibile notare, è formalmente simile alla prima equazione di Maxwell con l'unica differenza che risiede nella presenza del fattore

$$\epsilon^* = \frac{1}{\sqrt{\left(1 - 2 \frac{L_{EM}}{\beta^2}\right)}}. \quad (2.13)$$

Procedendo allo stesso modo ma utilizzando le restanti componenti del tensore $F^{*\mu\nu}$, si ottengono le altre tre equazioni per il campo, anch'esse formalmente simili alle equazioni di Maxwell

$$\frac{\partial \mathbf{E}^*}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B}^* - \mathbf{j}, \quad (2.14)$$

infine, utilizzando la condizione del Gauge di Lorenz $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu$ si ottengono

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}. \quad (2.16)$$

2.3 Lagrangiana "di Born e Infeld"

Nella teoria di Born-Infeld si utilizza la lagrangiana [5]

$$L_{BI} = \beta^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2}{\beta^2} - \frac{(\mathbf{E} \cdot \mathbf{B})^2}{\beta^4}} \right); \quad (2.17)$$

anche questa lagrangiana è un invariante di Lorentz [7].

È evidente che la (2.17) si riduce alla (2.2) se $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B} = 0$. Le equazioni del moto a partire da tale lagrangiana si possono derivare tramite il principio di minima azione (imponendo quindi nulla un'arbitraria variazione dell'azione S), con procedimenti analoghi a quelli riportati in Appendice A, ma applicati alla teorie di campo. A seguito dei passaggi analitici [5] si ottengono quindi le equazioni del moto, formalmente simili a (2.12), (2.14), (2.15), (2.16), con l'unica differenza dovuta alla presenza di un termine nella forma [1]

$$\epsilon^* = \frac{1}{\sqrt{[1 + \frac{1}{2\beta^2} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{1}{\beta^4 \det(g_{\mu\nu})} \det(F^{\mu\nu})]}}, \quad (2.18)$$

che è un modo più generale di esprimere la (2.13), dove g è il tensore metrico dello spazio-tempo di Minkowski, introdotto in tale teoria poiché necessario per preservare una struttura simile a quella della relatività generale. Tale necessità si è poi rivelata essere, nel tempo, superflua.

2.4 Campo elettrico generato da una carica puntiforme

L'esempio trattato in questa sezione è spesso utilizzato per dimostrare la validità di applicazione della teoria di Born-Infeld. Nonostante sia il caso più semplice possibile, sono evidenti le correzioni che derivano da tale teoria.

In [4] e [5] è stato ricavato, tramite la risoluzione di un problema elementare in elettrostatica, che la correzione contenuta in (2.2) ha un effetto di limitazione per il modulo del campo elettrico. Si considera lo studio di un sistema fisico composto unicamente da una particella carica, con carica elettrica e . In tale sistema, è immediato scrivere le equazioni di Maxwell che prevedono solo la presenza del campo elettrico.

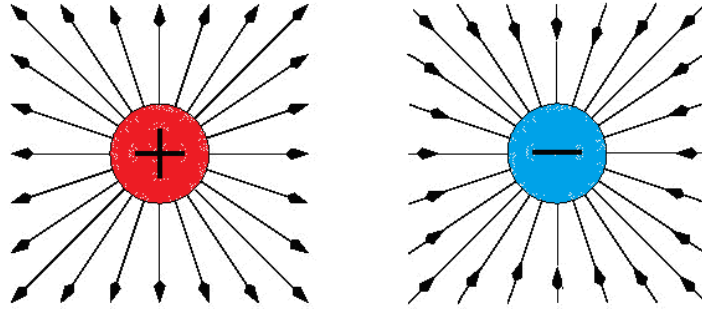


Figura 2.1. Esempio di due sistemi fisici formati unicamente da una carica puntiforme (a sinistra positiva, a destra negativa) e relative linee di campo elettrico.[22]

Denominando con E_r la componente radiale del campo elettrico (rispetto a un sistema di coordinate sferiche in cui il problema è posto), si delineano i due comportamenti nel limite $r \rightarrow 0^+$ ed $r \rightarrow +\infty$ [5]

$$\lim_{r \rightarrow 0^+} E_r = \beta, \quad (2.19)$$

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} E_r = 0. \quad (2.20)$$

Invece, nel caso della teoria elettromagnetica classica, si verificava una divergenza per il modulo del campo elettrico per $r \rightarrow 0^+$.

Il comportamento del modulo del campo elettrico è quindi analogo al caso delle equazioni di Maxwell per $r \rightarrow +\infty$, ma è diverso per $r \rightarrow 0^+$: tale valore limite ottenuto in (2.19) è pari a β in modulo. L'andamento appena descritto è rappresentato in Figura 2.2.

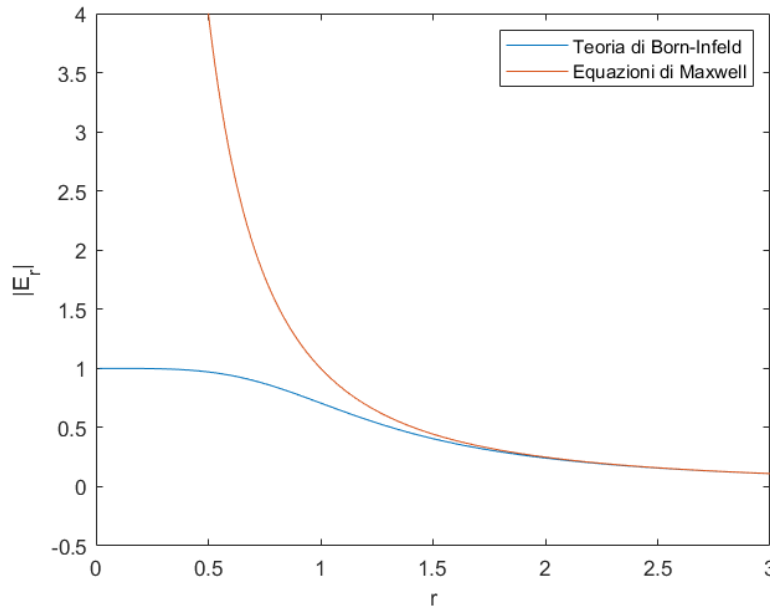


Figura 2.2. Andamento normalizzato del valore del modulo del campo elettrico al variare di r , nel caso "classico" di Maxwell e nel caso della teoria di Born-Infeld. Per normalizzare le espressioni analitiche è stato posto $e = 1$, $\beta = 1$.

Capitolo 3

L'oscillatore di Born

3.1 Introduzione

Si considera la lagrangiana L_B "di Born" che viene appositamente introdotta per studiare un particolare tipo di oscillatore non lineare, in questo Capitolo denominato come "oscillatore di Born" [9].

3.2 Equazioni del moto

L'espressione analitica considerata per L_B è [9]

$$L_B(q, \dot{q}) = 1 - \sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2}. \quad (3.1)$$

Tale espressione si relaziona direttamente con la (1.1) (e indirettamente con la (2.2)) nella forma in cui si presenta.

Al fine di studiare il comportamento del sistema appena introdotto, si procede quindi a ricavare le equazioni del moto che derivano da tale lagrangiana. Il momento coniugato p è

$$p = \frac{\partial L_B}{\partial \dot{q}} = \frac{\dot{q}}{\sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2}} \implies \dot{q}^2 = p^2 \frac{1 + q^2}{1 + p^2}, \quad (3.2)$$

mentre l'espressione dell'hamiltoniana è

$$H_B(q, p) = p\dot{q} - L_B = p^2 \sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2} - 1 + \sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2} = \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} - 1, \quad (3.3)$$

da cui è possibile ricavare le equazioni del moto

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H_B}{\partial p} = p \sqrt{\frac{1 + q^2}{1 + p^2}} = \frac{p(1 + q^2)}{\sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)}} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H_B}{\partial q} = -q \sqrt{\frac{1 + p^2}{1 + q^2}} = -\frac{q(1 + p^2)}{\sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)}}. \end{cases} \quad (3.4)$$

Anche questo sistema, come (1.7), è un sistema hamiltoniano, infatti

$$\dot{H}_B = \frac{\partial H_B}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial H_B}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial H_B}{\partial q} \frac{\partial H_B}{\partial p} - \frac{\partial H_B}{\partial p} \frac{\partial H_B}{\partial q}, \quad (3.5)$$

quindi

$$\dot{H}_B = 0. \quad (3.6)$$

È possibile studiare il sistema dal punto di vista dei sistemi dinamici nel piano delle fasi (q, p) : si ricercano quindi i punti di equilibrio ponendo $\dot{q} = 0, \dot{p} = 0$ ed il sistema (3.4) diventa

$$\begin{cases} \dot{q} = 0 \implies q_1 = 0 \\ \dot{p} = 0 \implies p_1 = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

L'unico punto di equilibrio è quindi $(q_e, p_e) = (q_1, p_1)$. Inoltre, il sistema evolve nel tempo descrivendo una certa traiettoria chiusa nello spazio delle fasi. Per avere un'idea di ciò, si studia il sistema nell'intorno del punto di equilibrio appena trovato tramite la matrice Jacobiana

$$J_B = \begin{bmatrix} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{q}}{\partial p} \\ \frac{\partial \dot{p}}{\partial q} & \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \end{bmatrix}; \quad (3.8)$$

i calcoli portano alle espressioni

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = \frac{qp}{\sqrt{(1+q^2)(1+p^2)}}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \dot{q}}{\partial p} = \frac{(1+q^2)^2}{\sqrt{[(1+q^2)(1+p^2)]^3}}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \dot{p}}{\partial q} = -\frac{\sqrt{(1+q^2)(1+p^2)}}{(1+q^2)^2}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \dot{p}}{\partial p} = -\frac{qp}{\sqrt{(1+q^2)(1+p^2)}}. \quad (3.12)$$

La matrice (3.8) calcolata in (q_e, p_e) assume dunque la forma

$$J_B(q_e, p_e) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.13)$$

il calcolo del determinante di (3.13) è

$$\det(J_B - \lambda I) = 0 \implies (-\lambda)^2 + 1 = 0 \implies \lambda = \pm i. \quad (3.14)$$

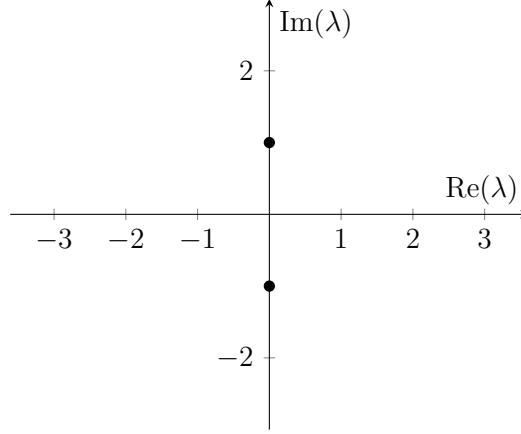


Figura 3.1. Autovalori nel piano complesso di (3.13).

Le traiettorie nello spazio delle fasi (q, p) sono delle circonferenze per valori di energia "piccoli", mentre per valori non trascurabili il sistema risente non linearità introdotta in H_B : il ritratto di fase assume una forma simile a rami di iperbole; trattandosi però di una curva chiusa, i "rami" tendono ad incontrarsi su punti nel piano delle fasi $(0, p_{max}), (0, -p_{max}), (q_{max}, 0), (-q_{max}, 0)$. Infatti, considerando (3.3), e ricordando che l'hamiltoniana di un sistema ne rappresenta la sua energia totale E , allora è possibile tracciare curve di livello del tipo $H_B(q, p) = E$. Imponendo arbitrariamente i valori $E_1 = 0.1, E_2 = 0.5, E_3 = 1, E_4 = 2, E_5 = 5$ è possibile ottenere le rispettive curve ed osservare l'andamento precedentemente descritto nel piano delle fasi

$$H_B(q, p) = E_1 \implies -1 + \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} = 0.1 \implies q^2 + p^2 + q^2 p^2 = 0.21, \quad (3.15)$$

$$H_B(q, p) = E_2 \implies -1 + \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} = 0.5 \implies q^2 + p^2 + q^2 p^2 = 1.25, \quad (3.16)$$

$$H_B(q, p) = E_3 \implies -1 + \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} = 1 \implies q^2 + p^2 + q^2 p^2 = 3, \quad (3.17)$$

$$H_B(q, p) = E_4 \implies -1 + \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} = 2 \implies q^2 + p^2 + q^2 p^2 = 8, \quad (3.18)$$

$$H_B(q, p) = E_5 \implies -1 + \sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} = 5 \implies q^2 + p^2 + q^2 p^2 = 35, \quad (3.19)$$

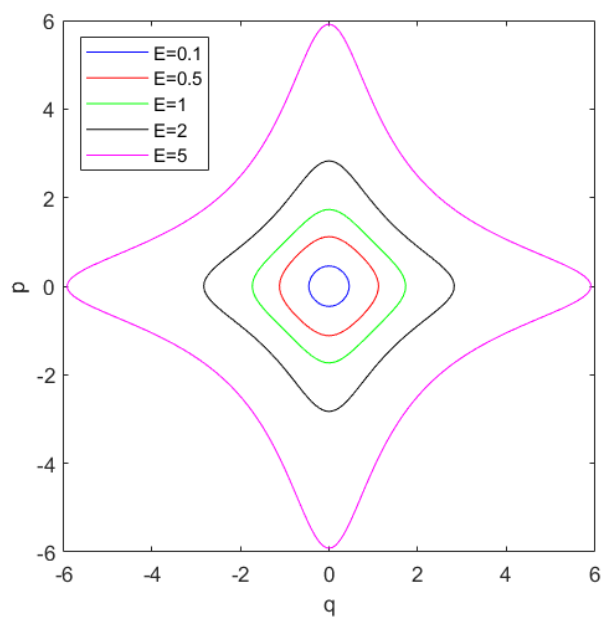


Figura 3.2. Curve di livello, per differenti energie, per $H_B(q, p) = E$.

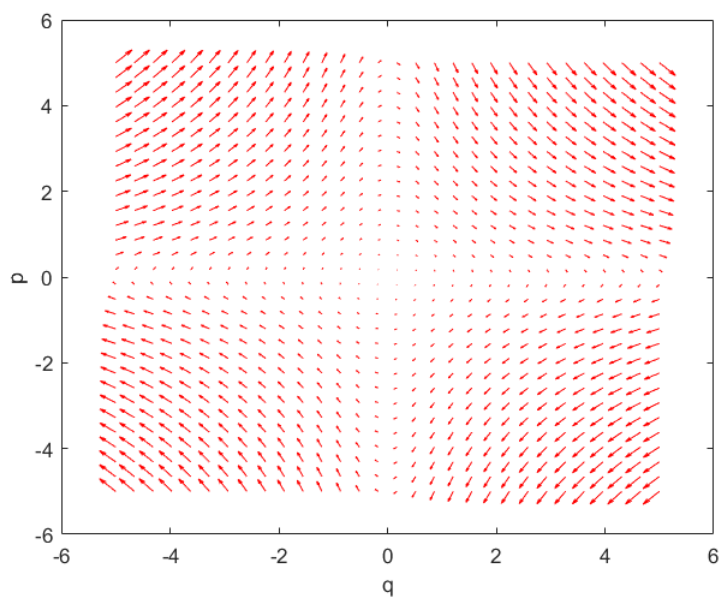


Figura 3.3. Campo vettoriale relativo al sistema in Figura 3.2.

Il sistema analizzato sembra quindi comportarsi in maniera sempre più differente rispetto all'oscillatore armonico all'aumentare dell'energia posseduta dallo stesso.

Per mostrare che il periodo di oscillazione dell'oscillatore di Born è riducibile a quello dell'oscillatore armonico per piccoli valori dell'energia di oscillazione, può essere effettuato il cambio di variabili $q = x = r \cos \theta, p = y = r \sin \theta, r > 0, \theta \in [0, 2\pi)$. Tale sostituzione porta il sistema (3.4) nella nuova forma

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{y(x^2 + 1)}{\sqrt{(1 + x^2)(1 + y^2)}} \\ \dot{y} = -\frac{x(y^2 + 1)}{\sqrt{(1 + x^2)(1 + y^2)}}. \end{cases} \quad (3.20)$$

Dai cambi di variabile proposti, risulta che $\tan \theta = \frac{y}{x}, \sec \theta = \frac{r}{x}$, che implicano

$$\frac{d}{dt} \tan \theta = (\sec^2 \theta) \dot{\theta} = \frac{\dot{y}x - y\dot{x}}{x^2} \implies \frac{r^2}{x^2} \dot{\theta} = \frac{\dot{y}x - y\dot{x}}{x^2}, \quad (3.21)$$

cioè

$$\dot{\theta} = \frac{\dot{y}x - y\dot{x}}{r^2}. \quad (3.22)$$

Dato che $|\dot{\theta}| = |\omega|$, frequenza di oscillazione, si procede al calcolo esplicito di $\dot{\theta}$

$$\dot{\theta} = \frac{1}{r^2} \left[-\frac{r \cos \theta (r^2 \sin^2 \theta + 1)}{\sqrt{(r^2 \cos^2 \theta + 1)(r^2 \sin^2 \theta + 1)}} r \cos \theta - r \sin \theta \frac{r \sin \theta (r^2 \cos^2 \theta + 1)}{\sqrt{(r^2 \cos^2 \theta + 1)(r^2 \sin^2 \theta + 1)}} \right], \quad (3.23)$$

a seguito delle semplificazioni, si ottiene la relazione

$$\dot{\theta} = -\frac{1}{\sqrt{r^4 \cos^2 \theta \sin^2 \theta + r^2 + 1}}. \quad (3.24)$$

Da questo risultato si può concludere che il periodo di oscillazione definito come $T = \frac{2\pi}{\omega}$ si riduce a quello dell'oscillatore armonico classico nel limite $r \rightarrow 0^+$, mentre per valori di $r > 0$ esso è maggiore rispetto al caso classico. Quindi

$$\lim_{r \rightarrow 0^+} \dot{\theta} = -1 \implies T \approx 2\pi, \quad (3.25)$$

$$r > 0 \implies T > 2\pi. \quad (3.26)$$

3.3 Studio di un caso con un termine forzante

Si intende studiare il sistema dinamico la cui espressione analitica della lagrangiana L_B^* è, per ogni $k \in \mathbb{R}$

$$L_B^*(q, \dot{q}) = 1 - \sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2} + kq^2 = L_B + kq^2. \quad (3.27)$$

Il momento coniugato p è

$$p = \frac{\partial L_B^*}{\partial \dot{q}} = \frac{\dot{q}}{\sqrt{1 - \dot{q}^2 + q^2}} \implies \dot{q}^2 = p^2 \frac{1 + q^2}{1 + p^2}; \quad (3.28)$$

il calcolo per l'espressione dell'hamiltoniana porta a

$$H_B^*(q, p) = p\dot{q} - L_B^* = p\sqrt{\frac{1 + q^2}{1 + p^2}} - L_B^* \quad (3.29)$$

e quindi

$$H_B^*(q, p) = (1 + p^2)\sqrt{\frac{1 + q^2}{1 + p^2}} - 1 - kq^2 = H_B - kq^2. \quad (3.30)$$

Le equazioni del moto sono dunque

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H_B^*}{\partial p} = p\sqrt{\frac{1 + q^2}{1 + p^2}} = \frac{p(1 + q^2)}{\sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)}} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H_B^*}{\partial q} = -q\sqrt{\frac{1 + p^2}{1 + q^2}} + 2kq = -\frac{q(1 + p^2)}{\sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)}} + 2kq. \end{cases} \quad (3.31)$$

I punti di equilibrio sono

$$\begin{cases} \dot{q} = 0 \implies p_1 = 0 \\ \dot{p} = 0 \implies q_1 = 0, q_2 = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{4k^2} - 1}, q_3 = -q_2. \end{cases} \quad (3.32)$$

Il sistema, per ogni valore di $0 < k < \frac{1}{2}$, ammette quindi tre punti di equilibrio $(q_{e1}, p_{e1}) = (q_1, p_1)$, $(q_{e2}, p_{e2}) = (q_2, p_1)$, $(q_{e3}, p_{e3}) = (q_3, p_1)$; per $k < 0$ e per $k > \frac{1}{2}$ esiste solo un punto di equilibrio $(q_{e1}, p_{e1}) = (q_1, p_1)$; per $k = 0$ si ritorna al caso di studio del sistema (3.4).

Si procede quindi allo studio del comportamento del sistema negli intorno di tali punti.

La matrice Jacobiana calcolata nel punto di equilibrio (q_{e1}, p_{e1}) è

$$J_B(q_{e1}, p_{e1}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 + 2k & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.33)$$

il calcolo del determinante di (3.33) conduce a

$$\det(J_B - \lambda I) = 0 \implies (-\lambda)^2 + 1 - 2k = 0 \implies \lambda = \pm\sqrt{2k-1}, \quad (3.34)$$

per $2k-1 > 0$ gli autovalori sono reali, per $2k-1 < 0$ essi sono immaginari: il punto di equilibrio è quindi un centro per $k < \frac{1}{2}$, invece esso sarà una sella per $k > \frac{1}{2}$. Per $k = \frac{1}{2}$ il punto di equilibrio muta la sua natura e quindi vi è la presenza di una biforcazione.

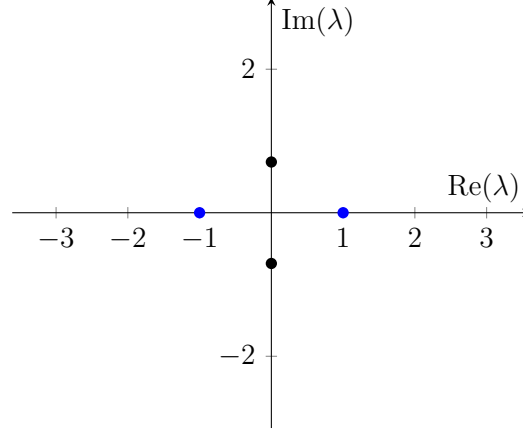


Figura 3.4. Esempio di autovalori nel piano complesso di (3.33) per $k = 1$ (in blu) e $k = \frac{1}{4}$ (in nero).

La matrice Jacobiana calcolata nel punto di equilibrio (q_{e2}, p_{e2}) è

$$J_B(q_{e2}, p_{e2}) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1+q_2^2} \\ -\frac{1}{\sqrt{(1+q_2^2)^3}} + 2k & 0 \end{bmatrix}; \quad (3.35)$$

il calcolo del determinante di (3.35) conduce a

$$\det(J_B - \lambda I) = 0 \implies (-\lambda)^2 - \left(-\sqrt{\frac{1+q_2^2}{(1+q_2^2)^3}} + 2k\sqrt{1+q_2^2} \right) = 0. \quad (3.36)$$

Sostituendo il valore di q_2 trovato in (3.32), è possibile esprimere il valore di λ in funzione di k . A seguito delle sostituzioni, i calcoli portano alla condizione

$$\lambda \in \mathbb{R} \iff 0 < k \leq \frac{1}{2}, \quad (3.37)$$

che coincide con la condizione di esistenza per (q_{e2}, p_{e2}) . Per cui, quando esiste, il punto di equilibrio è una sella.

La matrice Jacobiana calcolata nel punto di equilibrio (q_{e3}, p_{e3}) coincide con (3.35): il calcolo del relativo determinante restituisce lo stesso risultato di (3.36), per cui la condizione per λ corrisponderà alla (3.37) e le proprietà di tale punto sono equivalenti a (q_{e2}, p_{e2}) .

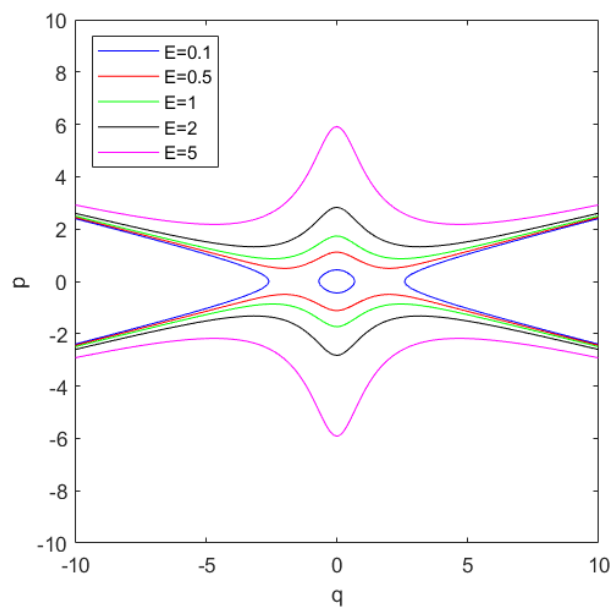


Figura 3.5. Curve di livello, per differenti energie, per $k = \frac{1}{4}$.

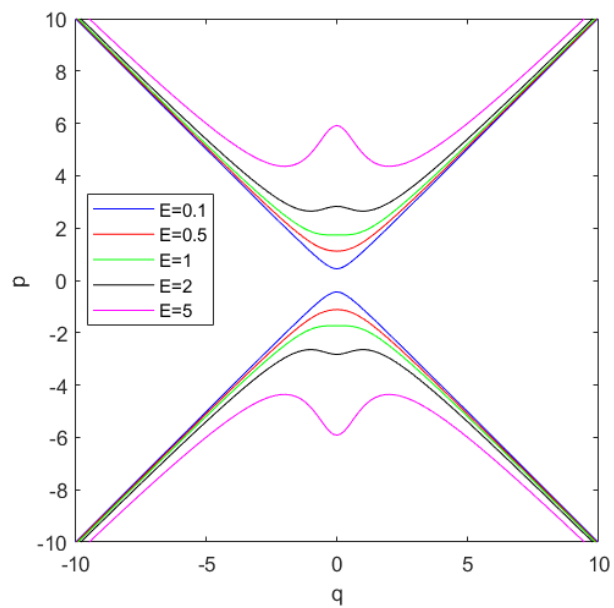


Figura 3.6. Curve di livello, per differenti energie, per $k = 1$.

3.4 Cambio di variabili dinamiche

Osservando la struttura del sistema (3.4) e ricordando le forme analitiche delle funzioni seno e coseno iperbolico, si introduce la coppia di variabili dinamiche (Q, P) tali che $q = \sinh Q, p = \sinh P$ [9]. Tale scelta consente di esplicitare una diretta relazione tra una nuova espressione di un'hamiltoniana \tilde{H}_B e quanto già ottenuto con H_B in (3.3). Da questa scelta risulta tramite delle immediate sostituzioni

$$\dot{q} = \frac{\partial \sinh Q}{\partial Q} \dot{Q} = (\cosh Q) \dot{Q}, \quad (3.38)$$

quindi dato che per la (3.2) $\dot{q}^2 = p^2 \frac{(1+q^2)}{(1+p^2)}$ allora

$$(\cosh Q) \dot{Q} = (\sinh P) \sqrt{\frac{1 + (\sinh Q)^2}{1 + (\sinh P)^2}}, \quad (3.39)$$

da cui, ricordando le note relazioni $1 + (\sinh Q)^2 = (\cosh Q)^2$ (e lo stesso per P) si deduce che

$$\dot{Q} = \tanh P. \quad (3.40)$$

Analogamente

$$\dot{p} = \frac{\partial \sinh P}{\partial P} \dot{P} = (\cosh P) \dot{P}, \quad (3.41)$$

ricordando che dalla (3.4) $\dot{p} = -q \frac{(1+p^2)}{(1+q^2)}$ allora, come fatto poco sopra

$$(\cosh P) \dot{P} = -(\sinh Q) \sqrt{\frac{1 + (\sinh P)^2}{1 + (\sinh Q)^2}}, \quad (3.42)$$

$$\dot{P} = -\tanh Q. \quad (3.43)$$

Le (3.40) e (3.43) sono equazioni del moto che si ottengono a partire da una hamiltoniana $\tilde{H}_B(Q, P) = \log[(\cosh Q)(\cosh P)]$. Tali equazioni sono

$$\begin{cases} \dot{Q} = \tanh P \\ \dot{P} = -\tanh Q. \end{cases} \quad (3.44)$$

Si ricerca una funzione \tilde{H}_B tale che $\dot{Q} = \frac{\partial \tilde{H}_B}{\partial P}, \dot{P} = -\frac{\partial \tilde{H}_B}{\partial Q}$. Quindi ricordando che

$$\tanh P = \frac{\sinh P}{\cosh P}, \quad (3.45)$$

$$-\tanh Q = -\frac{\sinh Q}{\cosh Q}, \quad (3.46)$$

si verifica facilmente, tramite un confronto con le regole di integrazione, che per una generica funzione $f(P)$ integrabile vale

$$\int \frac{f'(P)}{f(P)} dP = \log(f(P)) + c, \quad (3.47)$$

$$\tilde{H}_B = \log(\cosh Q) + \log(\cosh P) = \log[(\cosh Q)(\cosh P)]. \quad (3.48)$$

Sostituendo infine le espressioni delle relazioni tra q, Q e tra p, P si nota che

$$\tilde{H}_B = \log \left[\sqrt{1 + (\sinh Q)^2} \right] + \log \left[\sqrt{1 + (\sinh P)^2} \right] = \log \left[\sqrt{(1 + q^2)(1 + p^2)} \right]. \quad (3.49)$$

È evidente la corrispondenza, a meno di fattori di riscaldamento, tra le curve di livello di H_B in Figura 3.2 e quelle di \tilde{H}_B in Figura 3.7. Un confronto con la (3.3) permette infine di scrivere la relazione

$$e^{\tilde{H}_B} = H_B + 1 \quad (3.50)$$

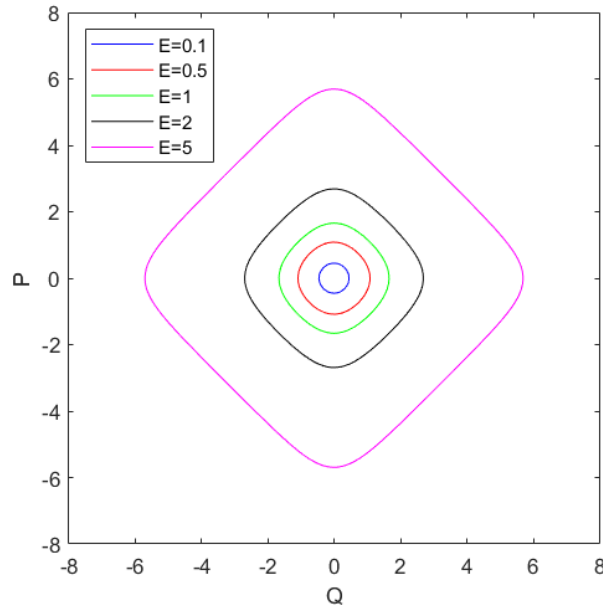


Figura 3.7. Curve di livello, per differenti energie, per $\tilde{H}_B = E$.

Capitolo 4

L'oscillatore armonico quantistico

4.1 Introduzione

L'esempio introduttivo riportato nel Capitolo 1 faceva riferimento all'oscillatore armonico in meccanica classica. In questo Capitolo si intende riportare un altro fondamentale esempio: l'oscillatore armonico quantistico, modello teorico fondamentale in meccanica quantistica.

In meccanica quantistica, studiare e risolvere un sistema equivale a trovare gli autostati della relativa hamiltoniana (considerata come operatore) ed i relativi autovalori dell'energia: ciò si traduce nel risolvere l'equazione di Schrödinger e trovare la funzione d'onda che descrive il sistema. Se Ψ è l'autofunzione dell'hamiltoniana \hat{H} allora l'equazione agli autovalori sarà

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (4.1)$$

Nel caso di un sistema formato da un oscillatore armonico, $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. [13] Da (B.12), $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ implica

$$\hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right)\Psi = E\Psi, \quad (4.2)$$

in questo esempio l'hamiltoniana è indipendente dal tempo.

4.2 Risoluzione del problema: metodo analitico

Moltiplicando per $\frac{2}{\hbar\omega}$ e ponendo $\frac{2E}{\hbar\omega} = \mathcal{E}$ si ottiene la forma adimensionale e maggiormente trattabile

$$\left(-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2\right)\Psi = \mathcal{E}\Psi. \quad (4.3)$$

Si nota che $\frac{\hbar}{m\omega}$ è dimensionalmente una lunghezza al quadrato, di conseguenza $\frac{m\omega}{\hbar}$ è il reciproco di una lunghezza al quadrato. Introducendo quindi la variabile u tale che $x = \xi u$, a seguito delle sostituzioni si ottiene la forma

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2\right) \Psi = E\Psi. \quad (4.4)$$

La soluzione al problema (4.4), a seguito dei passaggi analitici (che non vengono riportati), è nota: essa si presenta nella forma [6]

$$\Psi_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (4.5)$$

dove le funzioni $H_n(\xi)$ rappresentano i polinomi di Hermite, nella forma $H_n(\xi) = \sum_{k=0}^n C_k \xi^k$, con C_k opportuni coefficienti. Le espressioni analitiche dei polinomi di Hermite sono ottenibili per ricorrenza ed, in generale, soddisfano

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} + (E - 1)\right] H(\xi) = 0. \quad (4.6)$$

Alcune espressioni analitiche di $H_n(\xi)$, $n = 0, 1, \dots, 5$ sono riportate in tabella 4.1.

n	$H_n(\xi)$
0	1
1	2ξ
2	$4\xi^2 - 2$
3	$8\xi^3 - 12\xi$
4	$16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$
5	$32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$

Tabella 4.1. Polinomi di Hermite per differenti valori di n . [8]

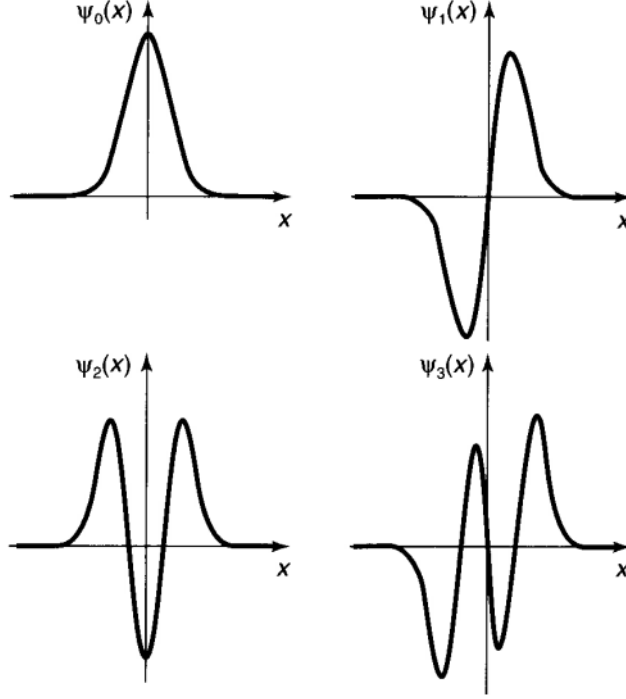


Figura 4.1. Primi quattro stati stazionari dell'oscillatore armonico (da (4.5) per $n = 0, \dots, 3$). [8]

4.3 Risoluzione del problema: metodo algebrico

La soluzione al problema (4.2) è ricercabile anche tramite un noto metodo algebrico [8], che si basa prevalentemente sull'algebra degli operatori \hat{x} , \hat{p}_x e che è riportato brevemente di seguito.

Definizione 1 Si definiscono gli operatori rispettivamente "di costruzione e distruzione" [8]

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}_x), \quad (4.7)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}_x), \quad (4.8)$$

il cui commutatore vale, per una generica funzione ψ

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\psi = \psi \implies [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (4.9)$$

Grazie alla Definizione 1 si ricava la relazione tra \hat{H} , \hat{a} , \hat{a}^\dagger

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{1}{2\hbar m\omega}(\hat{p}_x^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2 - im\omega[\hat{x}, \hat{p}_x]) = \frac{1}{\hbar\omega}(\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega); \quad (4.10)$$

quindi normalizzando \hat{H} con $\frac{1}{\hbar\omega}$ ed introducendo $\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}$ si ottiene la relazione

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{\mathcal{H}} - \frac{1}{2} \implies \hat{\mathcal{H}} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{N} + \frac{1}{2}, \quad (4.11)$$

con \hat{N} operatore "numero". L'energia dell'oscillatore armonico quantistico è dunque quantizzata e i valori consentiti sono esprimibili nella forma $\mathcal{E}_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, $n \in \mathbb{N}$. Per $n = 0$ si avrà quindi $\mathcal{E}_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. La forma bra-ket introdotta in (B.6) consente di scrivere il risultato appena ottenuto come

$$\hat{H} |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle. \quad (4.12)$$

Inoltre, la ripetuta applicazione degli operatori \hat{a}, \hat{a}^\dagger consente all'oscillatore di "saltare" tra un livello energetico ed un altro: si avrà quindi

$$\hat{a}^\dagger |0\rangle = c_1 |1\rangle, \quad (4.13)$$

$$\hat{a} |1\rangle = c_2 |0\rangle. \quad (4.14)$$

con c_1, c_2 opportune costanti.

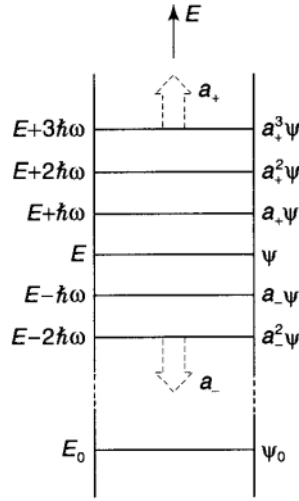


Figura 4.2. Rappresentazione schematica di alcuni livelli energetici per l'oscillatore armonico quantistico e relativo effetto dell'applicazione degli operatori \hat{a}^\dagger (a_+ in Figura) e \hat{a} (a_- in Figura). [8]

Capitolo 5

Quantizzazione dell'hamiltoniana classica

5.1 Introduzione

L'hamiltoniana in (3.3) includeva alcuni effetti della non linearità introdotta con l'oscillatore di Born. In questo Capitolo viene ricavata una opportuna quantizzazione dell'hamiltoniana classica introducendo un nuovo operatore hermitiano e se ne studia l'ordine di convergenza degli autovalori approssimati rispetto agli autovalori "esatti", in funzione dei parametri caratteristici della quantizzazione.

5.2 Costruzione dell'operatore \hat{J}

Si considera la lagrangiana [9]

$$L_B(q, \dot{q}) = \frac{1 - \sqrt{1 - \epsilon \dot{q}^2 + \epsilon q^2}}{\epsilon}, \quad (5.1)$$

dove $\epsilon > 0$. Così come visto in (3.2), il momento coniugato p è

$$p = \frac{\partial L_B}{\partial \dot{q}} = \frac{\dot{q}}{\sqrt{1 - \epsilon \dot{q}^2 + \epsilon q^2}} \implies \dot{q}^2 = p^2 \frac{1 + \epsilon q^2}{1 + \epsilon p^2}; \quad (5.2)$$

mentre l'espressione dell'hamiltoniana, a seguito delle opportune sostituzioni, è

$$H_B(q, p) = p\dot{q} - L_B = \frac{1}{\epsilon} \left\{ -1 + \sqrt{(1 + \epsilon q^2)(1 + \epsilon p^2)} \right\}. \quad (5.3)$$

Si può notare una forte analogia tra (5.1) e (3.1) (e anche con (2.2)); inoltre si verifica facilmente che nel limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, si riottiene l'espressione classica analoga alla (1.4). La quantizzazione nella rappresentazione della posizione sarebbe immediata per (5.3). Tuttavia sorgerebbero dei problemi inerenti alla sua forma: un eventuale operatore \hat{H}_B non sarebbe hermitiano [9]. Inoltre lo studio delle proprietà di operatori sotto radice quadrata

è possibile sotto opportune condizioni matematiche, come riportato ad esempio in [14], [19]; tuttavia tale approccio sembra riguardare maggiormente l'ambito relativistico (come ad esempio l'equazione di Klein-Gordon), mentre nel caso oggetto di studio in questo Capitolo e nel successivo, non si intende generalizzare il comportamento degli operatori anche al caso relativistico. Per ovviare a questi problemi, si costruisce un opportuno operatore hermitiano \hat{J} partendo dall'hamiltoniana appena ottenuta.

Al posto dell'operatore ottenuto in (5.3) si potrebbe proporre [9]

$$\left(\hat{H}_B + \frac{1}{\epsilon}\right)^2 = \left[\frac{1}{\epsilon} \left(-1 + \sqrt{(1 + \epsilon\hat{q}^2)(1 + \epsilon\hat{p}^2)} + \frac{1}{\epsilon}\right)\right]^2 = \frac{1}{\epsilon^2}(1 + \epsilon\hat{q}^2)(1 + \epsilon\hat{p}^2); \quad (5.4)$$

uno studio preliminare delle proprietà di questo possibile nuovo operatore evidenzia che esso non è hermitiano, infatti

$$\left(\hat{H}_B + \frac{1}{\epsilon}\right)^2 = \frac{1}{\epsilon^2}(1 + \epsilon\hat{q}^2 + \epsilon\hat{p}^2 + \epsilon^2\hat{q}^2\hat{p}^2), \quad (5.5)$$

$$\left[\left(\hat{H}_B + \frac{1}{\epsilon}\right)^2\right]^\dagger = \left[\frac{1}{\epsilon^2}(1 + \epsilon\hat{q}^2)(1 + \epsilon\hat{p}^2)\right]^\dagger = \left[\frac{1}{\epsilon^2}(1 + \epsilon\hat{q}^2 + \epsilon\hat{p}^2 + \epsilon^2\hat{q}^2\hat{p}^2)\right]^\dagger; \quad (5.6)$$

ricordando che, in unità naturali, $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial\hat{q}}$

$$\left(\hat{H}_B + \frac{1}{\epsilon}\right)^2 = \frac{1}{\epsilon^2} \left(1 + \epsilon\hat{q}^2 - \epsilon\frac{\partial^2}{\partial\hat{q}^2} - \epsilon^2\hat{q}^2\frac{\partial^2}{\partial\hat{q}^2}\right), \quad (5.7)$$

$$\left[\left(\hat{H}_B + \frac{1}{\epsilon}\right)^2\right]^\dagger = \left[\frac{1}{\epsilon^2} \left(1 + \epsilon\hat{q}^2 - \epsilon\frac{\partial^2}{\partial\hat{q}^2} - \epsilon^2\hat{q}^2\frac{\partial^2}{\partial\hat{q}^2}\right)\right]^\dagger. \quad (5.8)$$

I due operatori in (5.7) e (5.8) differiscono per l'ultimo termine, cioè per il prodotto misto $\hat{q}^2\hat{p}^2$. Al fine di ottenere un operatore hermitiano, è possibile ad esempio considerare $\frac{1}{\epsilon^2} \{1 + \epsilon\hat{q}^2 + \epsilon\hat{p}^2 + \epsilon^2[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})]^2\}$ [9]. Si verifica che questa è l'espressione di un operatore hermitiano, poiché

$$\left[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})\right]^2 = \frac{1}{4}[(\hat{q}\hat{p})^2 + (\hat{p}\hat{q})^2 + 2\hat{q}\hat{p}\hat{p}\hat{q}], \quad (5.9)$$

$$\left[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})\right]^{2\dagger} = \frac{1}{4}[(\hat{q}\hat{p})^2 + (\hat{p}\hat{q})^2 + 2\hat{q}\hat{p}\hat{p}\hat{q}]^\dagger = \frac{1}{4}[(\hat{q}\hat{p})^2 + (\hat{p}\hat{q})^2 + 2\hat{p}^\dagger\hat{q}^\dagger\hat{q}^\dagger\hat{p}^\dagger]; \quad (5.10)$$

tali espressioni coincidono, quindi il nuovo operatore $\hat{K} = \frac{1}{\epsilon^2} \{1 + \epsilon\hat{q}^2 + \epsilon\hat{p}^2 + \epsilon^2[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})]^2\}$ è hermitiano. Infine considerando $\epsilon^2\hat{K}$ si ottiene che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \epsilon^2\hat{K} = 1, \quad (5.11)$$

vale a dire la non corrispondenza nel limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ tra la nuova forma e quella in (4.2). Questo problema viene risolto considerando invece una nuova forma $\frac{1}{2\epsilon}(\hat{K} - 1)$ tale che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\epsilon}(\hat{K} - 1) = \frac{1}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2). \quad (5.12)$$

L'operatore appena ottenuto è dunque \hat{J} , così definito e come ottenuto in [9]

$$\hat{J} = \frac{1}{2\epsilon}(\hat{K} - 1) = \hat{H}_B + \frac{\epsilon}{2}(\hat{H}_B)^2 = \frac{1}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) + \frac{\epsilon}{2}\hat{q}^2\hat{p}^2; \quad (5.13)$$

taie operatore, per costruzione, è dunque hermitiano e si riduce alla forma (4.2) nel limite $\epsilon \rightarrow 0^+$.

5.3 Studio analitico dello spettro di \hat{J} e \hat{H}_B

L'obiettivo è quello di riscrivere l'operatore (5.13) in termini di operatori noti in meccanica quantistica introdotti nel Capitolo precedente in (4.7) e (4.8) (operatori \hat{a}^\dagger e \hat{a} , "di costruzione e distruzione"). La relazione che intercorre tra tali operatori e \hat{q} e \hat{p} è (analogamente a (4.7) e (4.8), ma in unità naturali)

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} - i\hat{p}), \quad (5.14)$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q} + i\hat{p}); \quad (5.15)$$

il commutatore tra i due operatori sarà $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$. Riconsiderando la prima parte di (5.13) ed utilizzando (5.14) e (5.15), $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) + \frac{1}{2}(-i\hat{p}\hat{q} + i\hat{q}\hat{p}) = \frac{1}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) - \frac{1}{2}$, quindi vale la relazione

$$\frac{1}{2}(\hat{q}^2 + \hat{p}^2) = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}, \quad (5.16)$$

già ottenuta in forma analoga in (4.10). Invece riconsiderando l'ultima parte di (5.13) si ricavano facilmente le relazioni

$$\hat{q}\hat{p} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a} + \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a} - \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2i}(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger), \quad (5.17)$$

$$\hat{p}\hat{q} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a} - \hat{a}^\dagger \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a} + \hat{a}^\dagger = \frac{1}{2i}(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}). \quad (5.18)$$

L'espressione $\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})$ diventa quindi a seguito delle semplificazioni algebriche

$$\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) = \frac{1}{2i}(\hat{a}^2 - \hat{a}^{\dagger 2}), \quad (5.19)$$

che implica

$$\left[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) \right]^2 = -\frac{1}{4}(\hat{a}^4 + \hat{a}^{\dagger 4} - \hat{a}^2 \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2). \quad (5.20)$$

Inoltre notando che è possibile scrivere $\hat{a}^2 \hat{a}^{\dagger 2} = \hat{a}(\hat{a} \hat{a}^{\dagger}) \hat{a}^{\dagger} = \hat{a}(\hat{a} \hat{a}^{\dagger} - \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \hat{a}^{\dagger} \hat{a}) \hat{a}^{\dagger} = \hat{a} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \hat{a}^{\dagger}$, si utilizza a questo punto l'operatore "numero" introdotto in (4.11), così che $\hat{a}^2 \hat{a}^{\dagger 2} = \hat{N} + 1 + (\hat{N} + 1)^2$. Inoltre $\hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2 = \hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{\dagger} \hat{a}) \hat{a} = \hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{\dagger} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a} \hat{a}^{\dagger}) \hat{a} = -\hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \hat{a}^{\dagger} \hat{a} \hat{a}^{\dagger} \hat{a} = -\hat{N} + \hat{N}^2$. L'equazione (5.20) può essere riscritta come

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}) \right]^2 &= -\frac{1}{4}(\hat{a}^4 + \hat{a}^{\dagger 4} - \hat{N} - 1 - (\hat{N} + 1)^2 + \hat{N} - \hat{N}^2) = \\ &= \frac{1}{4}(\hat{a}^4 + \hat{a}^{\dagger 4} - 2\hat{N}^2 - 2\hat{N} - 2). \end{aligned} \quad (5.21)$$

A seguito delle sostituzioni, si ottiene dunque, similmente a quanto riportato in [9]

$$\hat{J} = \hat{N} + \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{8} \hat{a}^{\dagger 4} - \frac{\epsilon}{8} \hat{a}^4 + \frac{\epsilon}{4} (\hat{N}^2 + \hat{N} + 1), \quad (5.22)$$

che è l'espressione dell'operatore \hat{J} in termini degli operatori \hat{a} , \hat{a}^{\dagger} ed \hat{N} .

Proprietà 1 *In generale, se $|n\rangle$ è un autostato di \hat{N} con autovalore n , cioè $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, allora dalle relazioni precedentemente introdotte: $\hat{N}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \hat{a}^{\dagger}(1 + \hat{a}^{\dagger}\hat{a}) = \hat{a}^{\dagger}(1 + \hat{N})$, quindi $\hat{N}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}(1 + \hat{N})|n\rangle = (1 + \hat{N})\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$. Di conseguenza $\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$ è anch'esso un autostato di \hat{N} con autovalore $n + 1$. Quindi, $\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = c|n + 1\rangle$, c da determinarsi. Dalla condizione di normalizzazione si ottiene infine $\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = n + 1$. Dunque $\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle$.*

Analogamente, calcolando $\hat{N}\hat{a}|n\rangle$: $\hat{N}\hat{a} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}\hat{a} = (\hat{a}\hat{a}^{\dagger} - 1)\hat{a} = \hat{a}\hat{a}^{\dagger}\hat{a} - \hat{a} = \hat{a}\hat{N} - \hat{a} = \hat{a}(\hat{N} - 1)$ segue $\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (\hat{N} - 1)\hat{a}|n\rangle$. Quindi, $\hat{a}|n\rangle = c|n - 1\rangle$, c da determinarsi. Dalla condizione di normalizzazione infine $\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = n$. Dunque $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle$.

L'applicazione dell'operatore $\hat{J}|j\rangle$ restituisce per $j \in \mathbb{N}$, facendo uso della Proprietà 1

$$\begin{aligned} \hat{J}|j\rangle &= -\frac{\epsilon}{8} \sqrt{j(j-1)(j-2)(j-3)} |j-4\rangle + \\ &\quad -\frac{\epsilon}{8} \sqrt{(j+1)(j+2)(j+3)(j+4)} |j+4\rangle + \left[j + \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{4} (j^2 + j + 1) \right] |j\rangle = \\ &= -r(j) |j-4\rangle - r(j+4) |j+4\rangle + s(j) |j\rangle, \end{aligned} \quad (5.23)$$

dove è stato posto $r(j) = \frac{\epsilon}{8} \sqrt{j(j-1)(j-2)(j-3)}$,
 $p(j) = \frac{\epsilon}{8} \sqrt{(j+1)(j+2)(j+3)(j+4)} = r(j+4)$ ed infine $s(j) = j + \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{4} (j^2 + j + 1)$.

Per $j = 0, j = 1, \dots, j = 4$ la (5.23) restituisce

$$\hat{J}|0\rangle = -\frac{\epsilon}{4}\sqrt{6}|4\rangle + \left(\frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{4}\right)|0\rangle, \quad (5.24)$$

$$\hat{J}|1\rangle = -\frac{\epsilon}{4}\sqrt{30}|5\rangle + \left(\frac{3}{2} + \frac{3\epsilon}{4}\right)|1\rangle, \quad (5.25)$$

$$\hat{J}|2\rangle = -\frac{3\epsilon}{4}\sqrt{30}|6\rangle + \left(\frac{5}{2} + \frac{7\epsilon}{4}\right)|2\rangle, \quad (5.26)$$

$$\hat{J}|3\rangle = -\frac{2\epsilon}{4}\sqrt{210}|7\rangle + \left(\frac{7}{2} + \frac{13\epsilon}{4}\right)|3\rangle, \quad (5.27)$$

$$\hat{J}|4\rangle = -\frac{\epsilon}{4}\sqrt{6}|0\rangle - \frac{4\epsilon}{4}\sqrt{210}|8\rangle + \left(\frac{9}{2} + \frac{21\epsilon}{4}\right)|4\rangle, \quad (5.28)$$

Dai calcoli appena mostrati è quindi evidente che se $\epsilon = 0$ allora $\hat{J}|0\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle$, $\hat{J}|1\rangle = \frac{3}{2}|1\rangle$, $\hat{J}|2\rangle = \frac{5}{2}|2\rangle$, ..., che corrispondono numericamente agli autovalori (livelli di energia) ottenuti nel caso di studio dell'oscillatore armonico quantistico, come accennato in (4.12).

È noto che ogni generico autostato si può scrivere come una combinazione lineare, analogamente a quanto ottenuto in (B.7). Applicando tale proprietà alla (5.23) si ottiene per un generico autostato $|J^*\rangle$

$$|J^*\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n |n\rangle, \quad (5.29)$$

$$\hat{J}|J^*\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n \hat{J}|n\rangle, \quad (5.30)$$

$$\hat{J}|J^*\rangle = J^*|J^*\rangle \implies \sum_{n=0}^{+\infty} c_n J^*|n\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} -r(j+4)|n+4\rangle - r(j)|n-4\rangle + s(j)|n\rangle; \quad (5.31)$$

moltiplicando per $\langle j|$

$$\langle j| \sum_{n=0}^{+\infty} c_n J^*|n\rangle = \langle j| \sum_{n=0}^{+\infty} -r(j+4)|n+4\rangle - r(j)|n-4\rangle + s(j)|n\rangle, \quad (5.32)$$

$$c(j)J^* = -r(j)c(j-4) - r(j+4)c(j+4) + s(j)c(j). \quad (5.33)$$

Dalla relazione appena ottenuta è evidente che gli sviluppi relativi a tale equazione sono "a salti di quattro". Complessivamente, gli elementi ottenuti da (5.33) sono disposti in successioni indipendenti. Tale disposizione, dal punto di vista algebrico, corrisponde ad un'unione di quattro matrici $M^{(i)}$, $i = 0, 1, 2, 3$, di dimensione infinita e tridiagonali [9]. La loro struttura è la seguente

$$\begin{aligned}
 M^{(0)} &= \begin{bmatrix} s(0) & -p(0) & & 0 \\ -p(0) & s(4) & -p(4) & \\ & -p(4) & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \\
 M^{(1)} &= \begin{bmatrix} s(1) & -p(1) & & 0 \\ -p(1) & s(5) & -p(5) & \\ & -p(5) & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \\
 M^{(2)} &= \begin{bmatrix} s(2) & -p(2) & & 0 \\ -p(2) & s(6) & -p(6) & \\ & -p(6) & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \\
 M^{(3)} &= \begin{bmatrix} s(3) & -p(3) & & 0 \\ -p(3) & s(7) & -p(7) & \\ & -p(7) & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

L'unione degli autovalori di queste matrici costituisce di conseguenza l'intero spettro dell'operatore \hat{J} , al variare di ϵ .

Si è ritenuto importante, inoltre, evidenziare un possibile metodo analitico per valutare gli autovalori di \hat{H}_B .

Utilizzando la teoria semiclassica infatti, è possibile mettere in corrispondenza diretta operatori in meccanica quantistica e funzioni di sistemi dinamici in meccanica classica. Nel limite semiclassico di una costante di Planck piccola, si ottiene la regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld. In particolare, è provato [2] che questa regola di quantizzazione è valida per un sistema con un grado di libertà (come nel caso studiato) e con un'espressione arbitraria dell'hamiltoniana, purché il relativo spettro non sia degenere [2].

Per \hbar piccolo si ottiene quindi la condizione generale [2]

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int \int_{H_B \leq E_n} dp dq = n + \frac{1}{2}, n \in \mathbb{N}; \quad (5.34)$$

che, per la (5.5) implica una relazione del tipo

$$(1 + \epsilon q^2)(1 + \epsilon p^2) \leq (1 + \epsilon E_n)^2, n \in \mathbb{N}; \quad (5.35)$$

tale relazione può essere ulteriormente sviluppata per poi essere sostituita nella (5.35), procedendo al calcolo esplicito del valore dell'integrale.

5.4 Studio numerico dello spettro di \hat{J}

Gli autovalori di (5.33) sono stati calcolati numericamente utilizzando MATLAB, tramite gli script *main.m*, *autovalori.m* riportati in Appendice C.

Il setup numerico prevede i seguenti parametri principali:

- $Nmin, Nmax$, parametri minimi e massimi, rispettivamente, per le dimensioni delle matrici $M^{(i)}, i = 0,1,2,3$ di cui calcolare gli autovalori. Gli autovalori totali saranno quindi in numero compreso nell'intervallo $[4Nmin, 4Nmax]$;
- $epsmin, epsmax, epsstep, deltaeps$, parametri che caratterizzano la presenza della non linearità tramite ϵ ;
- tol , parametro che indica la tolleranza al di sotto della quale l'errore nel calcolo degli autovalori è considerato trascurabile e quindi la convergenza è raggiunta;
- $Nautoval, Neps$, parametri che indicano, rispettivamente, il numero di autovalori da studiare e il numero di diversi valori di ϵ considerati.

Inoltre, è stata utilizzata una struttura matriciale denominata J tale che $dim(J) = (epsstep + 1) \times 4 \times N$, con $Nmin \leq N \leq Nmax$ per memorizzare l'unione degli autovalori delle matrici $M^{(i)}, i = 0,1,2,3$, al variare di ϵ .

Un esempio di struttura di J per $epsmin = 0, epsmax = 2, epsstep = 200, deltaeps = 0.01$ è riportato di seguito

$$J(:, :, 1) = \begin{bmatrix} eig_{0,1}^0 & eig_{1,1}^0 & \dots & \dots \\ eig_{0,1}^{0.01} & eig_{1,1}^{0.01} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ eig_{0,1}^2 & eig_{1,1}^2 & \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (5.36)$$

$$J(:, :, 2) = \begin{bmatrix} eig_{0,2}^0 & eig_{1,2}^0 & \dots & \dots \\ eig_{0,2}^{0.01} & eig_{1,2}^{0.01} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ eig_{0,2}^2 & eig_{1,2}^2 & \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (5.37)$$

$$J(:, :, N) = \begin{bmatrix} eig_{0,N}^0 & eig_{1,N}^0 & \dots & \dots \\ eig_{0,N}^{0.01} & eig_{1,N}^{0.01} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ eig_{0,N}^2 & eig_{1,N}^2 & \dots & \dots \end{bmatrix}, \quad (5.38)$$

dove $eig_{i,n}^\epsilon$, $n = 1, \dots, N$ è l' n -esimo autovalore di ogni matrice $M^{(i)}$, con $\dim(M^{(i)}) = N$, per un certo ϵ . Ogni autovalore, quindi, è in posizione (r, c, n) dove r indica l'indice relativo al valore di ϵ , c indica l'indice relativo alla matrice $M^{(i)}$ ed n il posto ordinato dell'autovalore.

Per $N = 2$ ed $\epsilon = 0$ gli autovalori saranno quindi nelle posizioni (ordinate in ordine crescente): $J(1,0,1)$, $J(1,1,1)$, $J(1,2,1)$, $J(1,3,1)$, $J(1,0,2)$, $J(1,1,2)$, $J(1,2,2)$, $J(1,3,2)$.

Sono stati portati a termine due studi differenti, i quali hanno restituito, rispettivamente, l'andamento del valore assunto dallo spettro di \hat{J} ed \hat{H}_B in funzione di ϵ e la convergenza dell'errore nel calcolo dello spettro di \hat{J} in funzione di N , ed ϵ .

Per il primo studio, le variabili numeriche introdotte sono state fissate ai seguenti valori

- $Nmin = Nmax = 2$;
- $epsmin = 0, epsmax = 2, epsstep = 200, deltaeps = 0.01$;

l'esecuzione dello script ha restituito lo spettro di \hat{J} . L'andamento dei primi otto autovalori è rappresentato in Figure 5.1 e 5.2. Tali autovalori sono stati calcolati con la massima precisione possibile ($\dim(M^{(i)}) = 500$, da cui ne sono stati scelti i primi otto in ordine crescente come mostrato nell'esempio poco sopra).

Tramite la relazione (5.13) è possibile ricavare lo spettro di \hat{H}_B . Infatti, si considera la generica relazione $y = x + \frac{\epsilon}{2}x^2$ e si sostituisce ad y il valore numerico degli autovalori precedentemente calcolati. L'andamento dello spettro di \hat{H}_B è rappresentato in Figure 5.3 e 5.4.

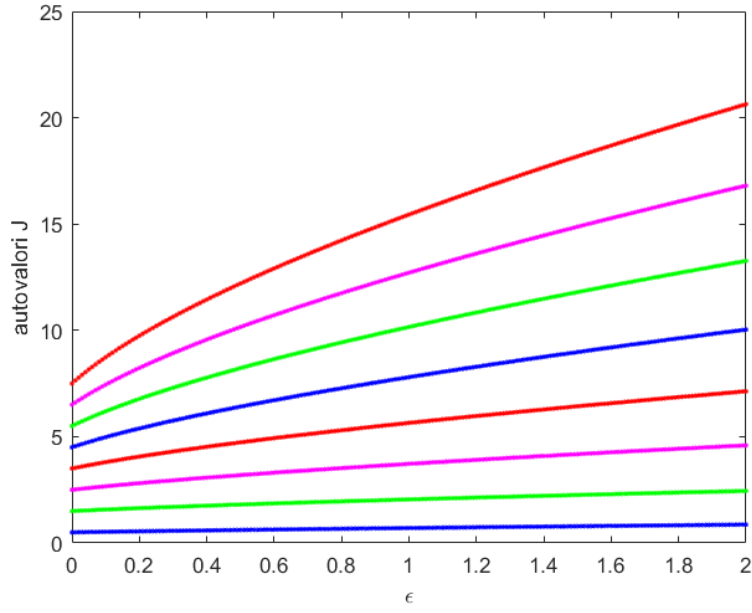


Figura 5.1. Primi otto autovalori dell'operatore \hat{J} al variare di ϵ in $[0,2]$.

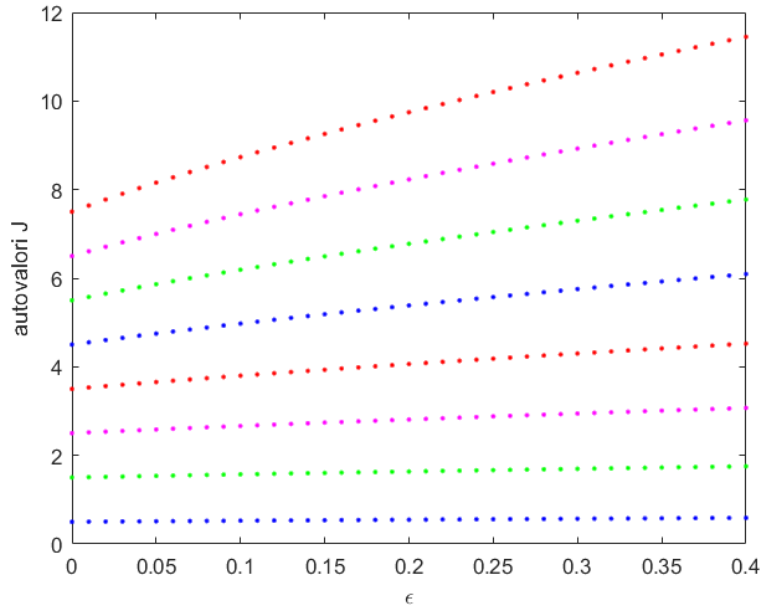


Figura 5.2. Particolare dei primi otto autovalori dell'operatore \hat{J} al variare di ϵ in $[0,0.4]$.

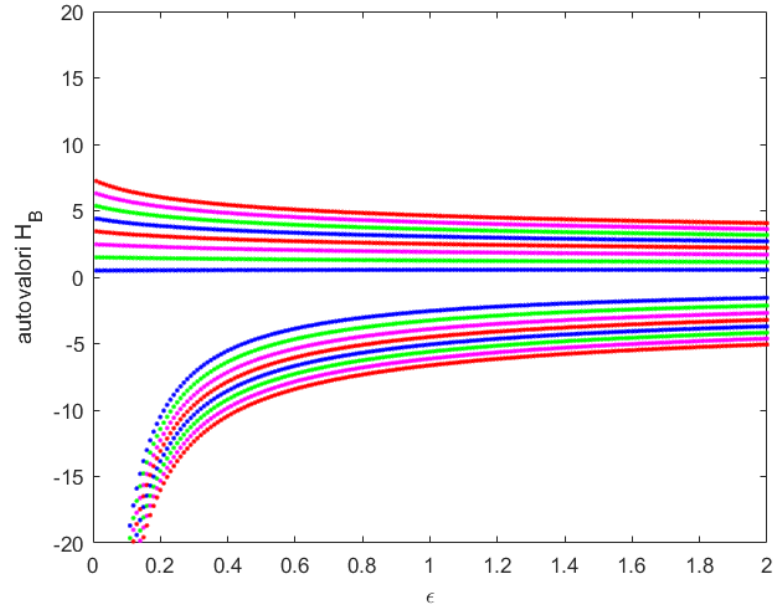


Figura 5.3. Rispettivi autovalori dell'operatore \hat{H}_B al variare di ϵ in $[0,2]$.

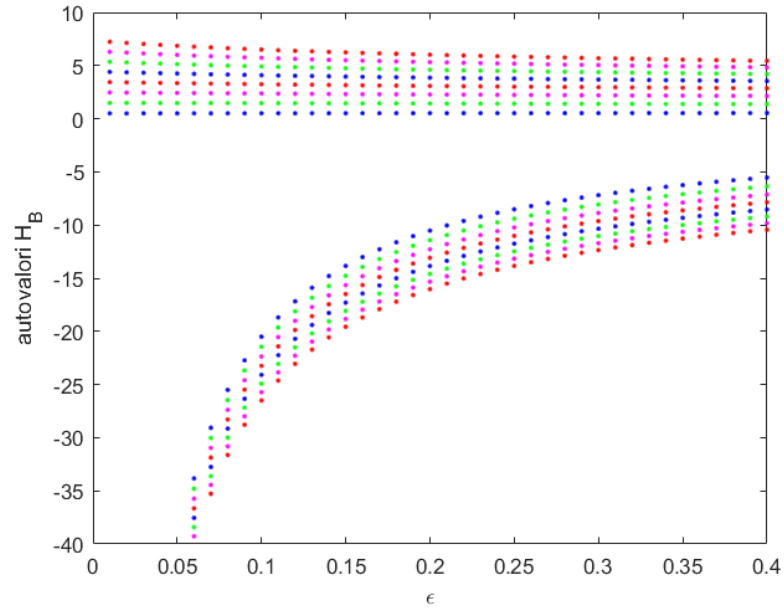


Figura 5.4. Particolare dei rispettivi autovalori dell'operatore \hat{H}_B al variare di ϵ in $[0,0.4]$.

Per il secondo studio, considerate le matrici $M^{(i)}(N^*)$, è stato oggetto di interesse l'errore che si commette nel calcolo dei primi autovalori di $M^{(i)}(N)$ per $N \ll N^*$. Fissato un certo valore di ϵ , è stato effettuato lo studio dell'andamento dell'errore nel calcolo dei primi autovalori ordinati dell'unione delle matrici $M^{(i)}(N)$. Le variabili numeriche introdotte sono state fissate ai seguenti valori

- $Nmin = 2, Nmax = 500$;
- $epsmin = 0, epsmax = 2, epsstep = 200, deltaeps = 0.01$;
- $tol = 10^{-13}$;
- $Nautoval = 8, Neps = 3$;

i tre valori di ϵ sono stati fissati a 0.1, 0.2, 0.4, affinché si possa evidenziare la non linearità. Introdotta la quantità $err_{j,N}^\epsilon, j \in \mathbb{N}, 1 \leq j \leq 8$ che corrisponde numericamente al j -esimo autovalore memorizzato in ordine crescente nella struttura J , è stata quindi calcolata la quantità

$$err_{j,N}^\epsilon = |eig_{j,N}^\epsilon - eig_{j,N^*}^\epsilon|, \quad (5.39)$$

per cui la convergenza risulterà raggiunta per

$$err_{j,N}^\epsilon \leq tol. \quad (5.40)$$

L'andamento dell'errore in funzione di N per i tre valori di ϵ scelti è rappresentato in Figure 5.5, 5.6, 5.7.

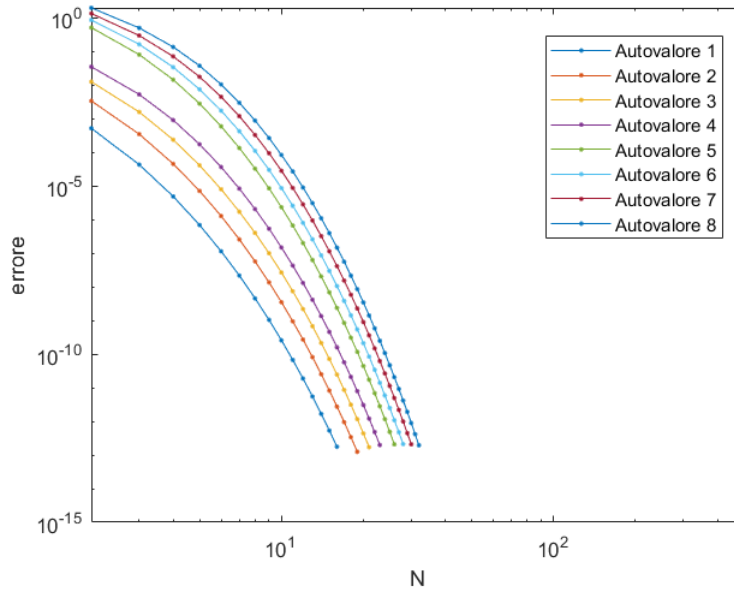


Figura 5.5. Andamento dell'errore per i primi otto autovalori in funzione di N per $\epsilon = 0.4$.

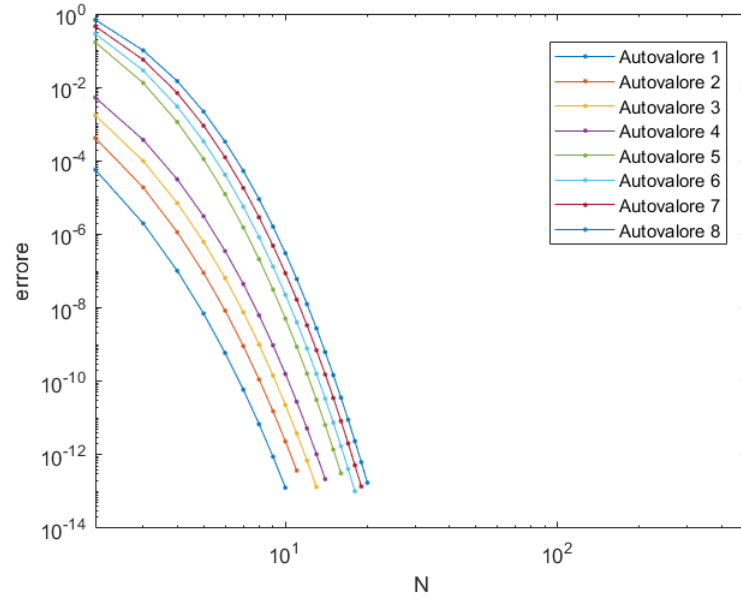


Figura 5.6. Andamento dell'errore per i primi otto autovalori in funzione di N per $\epsilon = 0.2$.

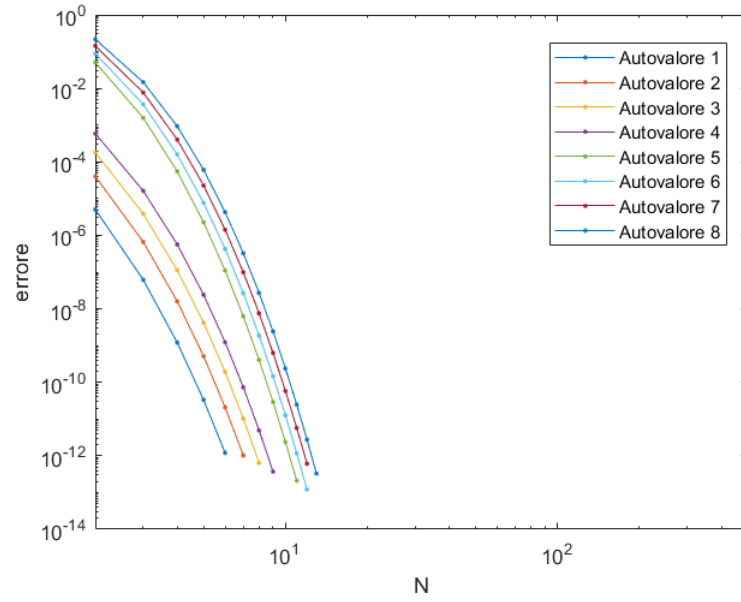


Figura 5.7. Andamento dell'errore per i primi otto autovalori in funzione di N per $\epsilon = 0.1$.

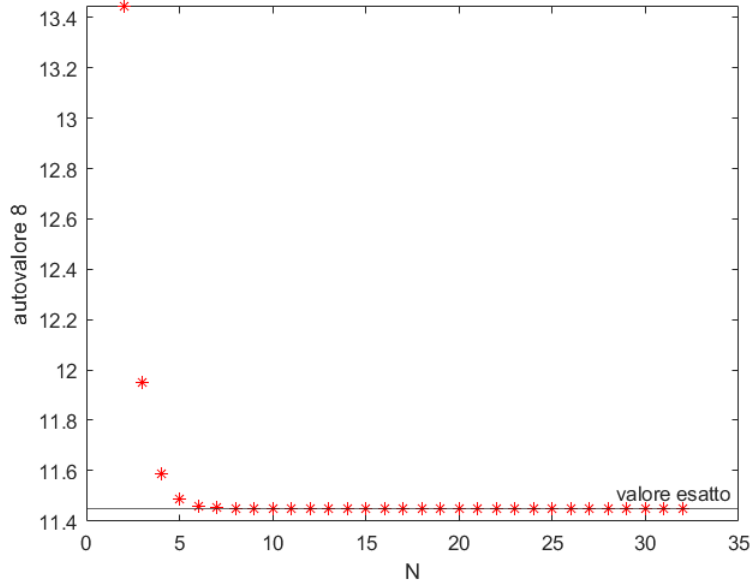


Figura 5.8. Convergenza dell'autovalore 8 in funzione di N per $\epsilon = 0.4$.

I calcoli per ottenere gli ordini di convergenza si sono basati su una relazione del tipo

$$|\log err_{j,2N}^\epsilon - \log err_{j,N}^\epsilon| = |\alpha[\log(2N) - \log N]| \implies |\alpha| = \frac{|\log \frac{err_{j,2N}^\epsilon}{err_{j,N}^\epsilon}|}{|\log 2|}, \quad (5.41)$$

per cui è stato possibile ottenere l'ordine di convergenza per l'errore nel calcolo degli autovalori al raddoppiare di N .

A seguito dell'esecuzione degli script si evidenzia che:

- l'ordine di convergenza migliora all'aumentare di N , a parità di numero di autovalore e valore di ϵ ;
- l'ordine di convergenza peggiora all'aumentare del numero dell'autovalore, a parità di ϵ ed N ;
- l'ordine di convergenza peggiora all'aumentare di ϵ , a parità di numero di autovalore ed N ;

Indicando con \tilde{N}_j^ϵ i valori di N per i quali si è raggiunta la convergenza per un dato ϵ e per un dato autovalore ordinato contenuto nella struttura J di posto j , risulta sperimentalmente che per $\epsilon = 0.1, 0.2, 0.4; j \in \mathbb{N}, 1 \leq j \leq 7$

$$\frac{\tilde{N}_{j+1}^\epsilon}{\tilde{N}_j^\epsilon} \approx [1, 1.2] \quad (5.42)$$

L'output dello script per il secondo studio è riportato di seguito

Epsilon = 0.40

Autovalore numero 1

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 6.74
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 10.07
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 14.67
Convergenza raggiunta per N = 17.00

Autovalore numero 2

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 6.22
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 9.64
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 14.34
Convergenza raggiunta per N = 20.00

Autovalore numero 3

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 5.73
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 9.22
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 14.00
Convergenza raggiunta per N = 22.00

Autovalore numero 4

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 5.27
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 8.79
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 13.65
Convergenza raggiunta per N = 24.00

Autovalore numero 5

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 5.15
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 8.78
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 13.76
Convergenza raggiunta per N = 27.00

Autovalore numero 6

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 4.67
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 8.27
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 13.36
Convergenza raggiunta per N = 29.00

Autovalore numero 7

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 4.24
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 7.77
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 12.95
Convergenza raggiunta per N = 31.00

Autovalore numero 8

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 3.86
Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 7.28
Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 12.55
Rapporto incrementale tra N = 16, N = 32: ordine di convergenza 19.53
Convergenza raggiunta per N = 33.00

Epsilon = 0.20

Autovalore numero 1

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 9.13
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 13.87
 Convergenza raggiunta per N = 11.00

Autovalore numero 2

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 8.50
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 13.33
 Convergenza raggiunta per N = 12.00

Autovalore numero 3

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 7.92
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 12.81
 Convergenza raggiunta per N = 14.00

Autovalore numero 4

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 7.38
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 12.30
 Convergenza raggiunta per N = 15.00

Autovalore numero 5

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 7.20
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 12.41
 Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 19.36
 Convergenza raggiunta per N = 17.00

Autovalore numero 6

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 6.59
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 11.82
 Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 18.88
 Convergenza raggiunta per N = 19.00

Autovalore numero 7

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 6.03
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 11.24
 Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 18.41
 Convergenza raggiunta per N = 20.00

Autovalore numero 8

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 5.54
 Rapporto incrementale tra N = 04, N = 08: ordine di convergenza 10.68
 Rapporto incrementale tra N = 08, N = 16: ordine di convergenza 17.94
 Convergenza raggiunta per N = 21.00

Epsilon = 0.10

Autovalore numero 1

Rapporto incrementale tra N = 02, N = 04: ordine di convergenza 12.03
 Convergenza raggiunta per N = 7.00

Autovalore numero 2

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 11.30
Convergenza raggiunta per $N = 8.00$

Autovalore numero 3

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 10.63
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 17.42
Convergenza raggiunta per $N = 9.00$

Autovalore numero 4

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 10.02
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 16.82
Convergenza raggiunta per $N = 10.00$

Autovalore numero 5

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 9.85
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 17.05
Convergenza raggiunta per $N = 12.00$

Autovalore numero 6

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 9.12
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 16.37
Convergenza raggiunta per $N = 13.00$

Autovalore numero 7

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 8.47
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 15.71
Convergenza raggiunta per $N = 13.00$

Autovalore numero 8

Rapporto incrementale tra $N = 02$, $N = 04$: ordine di convergenza 7.86
Rapporto incrementale tra $N = 04$, $N = 08$: ordine di convergenza 15.08
Convergenza raggiunta per $N = 14.00$

La forma ottenuta in (5.23) e poi applicata in (5.33) può essere riscritta in maniera più agevole per il calcolo ricorsivo di $c(j)$. Infatti, ponendo $c(j) = \sqrt{j!}\tilde{c}(j)$ risulta

$$J^*\tilde{c}(j) = -r(j)\sqrt{\frac{(j-4)!}{j!}}\tilde{c}(j-4) - p(j)\sqrt{\frac{(j+4)!}{j!}}\tilde{c}(j+4) + s(j)\tilde{c}(j), \quad (5.43)$$

che può essere riscritta come

$$J^*\tilde{c}(j) = -\tilde{r}(j)\tilde{c}(j-4) - \tilde{p}(j)\tilde{c}(j+4) + s(j)\tilde{c}(j), \quad (5.44)$$

cioè $\tilde{r}(j) = \frac{\epsilon}{8}j(j-1)(j-2)(j-3)$, $\tilde{p}(j) = \frac{\epsilon}{8}(j+4)(j+3)(j+2)(j+1) = \tilde{r}(j+4)$. Perciò vale la relazione ricorsiva

$$\tilde{c}(j+4) = \frac{(s(j) - J^*)\tilde{c}(j) - \tilde{r}(j)\tilde{c}(j-4)}{\tilde{r}(j+4)}. \quad (5.45)$$

Utilizzando (5.45), per $j = 0, 1, \dots, 4$ si ottengono le espressioni analitiche

$$\tilde{c}(4) = \frac{(s(0) - J^*)\tilde{c}(0)}{\tilde{r}(4)}, \quad (5.46)$$

$$\tilde{c}(5) = \frac{(s(1) - J^*)\tilde{c}(1)}{\tilde{r}(5)}, \quad (5.47)$$

$$\tilde{c}(6) = \frac{(s(2) - J^*)\tilde{c}(2)}{\tilde{r}(6)}, \quad (5.48)$$

$$\tilde{c}(7) = \frac{(s(3) - J^*)\tilde{c}(3)}{\tilde{r}(7)}, \quad (5.49)$$

$$\tilde{c}(8) = \frac{(s(4) - J^*)\tilde{c}(4) - \tilde{r}(4)\tilde{c}(0)}{\tilde{r}(8)} = \frac{(s(4) - J^*)\left(\frac{(s(0) - J^*)\tilde{c}(0)}{\tilde{r}(4)}\right) - \tilde{r}(4)\tilde{c}(0)}{\tilde{r}(8)}; \quad (5.50)$$

imponendo quindi arbitrariamente $\tilde{c}(0) = 1, \tilde{c}(1) = 1$, è stato verificato numericamente in MATLAB la convergenza di \tilde{c} a zero per (5.45), (5.46). Il relativo andamento è rappresentato in Figure 5.9 e 5.10.

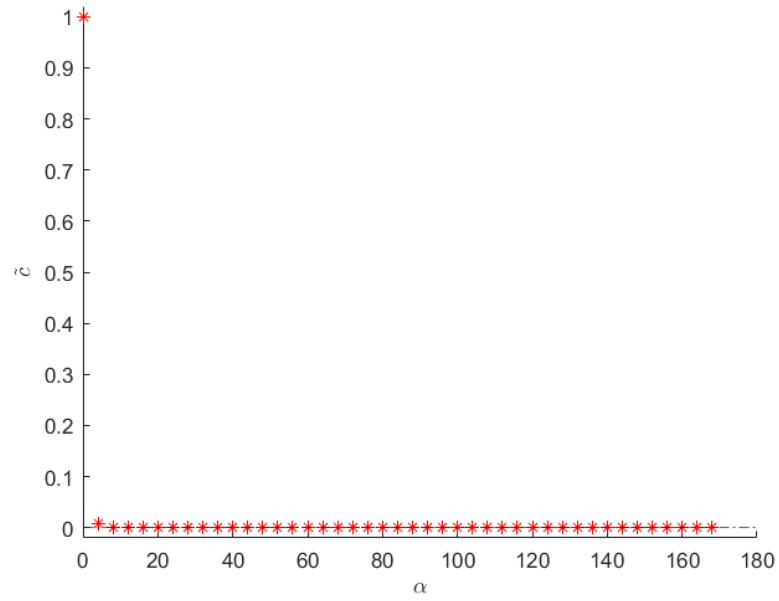


Figura 5.9. Convergenza di $\tilde{c}(j)$ in funzione di $j = 0, 4, \dots$

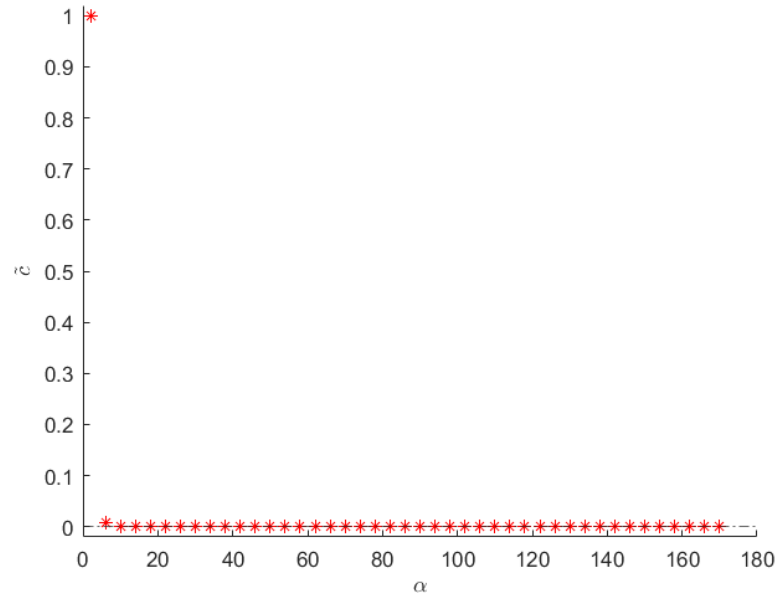


Figura 5.10. Convergenza di $\tilde{c}(j)$ in funzione di $j = 1, 5, \dots$

5.5 Cambio di variabili

In analogia con quanto effettuato nel Capitolo 3.4, è possibile operare un cambio di variabili: si introduce la coppia di variabili (Q, P) tali che $\sqrt{\epsilon}q = \sinh \sqrt{\epsilon}Q$, $\sqrt{\epsilon}p = \sinh \sqrt{\epsilon}P$. Da questa scelta risulta

$$\dot{q} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \frac{\partial \sinh \sqrt{\epsilon}Q}{\partial Q} \dot{Q} = (\cosh \sqrt{\epsilon}Q) \dot{Q}, \quad (5.51)$$

da (5.2) segue

$$(\cosh \sqrt{\epsilon}Q) \dot{Q} = (\sinh \sqrt{\epsilon}P) \sqrt{\frac{1 + (\sinh \sqrt{\epsilon}Q)^2}{1 + (\sinh \sqrt{\epsilon}P)^2}} \implies \dot{Q} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \tanh \sqrt{\epsilon}P. \quad (5.52)$$

Ripetendo analoghi procedimenti analitici per la variabile \dot{p} si ottiene

$$(\cosh \sqrt{\epsilon}P) \dot{P} = -(\sinh \sqrt{\epsilon}Q) \sqrt{\frac{1 + (\sinh \sqrt{\epsilon}P)^2}{1 + (\sinh \sqrt{\epsilon}Q)^2}} \implies \dot{P} = -\frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \tanh \sqrt{\epsilon}Q. \quad (5.53)$$

Le espressioni (5.52) e (5.53) sono equazioni del moto che si possono ottenere da un'hamiltoniana

$$H_B^*(Q, P) = \frac{1}{\epsilon} \log[(\cosh \sqrt{\epsilon}P)(\cosh \sqrt{\epsilon}Q)], \quad (5.54)$$

come è possibile verificare eseguendo il calcolo delle derivate $\frac{\partial H_B^*(Q, P)}{\partial P}$ e $-\frac{\partial H_B^*(Q, P)}{\partial Q}$. La relazione tra (5.54) e (5.5) è quindi

$$e^{\epsilon H_B^*} = \epsilon H_B + 1 = (\cosh \sqrt{\epsilon}P)(\cosh \sqrt{\epsilon}Q), \quad (5.55)$$

che corrisponde in forma analitica alla (3.50). Utilizzando le proprietà della funzione coseno iperbolico, si può anche scrivere, più agevolmente per i calcoli,

$$(\cosh \sqrt{\epsilon}P)(\cosh \sqrt{\epsilon}Q) = \frac{1}{2} \cosh \sqrt{\epsilon}(Q + P) + \frac{1}{2} \cosh \sqrt{\epsilon}(Q - P). \quad (5.56)$$

La quantizzazione quindi segue introducendo l'operatore \hat{H}_B^* tale che

$$e^{\epsilon \hat{H}_B^*} = (\cosh \sqrt{\epsilon} \hat{P})(\cosh \sqrt{\epsilon} \hat{Q}) = \frac{1}{2} \cosh \sqrt{\epsilon}(\hat{Q} + \hat{P}) + \frac{1}{2} \cosh \sqrt{\epsilon}(\hat{Q} - \hat{P}); \quad (5.57)$$

se viene posto $\hat{Q}^* = \frac{\hat{P} - \hat{Q}}{\sqrt{2}}$ e $\hat{P}^* = \frac{\hat{P} + \hat{Q}}{\sqrt{2}}$ risulta

$$e^{\epsilon \hat{H}_B^*} = \frac{1}{2} \cosh \eta \hat{Q}^* + \frac{1}{2} \cosh \eta \hat{P}^*, \quad (5.58)$$

dove $\eta = \sqrt{2\epsilon}$. Da un punto di vista analitico, sembrerebbe quindi più ragionevole lavorare con (5.58) in luogo di (5.57). Da $\hat{P} = -i \frac{\partial}{\partial \hat{Q}}$, se $\psi(z)$, ($z = Q + i\tilde{Q}$) è una funzione analitica, risulterà

$$e^{\eta \hat{P}} \psi(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i\eta)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial \hat{Q}} \right)^n \psi(Q + i\tilde{Q}) = \psi(z - i\eta), \quad (5.59)$$

quindi l'applicazione dell'operatore $\cosh \eta \hat{P}$ su $\psi(z)$ restituisce

$$(\cosh \eta \hat{P}) \psi(z) = \frac{1}{2} (e^{\eta \hat{P}} + e^{-\eta \hat{P}}) \psi(z) = \frac{1}{2} [\psi(z - i\eta) + \psi(z + i\eta)]. \quad (5.60)$$

Da quanto appena ottenuto seguono alcune proprietà analitiche e casi particolari, di seguito riportati, per ogni $\alpha, \beta \in \mathbb{R}, k \in \mathbb{N}$

$$e^{\alpha \hat{P}} e^{\beta \hat{Q}} \psi = e^{\beta(\hat{Q} - i\alpha)} \psi(\hat{Q} - i\alpha) = e^{-i\alpha\beta} e^{\beta \hat{Q}} e^{\alpha \hat{P}} \psi \implies e^{\alpha \hat{P}} e^{\beta \hat{Q}} = e^{\beta \hat{Q}} e^{\beta \hat{P}} e^{[\alpha \hat{P}, \beta \hat{Q}]}, \quad (5.61)$$

essendo $[\alpha \hat{P}, \beta \hat{Q}] = -i\alpha\beta$. Applicando tale relazione, si ha inoltre

$$e^{\alpha \hat{P}} \cosh \beta \hat{Q} = \frac{1}{2} (e^{\alpha \hat{P}} e^{\beta \hat{Q}} + e^{\alpha \hat{P}} e^{-\beta \hat{Q}}) = \frac{1}{2} (e^{-i\alpha\beta} e^{\beta \hat{Q}} + e^{i\alpha\beta} e^{-\beta \hat{Q}}) e^{\alpha \hat{P}}, \quad (5.62)$$

$$e^{-\alpha \hat{P}} \cosh \beta \hat{Q} = \frac{1}{2} (e^{i\alpha\beta} e^{\beta \hat{Q}} + e^{-i\alpha\beta} e^{-\beta \hat{Q}}) e^{-\alpha \hat{P}}, \quad (5.63)$$

$$2 \cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = \frac{1}{2} e^{-i\alpha\beta} (e^{\beta \hat{Q}} e^{\alpha \hat{P}} + e^{-\beta \hat{Q}} e^{-\alpha \hat{P}}) + \frac{1}{2} e^{i\alpha\beta} (e^{\beta \hat{Q}} e^{-\alpha \hat{P}} + e^{-\beta \hat{Q}} e^{\alpha \hat{P}}). \quad (5.64)$$

Alcuni casi particolari si ottengono considerando specifici valori di α e β

$$\alpha\beta = 2k\pi \implies e^{i\alpha\beta} = 1 \implies [e^{\alpha \hat{P}}, e^{\alpha \hat{Q}}] = 0, \quad (5.65)$$

da cui segue

$$\cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = \cosh \beta \hat{Q} \cosh \alpha \hat{P}. \quad (5.66)$$

$$\alpha\beta = (2k+1)\pi \implies e^{i\alpha\beta} = -1 \implies \{e^{\alpha \hat{P}}, e^{\alpha \hat{Q}}\} = 0, \quad (5.67)$$

da cui segue

$$\cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = -\cosh \beta \hat{Q} \cosh \alpha \hat{P}. \quad (5.68)$$

$$\begin{aligned} \alpha\beta = (4k+1)\frac{\pi}{2} \implies e^{i\alpha\beta} = i \implies 2 \cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = \\ \frac{i}{2} (e^{\beta \hat{Q}} e^{-\alpha \hat{P}} + e^{-\beta \hat{Q}} e^{\alpha \hat{P}}) - \frac{i}{2} (e^{\beta \hat{Q}} e^{\alpha \hat{P}} + e^{-\beta \hat{Q}} e^{-\alpha \hat{P}}) = \\ -ie^{\beta \hat{Q}} \sinh \alpha \hat{P} + ie^{-\beta \hat{Q}} \sinh \alpha \hat{P} = -2i \sinh \beta \hat{Q} \sinh \alpha \hat{P}, \end{aligned} \quad (5.69)$$

da cui segue

$$\cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = -\sinh \beta \hat{Q} \sinh \alpha \hat{P}. \quad (5.70)$$

Quindi, in generale

$$\cosh \alpha \hat{P} \cosh \beta \hat{Q} = \cos \alpha \beta \cosh \beta \hat{Q} \cosh \alpha \hat{P} - i \sin \alpha \beta \sinh \beta \hat{Q} \sinh \alpha \hat{P}. \quad (5.71)$$

Capitolo 6

Considerazioni finali

6.1 Possibili modelli regressivi

A seguito del risultato di convergenza ottenuto in (5.42), è possibile ipotizzare la presenza di un relazione lineare statisticamente significativa per i valori di convergenza \tilde{N}_j^ϵ rispetto ai parametri ϵ e j . Per questo motivo, può essere proposto un modello di regressione lineare.

Definizione 2 *Il modello di regressione lineare è, in generale, nella forma [10]*

$$Y = X\beta + \epsilon, \quad (6.1)$$

dove

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_{n1} & \dots & x_{np} \end{bmatrix} \quad (6.2)$$

è la matrice del piano sperimentale (che contiene i dati oggetto dello studio), $X\beta$ è il valore atteso di Y , cioè $E(\epsilon) = 0$ [10]; β è il vettore dei parametri incogniti, ϵ è un vettore di n variabili aleatorie non osservabili, chiamate errori [10].

Il modello utilizzato è, in particolare, un modello di regressione lineare semplice, in cui cioè $p = 1$. Inoltre, il numero n delle osservazioni è pari a 24. La tabella, costruita in base ai dati ricavati dai calcoli nel Capitolo 5.4 ed utilizzata per la costruzione del modello di regressione, è la seguente

j	ϵ	\tilde{N}_j^ϵ
1	0.1	7
2	0.1	8
3	0.1	9
4	0.1	10
5	0.1	12
6	0.1	13
7	0.1	14
8	0.1	16
1	0.2	11
2	0.2	12
3	0.2	14
4	0.2	15
5	0.2	17
6	0.2	19
7	0.2	20
8	0.2	21
1	0.4	17
2	0.4	20
3	0.4	22
4	0.4	24
5	0.4	27
6	0.4	29
7	0.4	31
8	0.4	33

Tabella 6.1. Tabella utilizzata per la costruzione del modello lineare: \tilde{N}_j^ϵ indica il valore di N per cui è stata raggiunta la convergenza, per un dato autovalore di posto j e per un dato valore di ϵ .

Il modello regressivo è stato implementato in R tramite il software RStudio ed il relativo codice è riportato in Appendice C nello script *regressione.r*; dai risultati ottenuti è stato possibile mettere in evidenza una relazione lineare statisticamente significativa tra \tilde{N}_j^ϵ e j , tra $\tilde{N}_j^{\epsilon_1}$ ed $\tilde{N}_j^{\epsilon_2}$. Per i modelli implementati sono state verificate le seguenti condizioni:

- che il $p - value$ sia sotto la soglia di significatività pari al 5%;
- che i residui siano omoschedastici, con media 0 e non presentino particolari pattern;
- che il valore del coefficiente di determinazione R^2 sia il più possibile vicino ad 1.

Sono stati creati i modelli lineari *regr01*, *regr02*, *regr04* che fanno riferimento, rispettivamente alla dipendenza lineare tra \tilde{N}_j^ϵ e j per $\epsilon = 0.1, 0.2, 0.4$. Le relative rette di regressione sono rappresentate in Figura 6.2. Dai risultati ottenuti, le due condizioni sopra riportate sono verificate: i $p - value$ per i tre modelli lineari sono tutti al di sotto della soglia di significatività e la distribuzione dei residui, che non presenta in alcun caso particolari pattern, è rappresentata in Figura 6.3. I valori di R^2 calcolati per i modelli, sono, rispettivamente 0.989, 0.991, 0.997, quindi tutti e tre i modelli creati spiegano bene la relazione lineare.

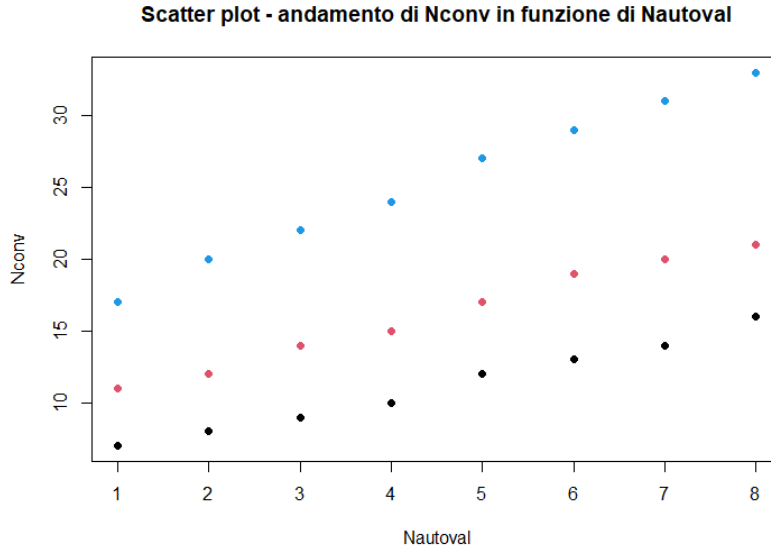


Figura 6.1. Scatter plot che evidenzia un andamento lineare crescente per \tilde{N}_j^ϵ , per $\epsilon = 0.1$ (in nero), per $\epsilon = 0.2$ (in rosso), per $\epsilon = 0.4$ (in azzurro).

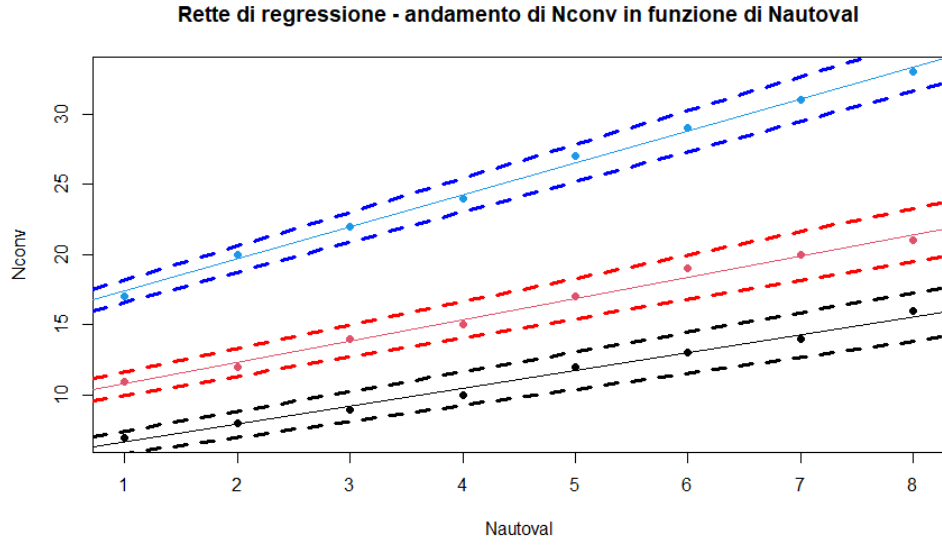


Figura 6.2. Rette di regressione e relativi intervalli di confidenza al 95% per i modelli lineari *regr01*, *regr02*, *regr04*, rispettivamente in nero, rosso, azzurro, che evidenziano una dipendenza lineare statisticamente significativa tra il numero j dell'autovalore ed \bar{N}_j^ϵ .

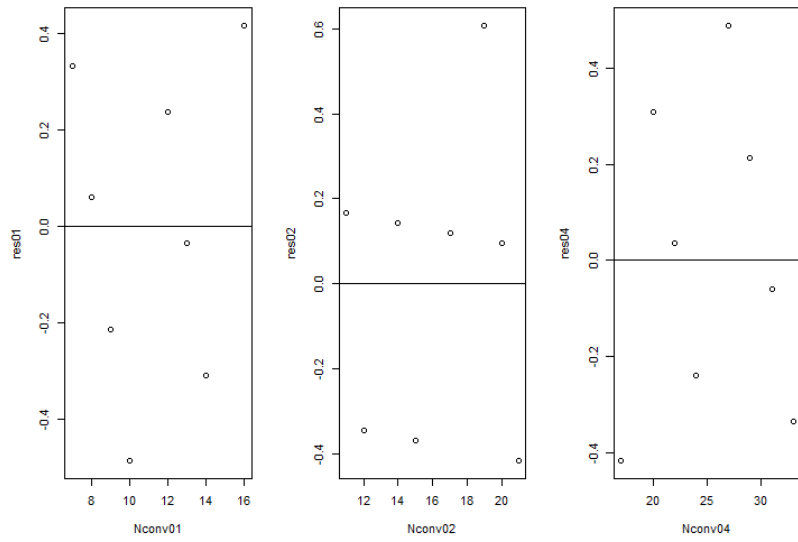


Figura 6.3. Distribuzione dei residui rispetto al valore 0 per modelli lineari *regr01*, *regr02*, *regr04*: non si evidenzia alcun pattern.

I risultati ottenuti consentono di effettuare delle previsioni per la convergenza di auto-valori non esplicitamente trattati: ad esempio, per ottenere una stima di $\tilde{N}_{16}^{0.1}$, $\tilde{N}_{16}^{0.2}$, $\tilde{N}_{16}^{0.4}$ si calcolano i relativi intervalli di previsione al 95%, che consentono di prevedere

$$24.01 \leq \tilde{N}_{16}^{0.1} \leq 27.53, \tilde{N}_{16}^{0.1} \approx 25.77; \quad (6.3)$$

$$31.59 \leq \tilde{N}_{16}^{0.2} \leq 35.44, \tilde{N}_{16}^{0.2} \approx 33.51; \quad (6.4)$$

$$49.76 \leq \tilde{N}_{16}^{0.4} \leq 53.28, \tilde{N}_{16}^{0.4} \approx 51.52. \quad (6.5)$$

L'output dei modelli lineari *regr01*, *regr02*, *regr04* è riportato di seguito.

```
> regr01 <- lm(Nconv01 ~ Nautoval01)
> summary(regr01)

Call:
lm(formula = Nconv01 ~ Nautoval01)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.4881 -0.2381  0.0119  0.2619  0.4167

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   5.39286    0.27108   19.89 1.05e-06 ***
Nautoval01    1.27381    0.05368   23.73 3.68e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3479 on 6 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9895, Adjusted R-squared:  0.9877
F-statistic: 563.1 on 1 and 6 DF, p-value: 3.677e-07

> regr02 <- lm(Nconv02 ~ Nautoval02)
> summary(regr02)

Call:
lm(formula = Nconv02 ~ Nautoval02)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.4167 -0.3512  0.1071  0.1488  0.6071

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   9.32143    0.29655   31.43 6.89e-08 ***
Nautoval02    1.51190    0.05872   25.75 2.26e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3806 on 6 degrees of freedom
```

Multiple R-squared: 0.991, Adjusted R-squared: 0.9895
F-statistic: 662.8 on 1 and 6 DF, p-value: 2.264e-07

```
> regr04 <- lm(Nconv04 ~ Nautoval04)
> summary(regr04)
```

Call:
lm(formula = Nconv04 ~ Nautoval04)

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-0.4167	-0.2619	-0.0119	0.2381	0.4881

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	15.14286	0.27108	55.86	2.21e-09 ***
Nautoval04	2.27381	0.05368	42.36	1.16e-08 ***

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.3479 on 6 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9967, Adjusted R-squared: 0.9961
F-statistic: 1794 on 1 and 6 DF, p-value: 1.159e-08

Analogamente, per ottenere una stima per l'intervallo di convergenza per i primi otto autovalori per $\epsilon = 0.3, \epsilon = 0.6$, che sono due valori di ϵ non studiati direttamente nel capitolo 5.4, è stato creato il modello lineare *regreps* che fa riferimento alla dipendenza lineare tra \tilde{N}_j^ϵ ed ϵ per $1 \leq j \leq 8$. La relativa retta di regressione è rappresentata in Figura 6.4. Dai risultati ottenuti, la prima delle due condizioni sopra riportate è soddisfatta: il p -value è al di sotto della soglia di significatività. Mentre per quanto riguarda la distribuzione dei residui, essi sembrano essere distribuiti in maniera simmetrica rispetto al valore 0, ma la loro distanza aumenta all'aumentare di ϵ : questo potrebbe essere un problema per l'esatta validità del modello lineare, che quindi potrebbe essere migliorato ulteriormente. In questo modello, il valore di R^2 è 0.685, accettabile, tuttavia il modello potrebbe non essere in grado di spiegare in maniera abbastanza accurata i dati. La distribuzione dei residui è rappresentata in Figura 6.5. In questo caso, i risultati ottenuti consentono di effettuare delle previsioni per valori di ϵ non esplicitamente trattati: i relativi intervalli di previsione al 95% consentono di prevedere

$$11.80 \leq \tilde{N}_j^{0.3} \leq 29.59, \quad (6.6)$$

$$24.64 \leq \tilde{N}_j^{0.6} \leq 45.15. \quad (6.7)$$

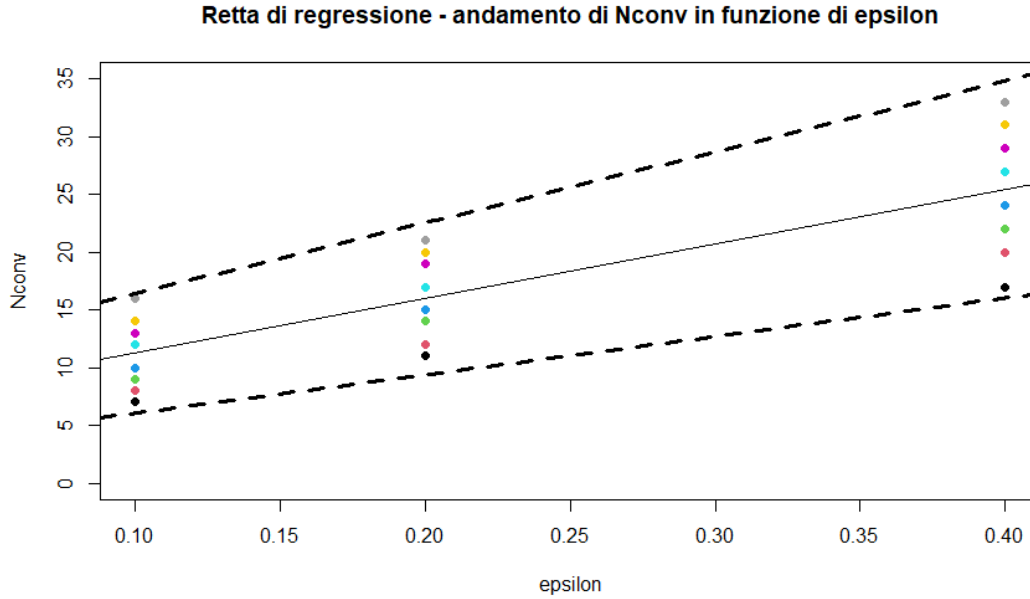


Figura 6.4. Retta di regressione per il modello lineare *regreps* e relativi intervalli di confidenza. Si evidenzia una dipendenza lineare statisticamente significativa tra ϵ ed \tilde{N}_j^ϵ .

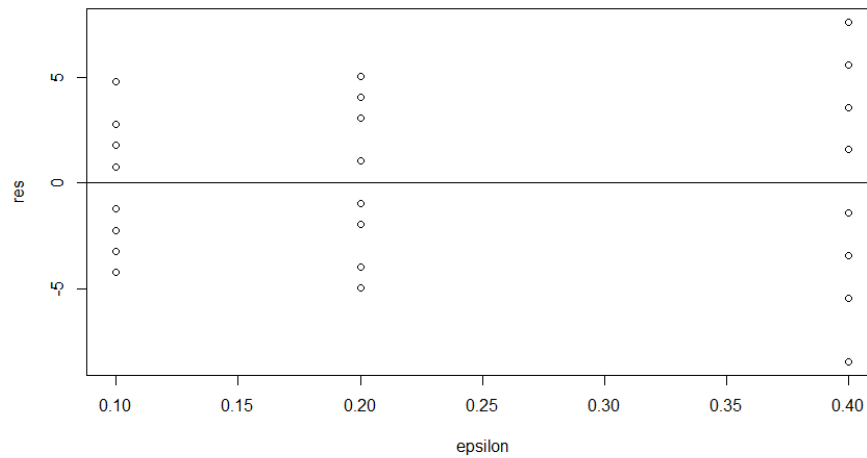


Figura 6.5. Distribuzione dei residui rispetto al valore 0 per il modello lineare *regreps*.

L'output del modello lineare *regreps* è riportato di seguito.

```
> regr_eps = lm(Nconv ~ epsilon)
> summary(regr_eps)

Call:
lm(formula = Nconv ~ epsilon)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-8.4286 -3.2812 -0.0982  3.1696  7.5714

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    6.500      1.809    3.593  0.00162 **
epsilon       47.321      6.837   6.921 5.99e-07 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4.178 on 22 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.6853, Adjusted R-squared:  0.671
F-statistic: 47.9 on 1 and 22 DF, p-value: 5.985e-07
```

La possibilità di prevedere il valore di convergenza a priori potrebbe quindi essere utile ad ottimizzare i costi computazionali richiesti per la verifica della convergenza di successivi autovalori e per valori di ϵ non studiati.

Appendice A

Equazioni di Eulero-Lagrange e di Hamilton

A.1 Introduzione

Le equazioni di Eulero-Lagrange, formulate da L. Euler e J. L. Lagrange nella seconda metà del '700, possono essere considerate come la naturale generalizzazione delle equazioni di Newton per la dinamica. Tramite questa formulazione è stato possibile mettere in relazione la posizione e la velocità di ogni elemento di un sistema fisico. Inoltre, tali equazioni sono state storicamente il punto di partenza per la disciplina del calcolo delle variazioni.

Le equazioni di Hamilton, introdotte da Sir W. R. Hamilton nella prima metà dell'800, consentono una spesso conveniente riformulazione delle equazioni di Eulero-Lagrange nell'ambientazione dello spazio delle fasi per lo studio di sistemi dinamici.

A.2 Derivazione delle equazioni

In meccanica analitica, un sistema è descritto, per ogni istante di tempo t , dalla configurazione dei propri punti, formata da $\mathbf{q}(t) = (q_1(t), \dots, q_n(t))$ (coordinate della posizione) e $\dot{\mathbf{q}}(t) = (\dot{q}_1(t), \dots, \dot{q}_n(t))$ (coordinate della velocità), dove $\dot{q}(t) = \frac{dq(t)}{dt}$ ed $n \in \mathbb{N}$ indica il numero di gradi di libertà del sistema. Viene introdotta quindi una funzione $L : \mathbb{R}^{2n+1} \rightarrow \mathbb{R}, n \geq 1$

$$L = L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t), \quad (\text{A.1})$$

detta lagrangiana, che caratterizza la dinamica dei punti del sistema. Supponendo per questa trattazione $n = 1$ e $q = q(t), \dot{q} = \dot{q}(t)$, segue $\mathbf{q} = (q_1) = q, \dot{\mathbf{q}} = (\dot{q}_1) = \dot{q}$. Viene introdotta inoltre la grandezza

$$p = \frac{dL}{d\dot{q}}, \quad (\text{A.2})$$

chiamata impulso generalizzato. Si definisce inoltre azione il funzionale $S_{AB} : \mathcal{C} \rightarrow \mathbb{R}$

$$S_{AB} = \int_{t_A}^{t_B} L dt, \quad (\text{A.3})$$

dove \mathcal{C} è l'insieme di tutte le traiettorie (o curve) che soddisfano le condizioni al bordo $q(t_A) = q_A, q(t_B) = q_B$. Per il principio di minima azione, un sistema descrivibile da una lagrangiana come in (A.1) ha la dinamica governata da un sistema di equazioni dette equazioni di Eulero-Lagrange ottenute imponendo la stazionarietà di (A.3) (Figura A.1).

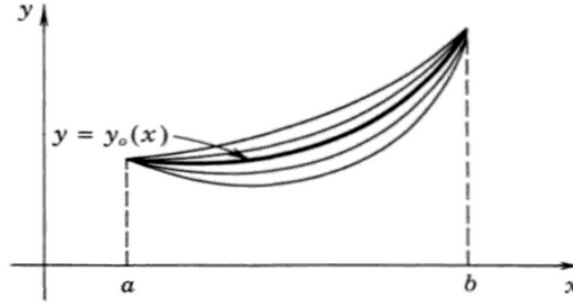


Figura A.1. Esempio di applicazione del principio di minima azione: la curva che soddisfa una condizione di minimo per (A.3) di un generico funzionale S è in questo caso $y_0(x)$. [15]

Nel calcolo delle variazioni, si è tipicamente interessati a ricercare una particolare $q^*(t)$ che minimizzi un funzionale nella forma (A.3): essa sarà un punto stazionario per l'azione. Supponendo vera questa proprietà per $q^*(t)$, allora per qualsiasi altra quantità $q^*(t) + \alpha\eta(t)$, $\alpha \in \mathbb{R}$ che soddisfi le condizioni al bordo, dovrà essere soddisfatta la relazione

$$S[q^*] \leq S[q^* + \alpha\eta], \quad (\text{A.4})$$

dove si è posto come già precedentemente fatto $q^*(t) + \alpha\eta(t) = q^* + \alpha\eta$. Il funzionale $S[q^* + \alpha\eta]$ avrà un minimo per $\alpha = 0$, quindi

$$\frac{d}{d\alpha} S[q^* + \alpha\eta]_{\alpha=0} = 0. \quad (\text{A.5})$$

La condizione appena ottenuta è applicabile alla (A.3), ottenendo la forma

$$\frac{d}{d\alpha} \int_{t_A}^{t_B} L(q^* + \alpha\eta, \dot{q}^* + \alpha\dot{\eta}, t) dt_{\alpha=0} = 0; \quad (\text{A.6})$$

a seguito dell'applicazione della regola di integrazione per parti e dell'imposizione delle condizioni al bordo $\eta(t_A) = \eta(t_B) = 0$, si giunge alla forma

$$\int_{t_A}^{t_B} \left(\frac{\partial L}{\partial q^*} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^*} \right) \eta dt = 0, \quad (\text{A.7})$$

valida per ogni $\eta(t)$ che soddisfi le condizioni al bordo precedentemente enunciate. Generalizzando, dalla (A.7) seguono le equazioni di di Eulero-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0. \quad (\text{A.8})$$

Le equazioni del moto per un sistema fisico possono essere ricavate da essa. La funzione lagrangiana, in meccanica classica, è data dalla differenza tra l'energia cinetica T e l'energia potenziale V di un sistema, quindi è esprimibile come $L = T - V$.

In meccanica lagrangiana si definisce energia di un sistema la quantità

$$E = p\dot{q} - L; \quad (\text{A.9})$$

in generale, tutte le quantità presenti nella (A.9) sono dipendenti dal tempo. In particolare però, se L è indipendente dal tempo, quindi $L = L(q, \dot{q})$, allora la quantità E rimane costante lungo ogni traiettoria del moto; un sistema dinamico con questa proprietà prende il nome di sistema hamiltoniano e, dal punto di vista fisico, obbedisce a un qualche principio di conservazione dell'energia. La relazione (A.9) corrisponde quindi, graficamente, a delle curve di livello nel piano delle fasi, come rappresentato in Figura A.2.

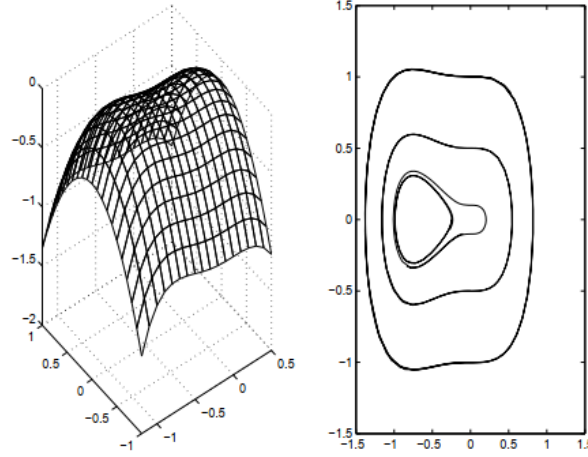


Figura A.2. Esempio di sistema hamiltoniano e relativa rappresentazione delle curve di livello nel piano delle fasi.[3]

È possibile ad esprimere la (A.9) in funzione di q, p in luogo di q, \dot{q} : utilizzando la relazione (A.2) si ricava per inversione (quando possibile) una funzione $\dot{q} = f(q, p)$, che consente di scrivere

$$H(q, p) = pf(q, p) - L(q, f(q, p)). \quad (\text{A.10})$$

La funzione $H : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}, n \geq 1$ è detta funzione di Hamilton o hamiltoniana del sistema. Da un confronto tra (A.9) e (A.10) segue $E = H$, quindi è possibile identificare l'energia di un sistema hamiltoniano con la sua hamiltoniana. L'importanza e l'utilità di poter lavorare con la funzione H in luogo di L risiede principalmente nella possibilità di esprimere le equazioni del moto nella forma

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

Le equazioni (A.9) sono dette equazioni di Hamilton: se L non dipende esplicitamente dal tempo, calcolando la quantità $\frac{dH}{dt}$, infatti, si ottiene che

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = 0. \quad (\text{A.12})$$

Appendice B

Proprietà degli operatori in meccanica quantistica

B.1 Introduzione

Una rigorosa formulazione matematica della meccanica quantistica si basa principalmente sulla teoria degli operatori e risale alla prima metà del '900. Essa si deve a numerosi studiosi che contribuirono negli anni alla sua creazione ed approfondimento. In tale contesto, gli spazi di Hilbert costituiscono l'ambientazione tipica di uno stato fisico. È noto dalle proprietà dell'analisi funzionale che ogni vettore in uno spazio di Hilbert può essere decomposto come combinazione lineare di vettori. In particolare nella meccanica quantistica ad ogni grandezza, detta anche osservabile, si associa una base ortonormale di vettori in uno spazio di Hilbert.

B.2 Proprietà fondamentali

Si suppone che sia assegnato uno spazio di Hilbert H e un'applicazione $A : H \rightarrow H$. A si dice operatore lineare se, per ogni $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ e per ogni vettore \mathbf{s}, \mathbf{t} , soddisfa le usuali proprietà di linearità [11]

$$A(\lambda \mathbf{s} + \mu \mathbf{t}) = \lambda A\mathbf{s} + \mu A\mathbf{t}. \quad (\text{B.1})$$

Si definisce operatore aggiunto di A , l'operatore $A^\dagger : H \rightarrow H$ tale che [18] $(A\mathbf{s}, \mathbf{t}) = (\mathbf{s}, A\mathbf{t})$, dove (\cdot, \cdot) indica il prodotto scalare in H . Inoltre, per ogni coppia di operatori lineari A, B valgono le relazioni di coniugio [11]

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger, \quad (\text{B.2})$$

$$(A^\dagger)^\dagger = A. \quad (\text{B.3})$$

Un operatore A si dice hermitiano o autoaggiunto se

$$A = A^\dagger. \quad (\text{B.4})$$

Si dice che $\lambda \in \mathbb{C}$ è un autovalore dell'operatore A se esiste un vettore $\mathbf{s} \neq \mathbf{0}$ tale che

$$A\lambda = \lambda\mathbf{s} \quad (\text{B.5})$$

In questo contesto è di frequente utilizzo la rappresentazione bra-ket, per motivi di praticità nella scrittura. La (B.5) può essere riscritta nella forma bra-ket come

$$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle, \quad (\text{B.6})$$

in questo caso $|\lambda\rangle$ è un "ket" (mentre $\langle\lambda|$ sarebbe stato un "bra"). Spesso nella rappresentazione bra-ket si fa uso dello stesso simbolo per autovalore ed autovettore, per cui la (B.6) può essere riscritta anche come $A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$, $|\lambda\rangle$ è in tal caso l'autovettore relativo all'autovalore λ . L'equazione agli autovalori (B.5) (o (B.6)) si risolve tramite l'usuale calcolo di $\det(A - \lambda I) = 0$. A seguito del calcolo di tali autovalori si può procedere ad associarne i relativi autovettori.

Alcune proprietà fondamentali della formulazione matematica in meccanica quantistica si formalizzano con i seguenti postulati:

Postulato 1 (di sovrapposizione). *Lo stato di un sistema quantistico è descritto in ogni istante di tempo da un vettore $|\psi\rangle$, chiamato ket, appartenente ad H . Sia A una grandezza fisica e ψ_1, ψ_2 i due ket che corrispondono a due stati a_1, a_2 di A ; allora se ψ si può esprimere come combinazione lineare di ψ_1, ψ_2 , la misura di A potrà fornire come risultato a_1, a_2 . Vale anche il viceversa. Il principio si generalizza al caso di $n > 2$ stati. [12]*

Postulato 2 (sulle osservabili). *Le grandezze fisiche o osservabili di un sistema fisico sono descritte da operatori hermitiani in spazi di Hilbert degli stati. I possibili risultati della misura di una grandezza fisica sono i suoi autovalori. [12]*

Postulato 3 (sugli autovettori). *Gli autovettori di un operatore hermitiano A corrispondono a stati fisici in cui A ha un valore definito, coincidente con il relativo autovalore corrispondente all'autovettore dato. [12]*

Da ciò segue che se λ è un autovalore di A e $|\lambda\rangle$ l'autovettore relativo, allora anche $c|\lambda\rangle, c \in \mathbb{R}$ sarà autovettore di A relativo allo stesso autovalore. Supponendo che il sistema si trovi in uno stato descritto da un ket $|\psi\rangle$ allora una misura della grandezza A può fornire come risultato uno qualsiasi degli autovalori dell'operatore A ad esempio (a_1, a_2, \dots) . Per il postulato (o principio) di sovrapposizione, $|\psi\rangle$ si può rappresentare come combinazione lineare dei ket relativi a stati in cui A si decompone, cioè dei suoi autovettori. Quindi per ogni $|\psi\rangle$, esistono scalari $c_n \in \mathbb{R}, n \geq 0$ tali che

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n |\lambda_n\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Se nella (B.7) si moltiplica per un generico $\langle \lambda_k |$ si ottiene $c_k = \langle \lambda_k | \psi \rangle$; sostituendo l'espressione appena ottenuta nella precedente si ottiene infine [12]

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n | \psi \rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} (|\lambda_n\rangle \langle \lambda_n |) |\psi\rangle \implies \sum_{n=0}^{+\infty} |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n | = 1. \quad (\text{B.8})$$

B.3 Regole di calcolo

Si definisce commutatore tra due operatori A, B

$$[A, B] = AB - BA. \quad (\text{B.9})$$

Due operatori A, B commutano se $[A, B] = 0$, da ciò segue che $AB = BA$. Si definisce anticommutatore tra due operatori A, B

$$\{A, B\} = AB + BA. \quad (\text{B.10})$$

Nella rappresentazione della coordinate e nel caso unidimensionale, si definisce operatore posizione \hat{x} l'operatore, che, applicato a un generico $|x\rangle$ fornisce il valore x . Esso è quindi tale che

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle; \quad (\text{B.11})$$

si definisce l'operatore impulso (o quantità di moto) \hat{p}_x l'operatore

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{d\hat{x}}, \quad (\text{B.12})$$

l'operatore impulso è tale che

$$\hat{p}_x |p\rangle = p |p\rangle. \quad (\text{B.13})$$

Si verifica con semplici passaggi algebrici ed utilizzando (B.9) che per ogni ψ

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = (\hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x}) \psi = \hat{x} (-i\hbar \frac{d}{d\hat{x}}) \psi - (-i\hbar \frac{d}{d\hat{x}}) \hat{x} \psi = i\hbar \psi, \quad (\text{B.14})$$

quindi il commutatore tra \hat{x}, \hat{p}_x è $i\hbar$.

Appendice C

Principali codici utilizzati (MATLAB, R)

C.1 *main.m*

```
clear all
close all

Nmin = 2;
Nmax = 2;
Nmin_error = Nmin;
epsmin = 0;
epsmax = 2;
epsstep = 200;
deltaeps = (epsmax-epsmin)/epsstep;
h_max = 41; %eps = delta_eps*(h_max-1)
h_max_2 = (h_max-1)/2+1;
h_max_4 = (h_max-1)/4+1;

tol = 1e-13;

autoval = zeros(4*Nmax,Nmax,3);
p = 1; %plot = true

autovalori(Nmin, Nmax,epsmin,epsmax,deltaeps, ...
    epsstep,h_max,h_max_2,h_max_4:autoval,p);

Nmin = 2;
Nmax = 500;
Nautoval = 8;
Neps = 3;
p = 0; %plot = false
Nconvmax = 150; %arbitrariamente

autoval = zeros(4*Nmax,Nmax,3);
ordine_convergenza = zeros(Nautoval,Nconvmax,Neps);
```

```

err = zeros(Nautoval,Nconvmax,Neps);

[autoval,J] = autovalori(Nmin, Nmax,epsmin,epsmax,deltaeps, ...
    epsstep,h_max,h_max_2,h_max_4,autoval,p);

for l=1:Neps
    for k=1:Nautoval
        for j=2:Nconvmax
            err(k,j,l) = abs(autoval(k,j,l)-autoval(k,Nmax,l));
        end
    end
end

n = [1:1:6];
for l=1:Neps
    fprintf("\n-----\nEpsilon = %.2f\n"...
        ,deltaeps.*(h_max-1)/(2.^(l-1)));
    for k=1:Nautoval
        fprintf("\nAutovalore numero " + k + " \n");
        for j=2.^n
            scala = [j 2*j];
            if err(k,2*j,l)>=tol
                p = polyfit(log(scala),log(err(k,scala,l)),1);
                fprintf("Rapporto incrementale tra N = %.2d, N = %.2d: ",j,2*j);
                fprintf("ordine di convergenza %.2f\n",-p(1));
            end
        end
        for j=2:Nconvmax
            if err(k,j,l)<tol
                fprintf("Convergenza raggiunta per N = %.2f\n",j);
                break;
            end
        end
    end
end

x=linspace(1,Nconvmax,Nconvmax);
for l=1:Neps
    figure
    for i=1:Nautoval
        ix=(err(i,:,l)>1e-13);
        loglog(x(ix),err(i,ix,l),'.-')
        hold on
        xlim([Nmin_error Nmax])
        xlabel('N')
        ylabel("errore")
    end
    legend({'Autovalore 1','Autovalore 2','Autovalore 3','Autovalore 4', ...
        'Autovalore 5','Autovalore 6','Autovalore 7','Autovalore 8'},'Location','best');
end

l=1;
figure

```

```

ix=(err(Nautoval, :,1)>1e-13);
plot(x(ix),autoval(Nautoval,ix,1),'*r');
yline(autoval(Nautoval,end,1),'-','valore esatto');
hold on;
ylim([autoval(Nautoval,end,1)-0.05 max(autoval(Nautoval,ix,1))]);
xlabel('N');
ylabel("autovalore 8");

```

C.2 *autovalori.m*

```

function [autoval,J] = autovalori(Nmin,Nmax,eps_min,eps_max,delta_eps, ...
    eps_step,h_max,h_max_2,h_max_4,autoval,p)
if p == 0
    for N=Nmin:Nmax
        N %per tenere conto delle iterazioni
        e=0;
        nmax = N;
        MM = nmax;
        J=zeros(eps_step,4,N);
        for eps=eps_min:delta_eps:eps_max
            e=e+1;
            for m=0:3
                index=(0+m):4:(4*nmax)+m;
                im = m+1;
                r = index + 1/2+(eps/4)*(1+index+index.^2);
                p = (eps/8)*sqrt((index+1).*(index+2).*(index+3).*(index+4));
                M = zeros(size(p,2)+1,size(p,2)+1);
                M = spdiags(-p',-1,MM,MM);
                M = M+M';
                M = M+spdiags(r',0,MM,MM);
                M_eig=eig(M);
                J(e,im,1:N) = M_eig(1:N);
            end
        end
        temp1=[];

        for l=1:size(J,3)
            temp1 = [temp1 J(h_max,:,l)];
        end
        autoval(1:4*size(J,3),size(J,3),1) = temp1;

        temp2=[];
        for l=1:size(J,3)
            temp2 = [temp2 J(h_max_2,:,l)];
        end
        autoval(1:4*size(J,3),size(J,3),2) = temp2;

        temp3=[];
        for l=1:size(J,3)

```

```

        temp3 = [temp3 J(h_max_4,:,1)];
    end
    autoval(1:4*size(J,3),size(J,3),3) = temp3;
end
else
    for N=Nmax:Nmax
        N %per tenere conto delle iterazioni
        e=0;
        nmax = 500;
        MM = nmax+1;
        J=zeros(eps_step,4,N);
        for eps=eps_min:delta_eps:eps_max
            e=e+1;
            for m=0:3
                index=(0+m):4:(4*nmax)+m;
                im = m+1;
                r = index + 1/2+(eps/4)*(1+index+index.^2);
                p = (eps/8)*sqrt((index+1).*(index+2).*(index+3).*(index+4));
                M = zeros(size(p,2)+1,size(p,2)+1);
                M = spdiags(-p',-1,MM,MM);
                M = M+M';
                M = M+spdiags(r',0,MM,MM);
                M_eig=eig(M);
                J(e,im,1:N) = M_eig(1:N);
                xlim([0 eps_max])
                xlabel('\epsilon')
                ylabel('autovalori J')
                for n=1:N
                    if m==0
                        plot(eps,M_eig(n),'b. ');
                    end
                    if m==1
                        plot(eps,M_eig(n),'g. ');
                    end
                    if m==2
                        plot(eps,M_eig(n),'m. ');
                    end
                    if m==3
                        plot(eps,M_eig(n),'r. ');
                    end
                end
                hold on
            end
        end
        hold on
    end
end
figure
for index_i=1:201
    for index_j=1:4
        for index_k=1:2
            a=eps_max/eps_step*index_i;
            c=J(index_i,index_j,index_k);
            sol1 = (-1-sqrt(1-4*(a/2)*(-c)))/a;

```



```
sol2 = (-1+sqrt(1-4*(a/2)*(-c)))/a;
sol = [sol1 sol2];
xlabel('\epsilon')
ylabel('autovalori H_B')
for n=1:N
    if index_j==1
        plot(a,sol,'b. ');
    end
    if index_j==2
        plot(a,sol,'g. ');
    end
    if index_j==3
        plot(a,sol,'m. ');
    end
    if index_j==4
        plot(a,sol,'r. ');
    end
    hold on
end
end
end
end
ylim([-20 20])
xlim([0 2])
end
end
```

C.3 *regressione.r*

```
setwd("C:\\Users\\Stefano\\Dropbox\\Tesi")
autoval <- read.table("autoval.txt", col.names = c("Nautoval", "epsilon", "Nconv"))

attach(autoval)

plot(Nautoval, Nconv, type = "n")
points(Nautoval[epsilon=="0.1"], Nconv[epsilon=="0.1"], pch=16)
points(Nautoval[epsilon=="0.2"], Nconv[epsilon=="0.2"], pch=16, col=2)
points(Nautoval[epsilon=="0.4"], Nconv[epsilon=="0.4"], pch=16, col=4)

legend(x=9,y=7,c("0.1", "0.2", "0.4"), col = c(1,2,3), pch=c(16,17,18),
      bty="n", y.intersp = 0.8)
title("Scatter plot - andamento di Nconv in funzione di Nautoval")

Nconv01 <- Nconv[epsilon=="0.1"]
Nautoval01 <- Nautoval[epsilon=="0.1"]
Nconv02 <- Nconv[epsilon=="0.2"]
Nautoval02 <- Nautoval[epsilon=="0.2"]
Nconv04 <- Nconv[epsilon=="0.4"]
Nautoval04 <- Nautoval[epsilon=="0.4"]

regr01 <- lm(Nconv01 ~ Nautoval01)
summary(regr01)
```

```
regr02 <- lm(Nconv02 ~ Nautoval02)
summary(regr02)
regr04 <- lm(Nconv04 ~ Nautoval04)
summary(regr04)

plot(Nautoval, Nconv, type = "n")
points(Nautoval[epsilon=="0.1"], Nconv[epsilon=="0.1"], pch=16)
points(Nautoval[epsilon=="0.2"], Nconv[epsilon=="0.2"], pch=16, col=2)
points(Nautoval[epsilon=="0.4"], Nconv[epsilon=="0.4"], pch=16, col=4)
abline(regr01$coef)
abline(regr02$coef, col = 2)
abline(regr04$coef, col = 4)
title("Rette di regressione - andamento di Nconv in funzione di Nautoval")

confint(regr01)
Lower_bounds01=confint(regr01)[,1]
Upper_bounds01=confint(regr01)[,2]
confint(regr02)
Lower_bounds02=confint(regr02)[,1]
Upper_bounds02=confint(regr02)[,2]
confint(regr04)
Lower_bounds04=confint(regr04)[,1]
Upper_bounds04=confint(regr04)[,2]
abline(Lower_bounds01, col="black", lwd=3, lty=2)
abline(Upper_bounds01, col="black", lwd=3, lty=2)
abline(Lower_bounds02, col="red", lwd=3, lty=2)
abline(Upper_bounds02, col="red", lwd=3, lty=2)
abline(Lower_bounds04, col="blue", lwd=3, lty=2)
abline(Upper_bounds04, col="blue", lwd=3, lty=2)

summary(regr01)$r.squared
summary(regr02)$r.squared
summary(regr04)$r.squared

res01 <- regr01$resid
res02 <- regr02$resid
res04 <- regr04$resid

par(mfrow = c(1,3))
plot(Nconv01, res01)
abline(h=0)
plot(Nconv02, res02)
abline(h=0)
plot(Nconv04, res04)
abline(h=0)

par(mfrow=c(1,1))

pred = predict(regr01,newdata=data.frame(Nautoval01=16, epsilon=0.1),interval=
"prediction",level=0.95)
pred
pred = predict(regr02,newdata=data.frame(Nautoval02=16, epsilon=0.2),interval=
```

```
      "prediction",level=0.95)
pred
pred = predict(regr04,newdata=data.frame(Nautoval04=16, epsilon=0.4),interval=
      "prediction",level=0.95)
pred

plot(epsilon, Nconv, ylim = c(0, 35), type = "n")
points(epsilon[Nautoval=="1"], Nconv[Nautoval=="1"], pch=16)
points(epsilon[Nautoval=="2"], Nconv[Nautoval=="2"], pch=16, col=2)
points(epsilon[Nautoval=="3"], Nconv[Nautoval=="3"], pch=16, col=3)
points(epsilon[Nautoval=="4"], Nconv[Nautoval=="4"], pch=16, col=4)
points(epsilon[Nautoval=="5"], Nconv[Nautoval=="5"], pch=16, col=5)
points(epsilon[Nautoval=="6"], Nconv[Nautoval=="6"], pch=16, col=6)
points(epsilon[Nautoval=="7"], Nconv[Nautoval=="7"], pch=16, col=7)
points(epsilon[Nautoval=="8"], Nconv[Nautoval=="8"], pch=16, col=8)

regreps = lm(Nconv ~ epsilon)
summary(regreps)
abline(regreps$coef)
title("Retta di regressione - andamento di Nconv in funzione di epsilon")
confint(regreps)
Lower_bounds=confint(regreps)[,1]
Upper_bounds=confint(regreps)[,2]
abline(Lower_bounds, col="black", lwd=3, lty=2)
abline(Upper_bounds, col="black", lwd=3, lty=2)

summary(regreps)$r.squared

res <- regreps$resid

plot(epsilon, res)
abline(h=0)

pred = predict(regreps,newdata=data.frame(Nautoval='1',epsilon=0.3),interval=
      "prediction",level=0.95)
pred
pred = predict(regreps,newdata=data.frame(Nautoval='1',epsilon=0.6),interval=
      "prediction",level=0.95)
pred
```


Bibliografia

- [1] Y. F. Alam and A. Behne. Review of born-infeld electrodynamics, 2021.
- [2] P. N. Argyres. The bohr-sommerfeld quantization rule and the weyl correspondence. *Physics Physique Fizika*, 2:131–139, Nov 1965.
- [3] A. Bacciotti. *Analisi della stabilità*.
- [4] Max Born. On the quantum theory of the electromagnetic field. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1934.
- [5] Max Born and Leopold Infeld. Foundations of the new field theory. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1934.
- [6] G. Cicogna. *Metodi matematici della Fisica*. UNITEXT. Springer Milan, 2008.
- [7] P. A. M. Dirac. A reformulation of the born-infeld electrodynamics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 257(1288):32–43, 1960.
- [8] Griffiths DJ. *Introduction to Quantum Mechanics*, pages 31–41. Prentice Hall, New Jersey, 1995.
- [9] G. Coppa. Appunti su Born-Infeld.
- [10] M. Gasparini. *Modelli probabilistici e statistici con temi d'esame*, pages 99–102.
- [11] G. Nardulli. *Meccanica quantistica I*, pages 73–81. 2001.
- [12] G. Nardulli. *Meccanica quantistica I*, pages 87–92. 2001.
- [13] E. Onofri and C. Destri. *Istituzioni di fisica teorica*. Carocci, 1996.
- [14] W.N Polyzou. Nonperturbative method for treating square root operators in relativistic quantum theories. *Journal of Computational Physics*, 70(1):117–137, 1987.
- [15] H. Sagan. *Introduction to the Calculus of Variations*. Dover books on advanced mathematics. Dover Publications, 1992.

- [16] Dmitri P. Sorokin. Introductory notes on non-linear electrodynamics and its applications. *Fortschritte der Physik*, 70(7-8):2200092, jul 2022.
- [17] Giovanni Tonzing. *Fondamenti di meccanica classica*.
- [18] Treccani. Enciclopedia della matematica (2013).
- [19] Michael Vogl, Pontus Laurell, Hao Zhang, Satoshi Okamoto, and Gregory A. Fiete. Resummation of the holstein-primakoff expansion and differential equation approach to operator square roots. *Phys. Rev. Research*, 2:043243, Nov 2020.
- [20] Wikipedia. Moto armonico — wikipedia, l'enciclopedia libera, 2022. [Online; in data 4-novembre-2022].
- [21] Wikipedia contributors. Born–infeld model — Wikipedia, the free encyclopedia, 2022. [Online; accessed 4-November-2022].
- [22] www.scienzafisica.it. Il campo elettrico.