

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za matematiko in fiziko



VRM  
**Tretja naloga**

**Andrej Kolar - Požun**

14. 3. 2019

Obravnavamo klasični Hamiltonjan anharmonskega oscilatorja v dveh dimenzijah:

$$H = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}q_2^2 + \lambda q_1^2 q_2^2.$$

Hamiltonove enačbe napišemo s pomočjo Poissonovega oklepaja kot

$$\dot{x} = \{x, H(x)\}.$$

Iz česar sledi:

$$x(t) = \hat{U}(t)x(0).$$

kjer smo uvedli unitarni Liouvillov operator  $\hat{U} = \exp(t\{., H\})$ . Delovanje kinetičnega in potencialnega dela Liouvilliana na  $x$  poznamo:

$$\begin{aligned}\exp(\tau\{., T\})(q, p) &= \left(q + \frac{\partial T}{\partial p}\tau, p\right), \\ \exp(\tau\{., V\})(q, p) &= \left(q, p - \frac{\partial V}{\partial q}\tau\right).\end{aligned}$$

Glavno vprašanje je torej, kako operator  $\exp(\tau\{., T + V\})$  izrazimo z zgornjima operatorja. Pri tem si pomagamo s Trotter - Suzukijevimi razcepami:

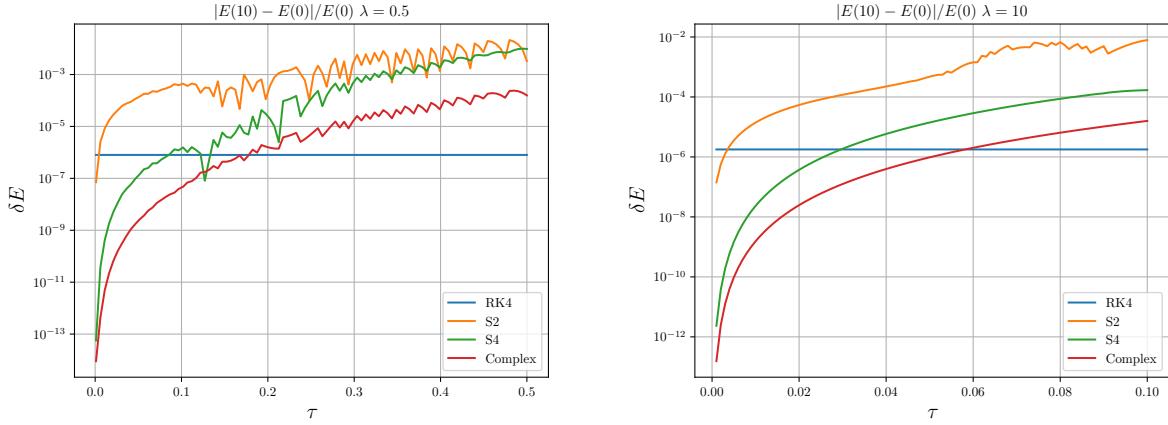
$$\begin{aligned}e^{z(A+B)} &= S_n(z) + \mathcal{O}(z^{n+1}), \\ S_2(z) &= \exp\left(\frac{z}{2}A\right) \exp(zB) \exp\left(\frac{z}{2}A\right), \\ S_4(z) &= S_2(x_1 z) S_2(x_0 z) S_2(x_1 z), \\ x_0 &= -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \\ S_3(z) &= e^{zp_1 A} e^{zp_2 B} e^{zp_3 A} e^{zp_4 B} e^{zp_5 A}, \\ p_1 = \bar{p}_5 &= 0.25(1 + i/\sqrt{3}), p_2 = \bar{p}_4 = 2p_1, p_3 = 0.5, \\ \exp(2z(A+B)) &= S_3(z)\bar{S}_3(z) + \mathcal{O}(z^5),\end{aligned}$$

Razcepi s kompleksnimi koeficienti so sicer zelo prikladni za disipativne sisteme, a jih bom preizkusil tudi na našem konzervativnem problemu.  $\bar{S}_3$  je definiran kot  $S_3$  s tem, da so koeficienti  $p_i$  kompleksno konjugirani.

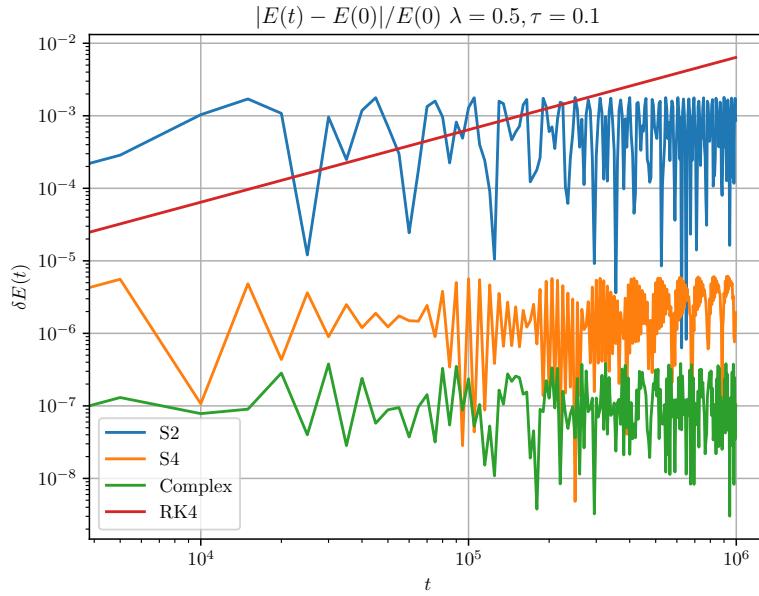
Jasno je v našem primeru  $z$  enak  $\tau$ .  $A$  in  $B$  pa kinetični in potencialni del Liouvillega operatorja.

## Prva naloga

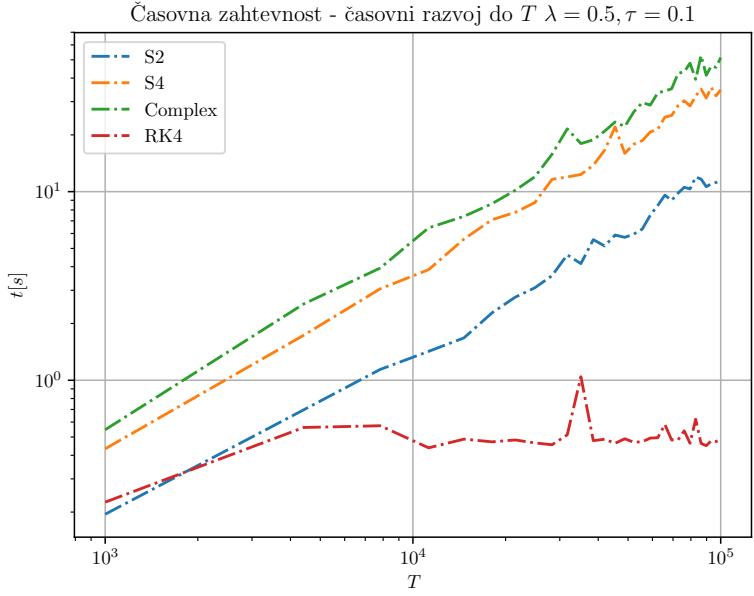
Obravnavamo klasični anharmonski oscilator v dveh dimenzijah. Za začetek si poglejmo, kako se zgornji razcepi obnašajo v odvisnosti od časovnega skoka  $\tau$ .



Prikazana je relativna napaka energije v odvisnosti od  $\tau$  za več integratorjev. Opazimo, da ima Runge-Kutta (s prilagodljivim korakom - metoda dopriš v `scipy`) za to izbiro parametrov ( $\lambda = 0.5, t = 10$ ) manjšo napako v primerjavi z simplekтиčnim integratorjem, če je  $\tau$  večji od pribl. 0.1. Hkrati opazimo, da se simplekтиčni integratorji obnašajo po pričakovanju - najbolj natančni so tisti, ki so najvišjega reda. Pričakovano je tudi napaka večja pri večjem  $\lambda$ . Čez  $\lambda = 10$  ne bom šel zato se v odvisnost od  $\lambda$  ne bom potrebneje spuščal. Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$

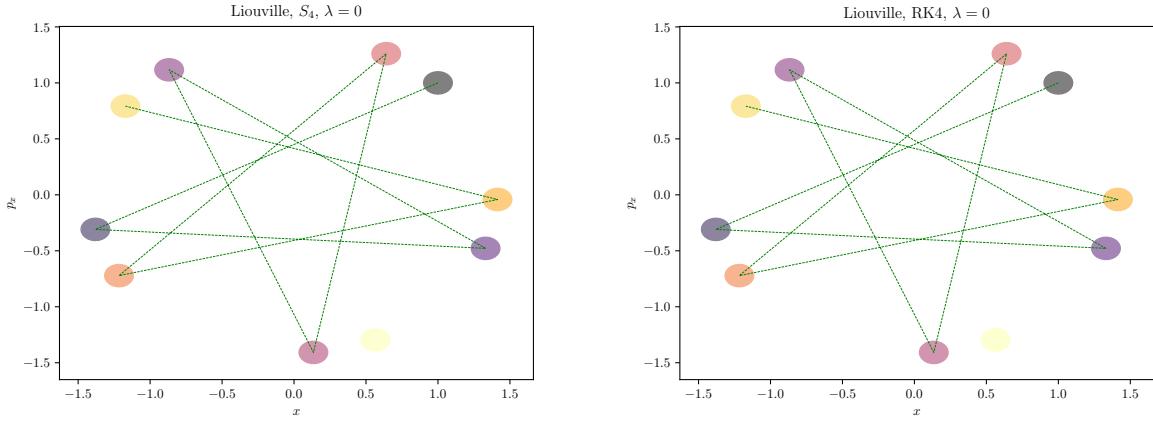


Pri večjih časih opazimo, zakaj so simplekтиčni integratorji v klasični mehaniki zares boljši od metode RK. Napaka le-teh je vselej približno konstantna, medtem ko pri Runge-Kutta integratorju ta s časom raste. Začetni pogoj simulacije je  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$

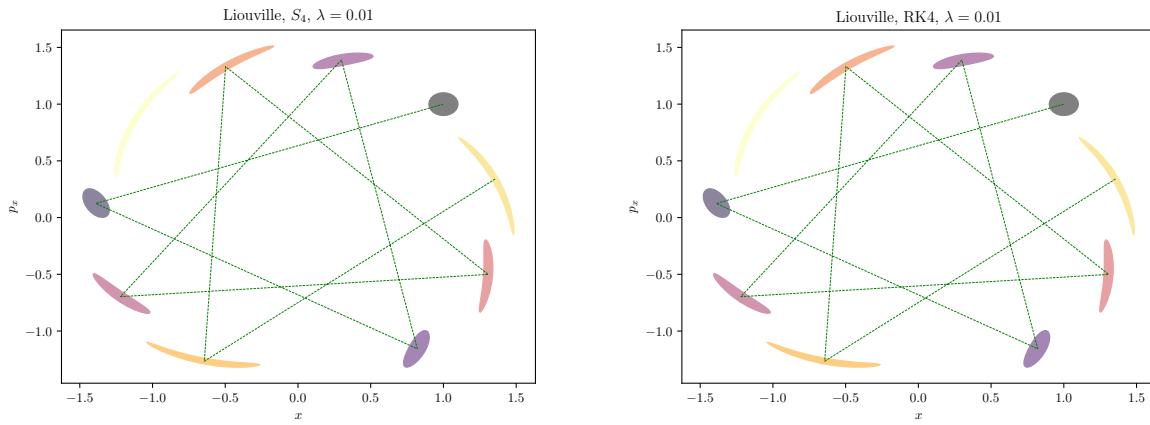


Primerjali smo še časovno zahtevnost naših metod. Na  $y$  osi je  $t$ , ki označuje (pravi) čas poganjanja algoritma na  $x$  osi pa  $T$  ki predstavlja simulacijo gibanja do časa  $T$ . RK4 je daleč najhitrejša, za simplektične metode pa so v limiti  $T \rightarrow \infty$  približno enakovredne, za majhne  $T$  pa opazimo razlike. Začetni pogoj simulacije je  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$

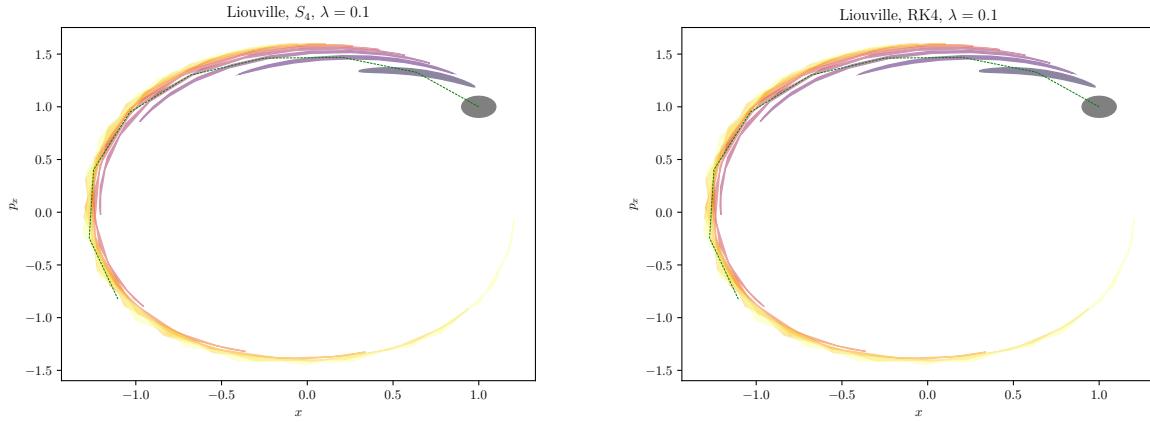
Poglejmo si še, kako je z (lokalno) ohranjenostjo faznega prostora (Liouvillov izrek). Primerjal bom metodi RK4 in  $S_4$ . Zaradi lažjega prikaza bom tukaj gledal enodimensionalni anharmonski oscilator  $H = 0.5 p^2 + 0.5 x^2 + \lambda x^4$ . Začnemo z 25 točkami na krožnici nekega radija s središčem v  $(1, 1)$  in jih razvijemo v času za eno časovno enoto. Spremljamo volumen novo nastalih likov, ki bi moral biti konstanten:



Začnemo z točkami na krožnici radija 0.1. Izgleda, da se v primeru  $\lambda = 0$  krogi zgolj translirajo pri obeh metodah (natančneje bomo volumne izračunali kasneje). Časovna razlika med zaporednima krogama je 10.

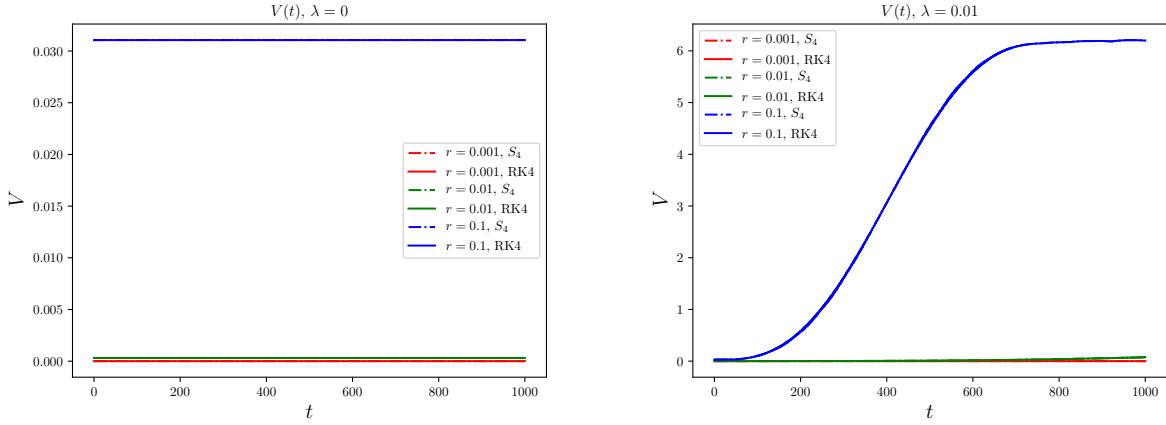


Že pri majhnem  $\lambda$  pa vidimo veliko razliko - oblika lika ni več krog ampak se vedno bolj deformira, ko razvijamo sistem v času.



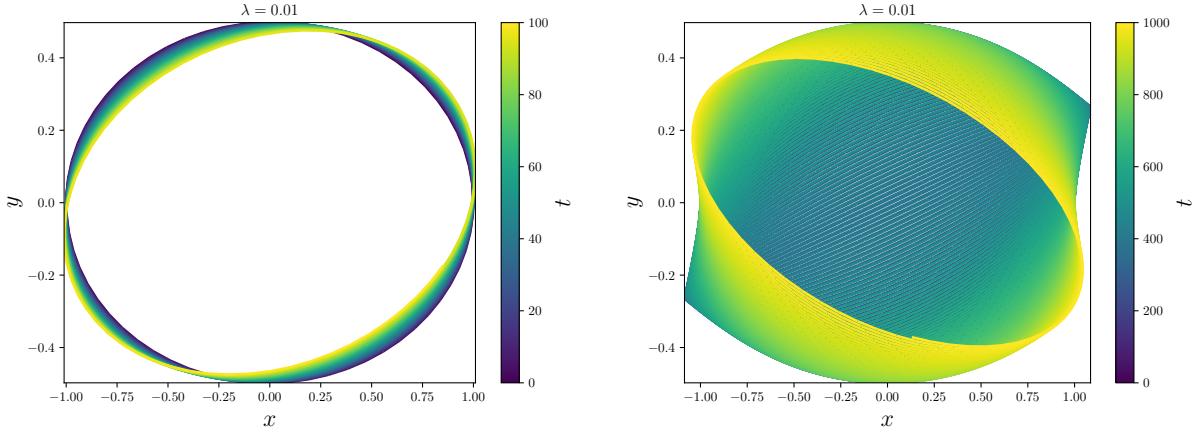
Povečanje  $\lambda$  krog še dodatno deformira.

Poglejmo še, kako je res z odvisnostjo volumna(ploščine) likov od časa:

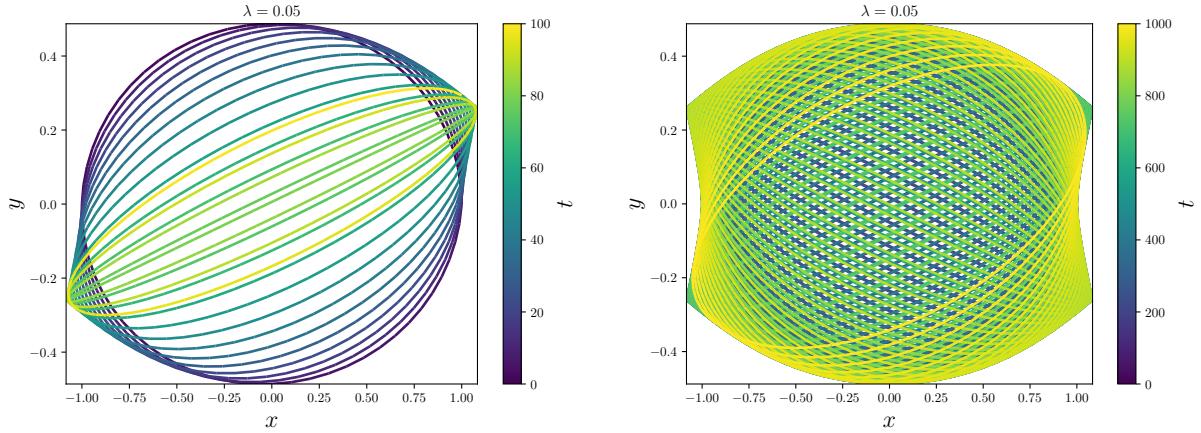


Tukaj imamo odvisnost volumna od časa za več različnih radijev začetnega kroga. Pri  $\lambda = 0$  se volumen res ohranja s časom. Pri  $\lambda = 0.01$  je to res le za majhne začetne kroge, saj imamo se v Liouvillovem izreku zares ohranja le infinitezimalen volumen.

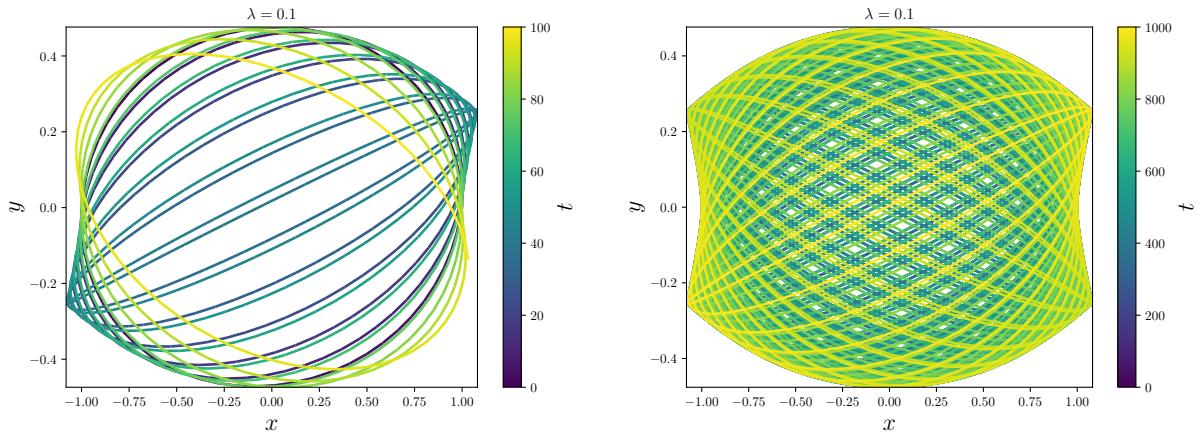
Očitno ima Runge-Kutta prednost v hitrosti in pod določenimi pogoji primerljivo natančnost z simplektičnimi integratorji in bi se v praksi morali nekako odločiti katero metodo je zdaj bolje uporabiti. Vendar pa je cilj naloge spoznati simplektične integratorje (in metodo RK4 že dobro poznamo), tako da bom od tu naprej uporabljal le še simplektične integratorje in sicer se bom odločil za  $S_4$  integrator. Poglejmo kako izgledajo tipične orbite pri  $\lambda \neq 0$ :



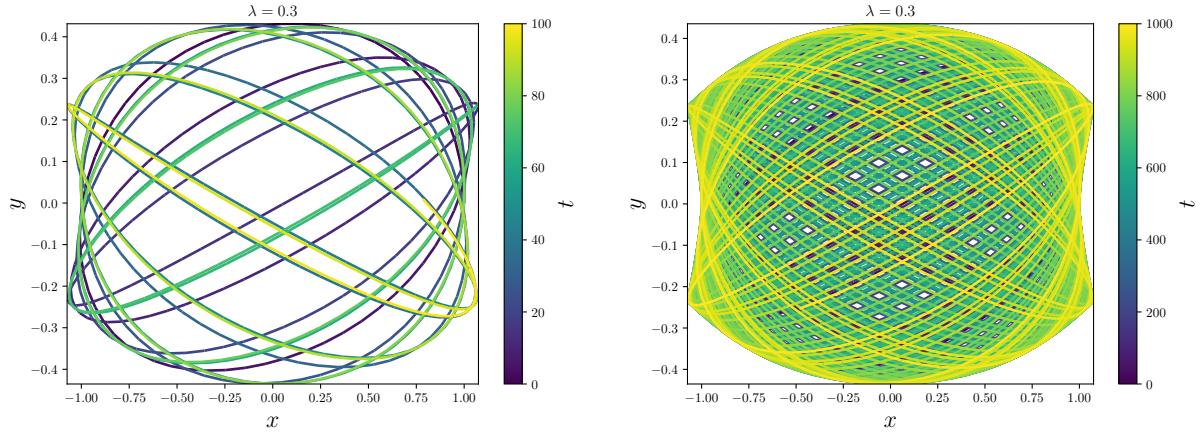
Že pri  $\lambda = 0.01$  najprej opazimo, da so trajektorije najprej blizu navadnega harmoničnega oscilatorja (kjer so krožnice), vendar hitro prekrijejo veliko večji del prostora. Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



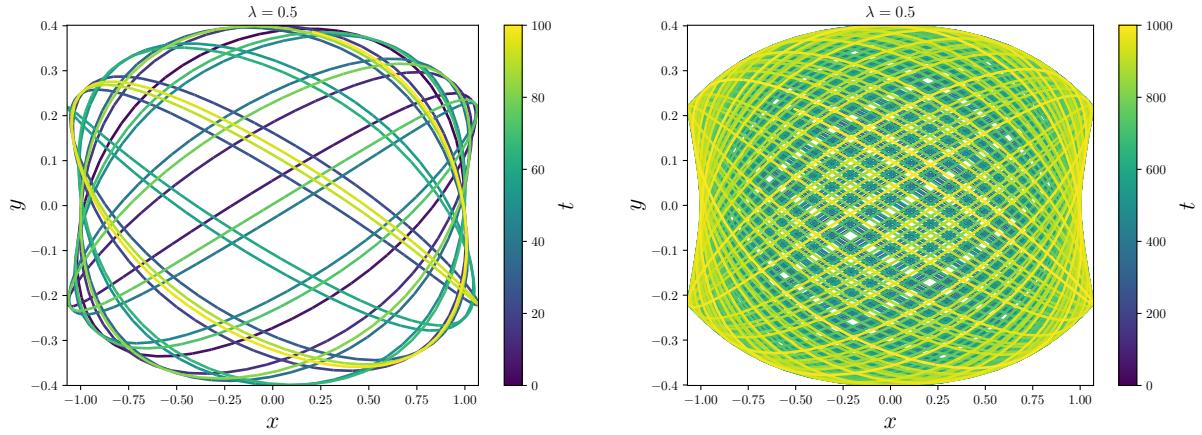
Ko  $\lambda$  malce povečamo se gibanje kar hitro začne močno razlikovati od nemotenega harmoničnega oscilatorja. Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



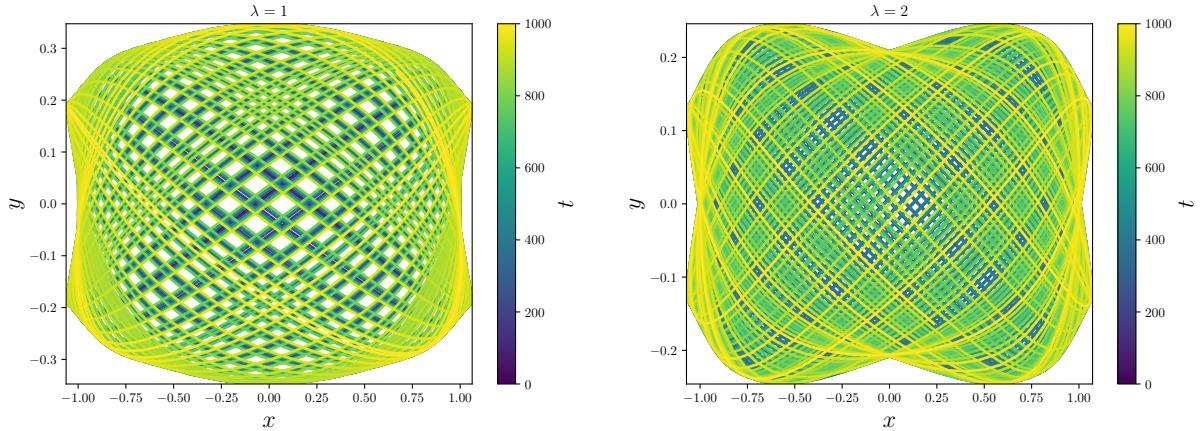
V primerjavi z dvakrat nižjim  $\lambda$  lahko tukaj na poteku do časa 100 že opazimo, kako se "eliptične trajektorije" počasi začnejo rotirati. Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



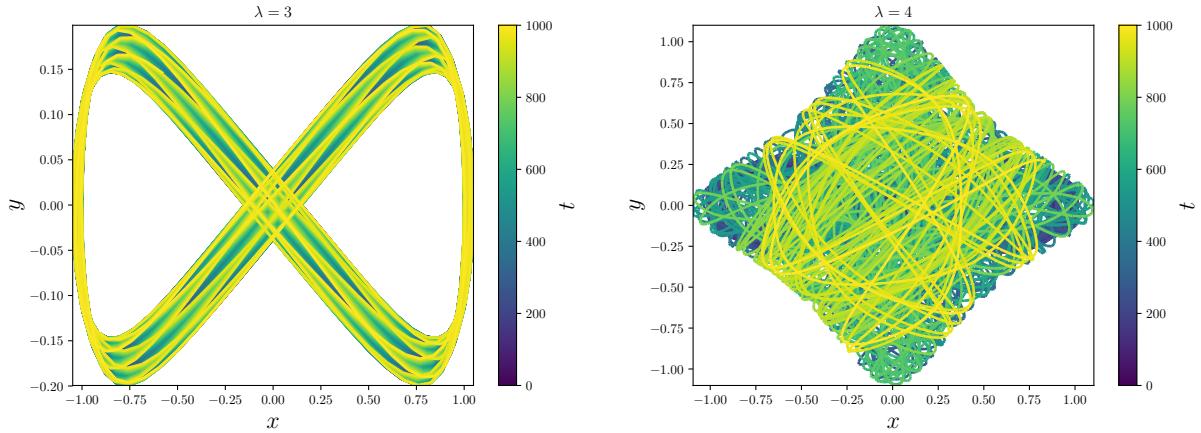
Še primer, ko je  $\lambda = 0.3$ . Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



Še primer, ko je  $\lambda = 0.5$ . Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



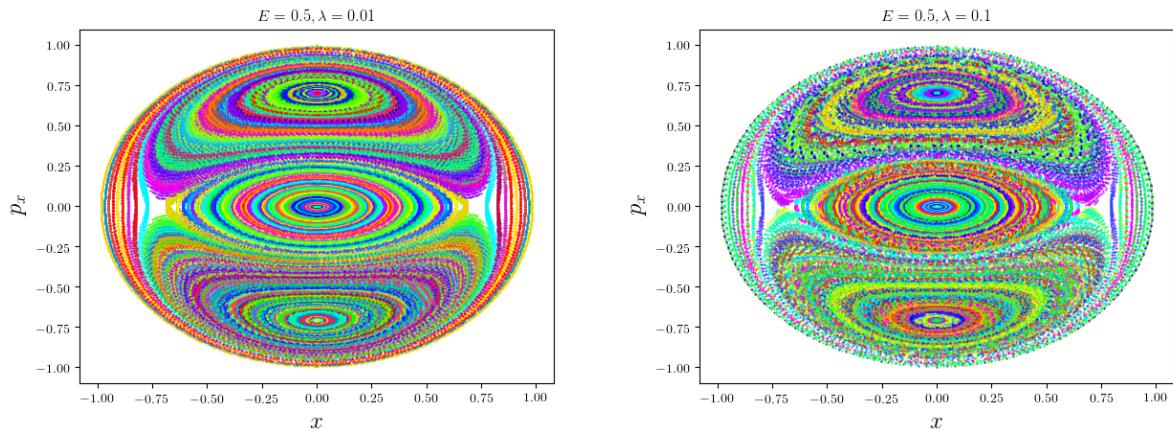
Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$



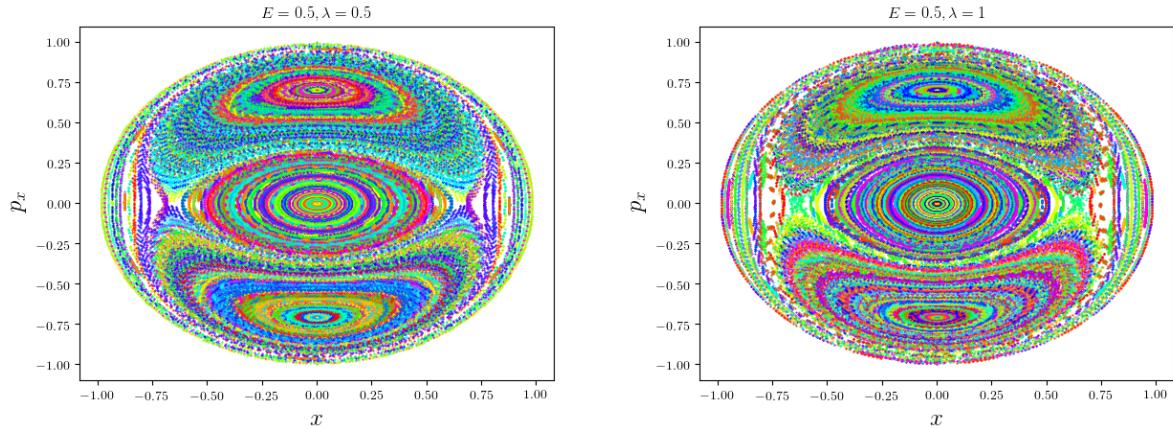
Pri  $\lambda = 3$  opazimo, da se je oblika trajektorij močno spremenila, pri  $\lambda = 4$  pa izgleda, da smo že v kaotičnem režimu. O točni  $\lambda_C$  pri kateri preidemo v kaos bomo povedali v nadaljevanju. Časovni potek je prikazan z barvo. Uporabili smo  $S_4$  razcep z  $\tau = 0.1$ . Začetni pogoj tukaj je bil  $(x, y, p_x, p_y) = (1, 0, 0, 0.5)$

Nekateri izmed zgornjih primerov so prikazani tudi na priloženi animaciji dinamika.mp4, prehod v kaos pa lahko natančneje opazujemo na animaciji kaos.mp4, s pomočjo animacije se zdi, da kaos nastopi pri približno  $\lambda = 3.85$ .

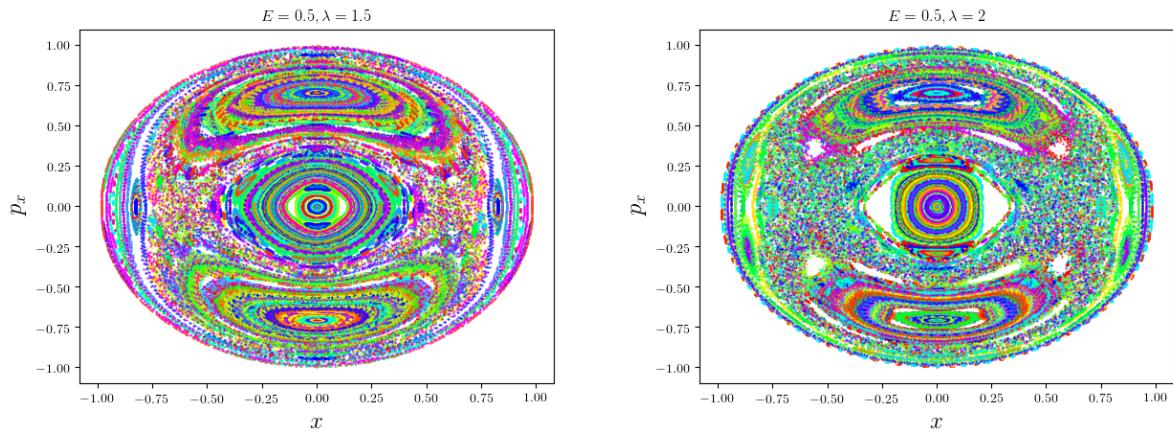
Za karakterizacijo globalnega kaosa je pripravneje gledati fazni portret na Poincarejevi sečni ploskvi. Poženemo algoritem za več začetnih pogojev pri neki energiji in gledamo, kdaj je izpolnjen pogoj  $y = 0, p_y > 0$ . Ko je, narišemo novo točko na graf  $(x, p_x)$ . Moji začeni pogoji so bili  $x_0 = y_0 = 0$ . Vrednosti  $p_{x_0}$  pa so bile izbrane na intervalu  $[-2E, 2E]$ , začetni  $p_y$  je potem določen z energijo s tem, da sem vedno vzel pozitivno predznačenega.



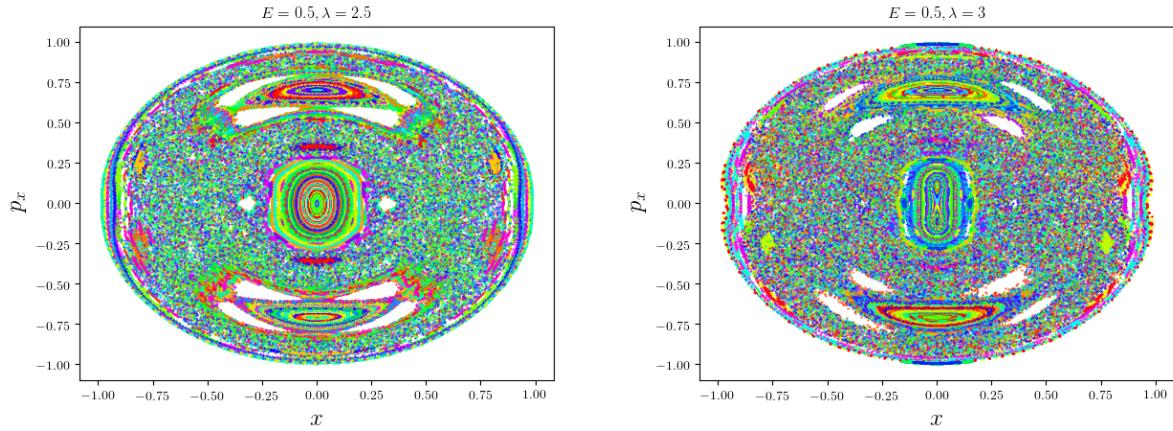
Pri  $\lambda = 0.01$  je fazni portret še zelo regularen in so vidni le stabilni torusi. Pri  $\lambda = 0.1$  že začnejo razpadati. Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.



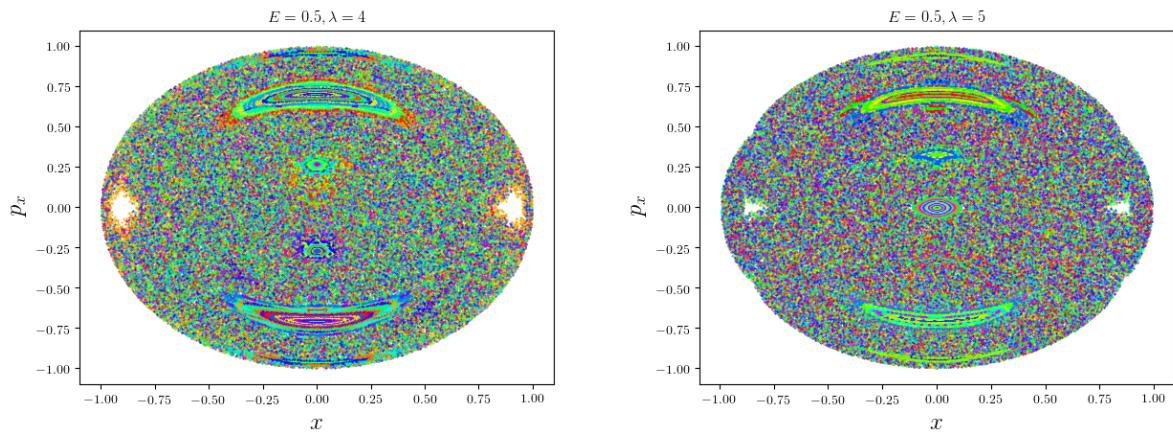
Pri  $\lambda = 1$  že zelo očitno vidimo, da območja med KAM torusi postajajo kaotična. Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.



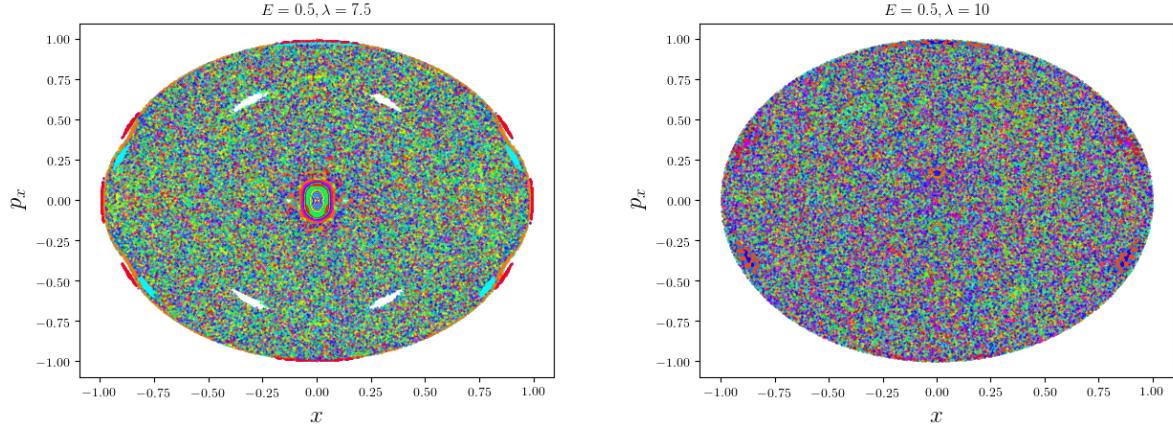
Kaotična območja se seveda z  $\lambda$  večajo. Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.



Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.



Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.



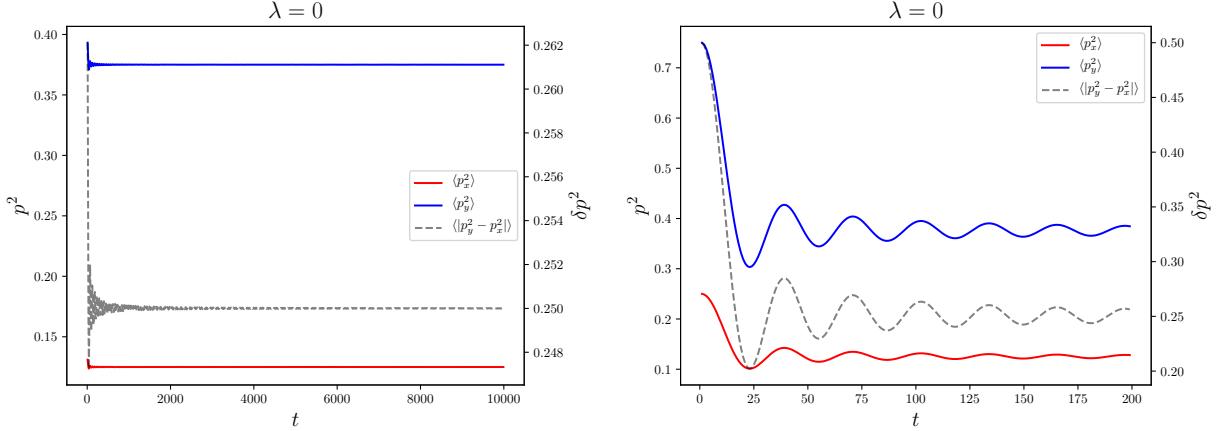
Nekje med  $\lambda = 7.5$  in  $\lambda = 10$  razpade še zadnji torus in imamo globalen kaos. Na slikah je fazni portret za 400 različnih začetnih pogojev, vsak do časa 2000. Barve so izbrane naključno.

## Druga naloga

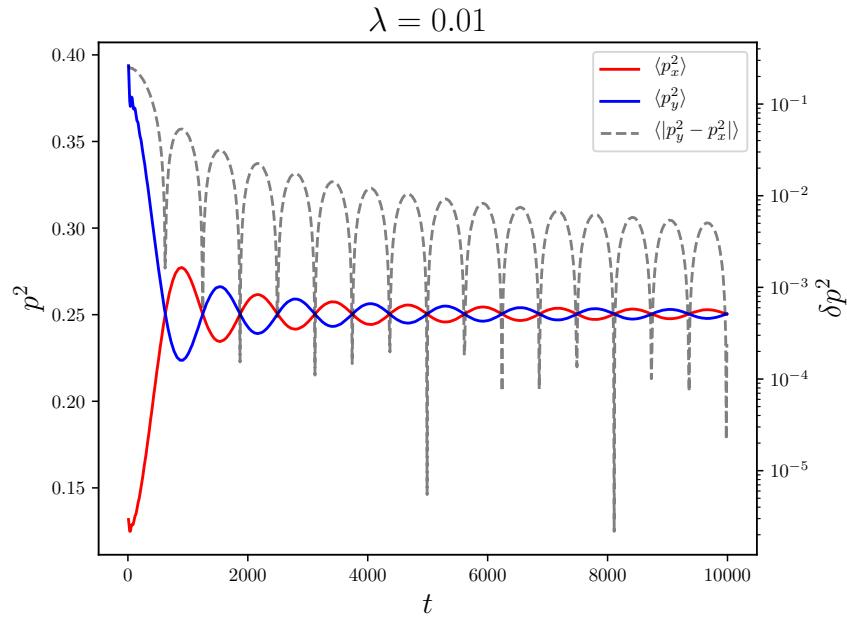
Preverili bomo veljavnost ekviparticijskega izreka, ki pravi, da morata biti povprečji

$$\langle p_j^2 \rangle(t) = \frac{1}{t} \int_0^t p_j^2(s) ds$$

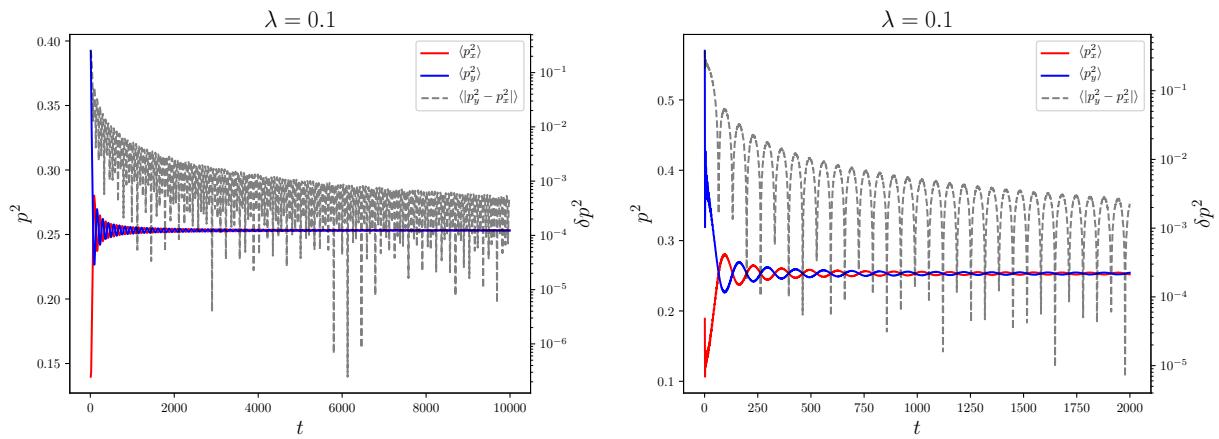
za  $j = x$  in  $j = y$  enaki. Začetni pogoji bodo taki, kot pri risanju faznih portretov, s tem, da je  $p_{x0} = 0.5$ . To območje v kaos zagotovo preide okoli  $\lambda = 3$ .



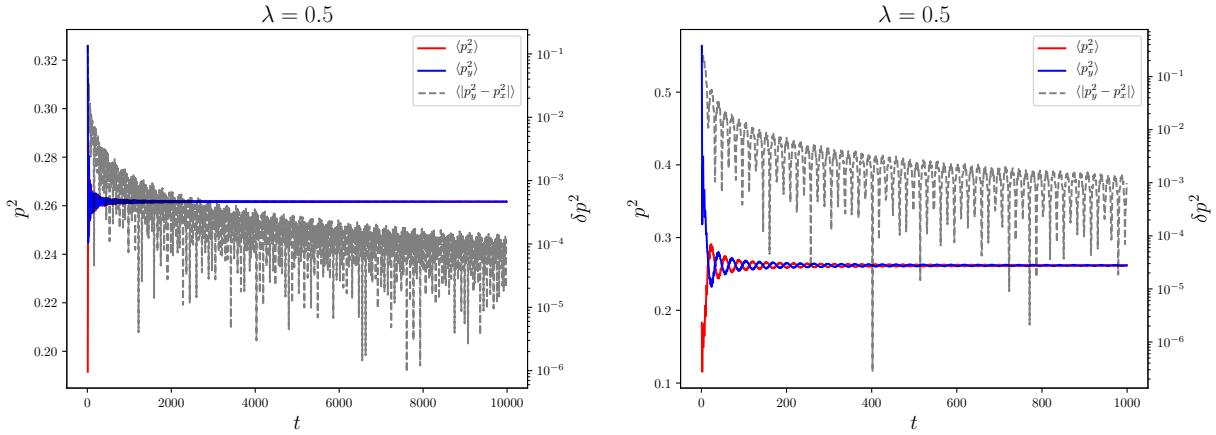
Vrednosti  $p_i^2$  se hitro približajo neki konstantni vrednosti in tam ostanejo. Nista enaki, torej ekviparticijski izrek še ne velja. Desna  $y$  os predstavlja napako. Na desni sliki podrobneje vidimo dogajanje ob manjšem času.



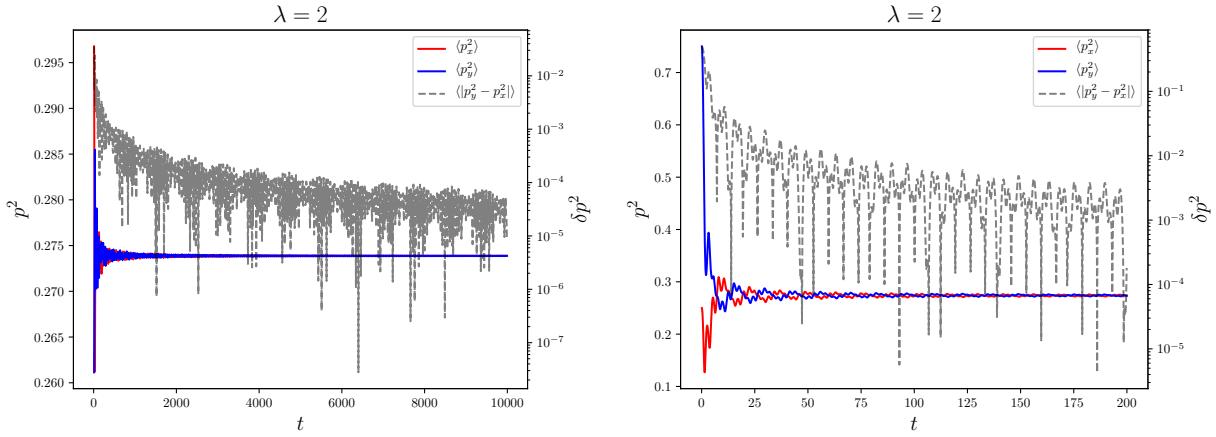
Pri neničelnem  $\lambda$  ekviparticijski izrek že velja - razlike kvadratov gibalnih količin gredo proti nič. Desna  $y$  os predstavlja napako



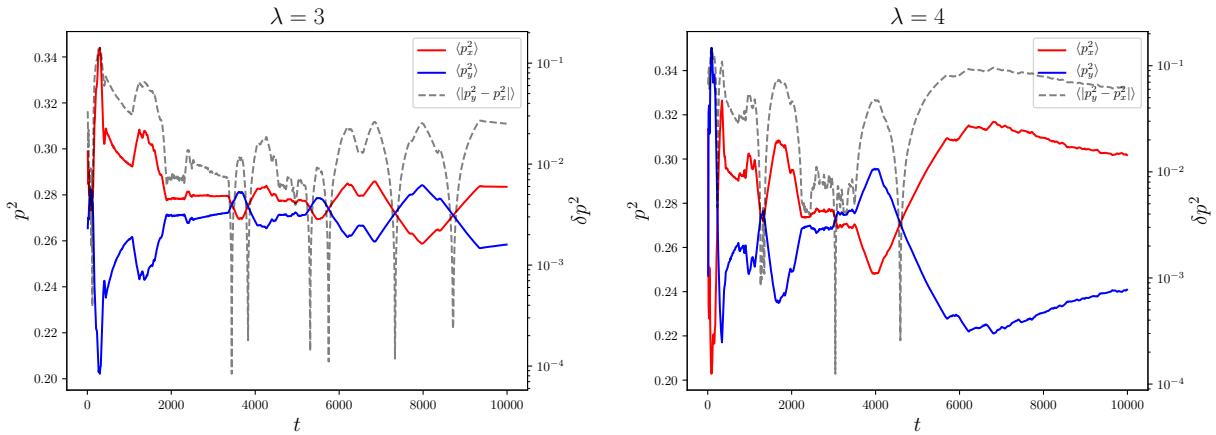
Pri  $\lambda = 0.1$  je napaka še za velikostni red manjša. Poleg . Desna  $y$  os predstavlja napako.



Pri  $\lambda = 0.5$  je napaka še za en velikostni red manjša. Desna  $y$  os predstavlja napako.



Do  $\lambda = 2$  še napaka več ne manjša. Odvisnost  $p_i^2$  tudi ni več lepo periodična kot prej, ampak imamo prisoten nekakšen šum, saj počasi prehajamo v kaotični režim. Desna  $y$  os predstavlja napako.



Pri  $\lambda \geq 3$  smo že v kaotičnem režimu. Napaka se spet poveča, obnašanje  $p_i^2$  pa postane manj regularno za vse čase. Desna  $y$  os predstavlja napako.