

Teorija dinamičnih sistemov, študijsko leto 2017/2018

Zaključna naloga: Ljapunov spekter verige klasičnih Heisenbergovih spinov s časovno periodično hamiltonko (naloge 14)

Jan Šuntajs

Vpisna številka: 28162015

10. julij 2018

1 Navodilo

Vzemi verigo N klasičnih vrtavk z vrtilnimi količinami $\vec{\Gamma}_j$, $j = 1, \dots, N$, z vezmi $\vec{\Gamma}_j^2 = 1$, ki jo poganja periodično časovno odvisen Hamiltonian s Heisenbergovo interakcijo

$$H(t+1) = H(t), \quad H(0 < t < 1/2) = H_1, \quad H(1/2 < t < 1) = H_2 \quad (1)$$

$$H_1 = J \sum_{j=1}^{N/2} \vec{\Gamma}_{2j-1} \cdot \vec{\Gamma}_{2j}, \quad H_2 = J \sum_{j=1}^{N/2} \vec{\Gamma}_{2j} \cdot \vec{\Gamma}_{2j+1}. \quad (2)$$

Vzemimo, da je N sod in imamo periodične robne pogoje, $N + 1 \equiv 1$. Uporabi izrek Noetherjeve in pokaži, da je $\sum_{j=1}^N \vec{\Gamma}_j$ vektor konstant gibanja. Izračunaj Ljapunov spekter opisanega modela za nekaj vrednosti J , npr. pri $N = 4, 6, 8, 10$.

2 Uvod

V uvodnem poglavju izpeljem gibalne enačbe za sistem klasičnih Heisenbergovih spinov, katerih dinamiko določata En. (1) in (2). V nadaljevanju opisem implementacijo Benettinovega algoritma za izračun Ljapunovega spektra modela.

2.1 Enačbe gibanja

Gibalna enačba i -tega spina v verigi je podana prek Poissonovega oklepaja

$$\frac{d}{dt} \vec{\Gamma}_i = \{\vec{\Gamma}_i, H\}. \quad (3)$$

Pri eksplisitnem izračunu Poissonovega oklepaja sem upošteval zvezo, podano v besedilu zaključne naloge št. 13, in sicer

$$\{\Gamma_i^\nu, \Gamma_j^\mu\} = \sum_\lambda \varepsilon_{\nu\mu\lambda} \delta_{ij} \Gamma_i^\lambda, \quad (4)$$

kjer indeksi ν, μ in λ označujejo komponente vektorja vrtilne količine i -tega spina $\vec{\Gamma}_i$. Hamiltonki H_1 in H_2 v lihe oziroma sode pare sklapljata zgolj po dva sosednja spina. Za prvi spin v paru gibalno enačbo po komponentah zapišemo kot

$$\frac{d}{dt} \sum_{\nu} \hat{e}^{\nu} \Gamma_i^{\nu} = J \sum_{\nu, \mu} \hat{e}^{\nu} \{ \Gamma_i^{\nu}, \Gamma_i^{\mu} \Gamma_{i+1}^{\mu} \} = J \sum_{\nu, \mu} \varepsilon_{\nu \mu \lambda} \hat{e}^{\nu} \Gamma_i^{\lambda} \Gamma_{i+1}^{\mu}.$$

Na desni strani prepoznamo do predznaka natančno izraz za vektorski produkt dveh vektorjev in nazadnje zapišemo

$$\frac{d}{dt} \vec{\Gamma}_i = -J \vec{\Gamma}_i \times \vec{\Gamma}_{i+1}. \quad (5)$$

Povsem analogno lahko zapišemo tudi enačbo za drugi spin v paru, pri čemer le zamenjamo indeksa i in $i+1$ in dobimo

$$\frac{d}{dt} \vec{\Gamma}_{i+1} = J \vec{\Gamma}_i \times \vec{\Gamma}_{i+1}. \quad (6)$$

Od tod že sledi, da se mora pri delovanju hamiltonke ohranjati skupen spin parov sklopljenih spinov, saj je

$$\frac{d}{dt} (\vec{\Gamma}_i + \vec{\Gamma}_{i+1}) = 0.$$

Ker slednje velja za vsak par sklopljenih spinov, število vseh spinov pa je sodo, se seveda ohranja tudi skupen spin celotnega sistema, oziroma $\frac{d}{dt} \sum_i \vec{\Gamma}_i = 0$. Povedano velja tako za hamiltonko H_1 kot za hamiltonko H_2 .

Na podoben način se lahko prepričamo še, da gre za konservativen sistem, ki ohranja volumen faznega prostora. Vsota Ljapunovih eksponentov, ki jih bom formalno vpeljal nekoliko kasneje, mora biti torej v takšnem sistemu ničelna. Ponovno obravnavamo par sklopljenih spinov in zanju zapišemo gibalne enačbe

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \vec{\Gamma}_i \\ \vec{\Gamma}_{i+1} \end{bmatrix} = \mathbf{g} \left(\begin{bmatrix} \vec{\Gamma}_i \\ \vec{\Gamma}_{i+1} \end{bmatrix} \right). \quad (7)$$

Po komponentah imamo

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \Gamma_i^x \\ \Gamma_i^y \\ \Gamma_i^z \\ \Gamma_{i+1}^x \\ \Gamma_{i+1}^y \\ \Gamma_{i+1}^z \end{bmatrix} = J \begin{bmatrix} -\Gamma_i^y \Gamma_{i+1}^z + \Gamma_i^z \Gamma_{i+1}^y \\ -\Gamma_i^z \Gamma_{i+1}^x + \Gamma_i^x \Gamma_{i+1}^z \\ -\Gamma_i^x \Gamma_{i+1}^y + \Gamma_i^y \Gamma_{i+1}^x \\ \Gamma_i^y \Gamma_{i+1}^z - \Gamma_i^z \Gamma_{i+1}^y \\ \Gamma_i^z \Gamma_{i+1}^x - \Gamma_i^x \Gamma_{i+1}^z \\ \Gamma_i^x \Gamma_{i+1}^y - \Gamma_i^y \Gamma_{i+1}^x \end{bmatrix},$$

od koder ni težko preveriti, da je $\text{div } \mathbf{g}(\vec{\Gamma}) = 0$, kar je značilnost konzervativnih sistemov. Ponovno lahko zaradi parne sklopitve spinov zvezo posplošimo na celoten sistem, ne zgolj na par spinov.

2.2 Reševanje gibalnih enačb

Zaradi ohranitve skupnega spina para sklopljenih spinov se reševanje gibalnih enačb, ki jih podajata En. (5) in (6), prevede na problem precesije spinov okrog skupnega spina para $\vec{\Gamma}_i + \vec{\Gamma}_{i+1}$. Slednje je očitno, če pišemo

$$\frac{d}{dt} \vec{\Gamma}_i = J \vec{\Gamma}_i \times (\vec{\Gamma}_i + \vec{\Gamma}_{i+1}), \quad \frac{d}{dt} \vec{\Gamma}_{i+1} = -J \vec{\Gamma}_{i+1} \times (\vec{\Gamma}_i + \vec{\Gamma}_{i+1}), \quad (8)$$

od koder vidimo, da je spremembra vrtilne količine spina sorazmerna navoru zaradi skupnega polja v par sklopljenih spinov. Gre torej za precesijo¹ okrog skupnega spina s precesijsko frekvenco

¹S problemom precesije smo se srečali denimo pri Klasični mehaniki in semiklasični izpeljavi Blochovih enačb pri jedrski magnetni resonanci.

$\omega_p = J$. Rešitev gibalnih enačb sem zapisal z uporabo *Rodriguesove formule* za rotacijo vektorja okrog poljubne enotske osi v treh dimenzijah. Po rotaciji začetnega vektorja vrtilne količine $\vec{\Gamma}_i$ okrog enotske normale \hat{k} za kot θ se koordinate rotiranega vektorja $\vec{\Gamma}_i^{\text{rot}}$ zapišejo kot

$$\vec{\Gamma}_i^{\text{rot}}(\vec{\Gamma}_i, \hat{k}, \theta) = \vec{\Gamma}_i \cos \theta + (\hat{k} \times \vec{\Gamma}_i) \sin \theta + \hat{k} (\hat{k} \cdot \vec{\Gamma}_i) (1 - \cos \theta). \quad (9)$$

Preslikava ohranja normo vektorja vrtilne količine in tako vektor z enotske sfere preslikava nazaj na enotsko sfero. V mojem primeru sem vektor \hat{k} usmeril vzdolž vektorske vsote para spinov, za rotacijski kot pa velja $\theta = J\Delta t$, kjer je Δt dolžina časovnega intervala, na katerem se spinska konfiguracija razvija v skladu z delovanjem ene izmed hamiltonk, podanih z En. (2).

Ob upoštevanju časovne periodičnosti hamiltonke, $H(t+1) = H(t)$, sem z uporabo En. (9) definiral diskretno stroboskopsko preslikavo, ki dano začetno spinsko konfiguracijo $\vec{\Gamma}(0)$ v času propagira za dolžino ene periode

$$\vec{f}(\vec{\Gamma}(0)) = \vec{\Gamma}(T = 1). \quad (10)$$

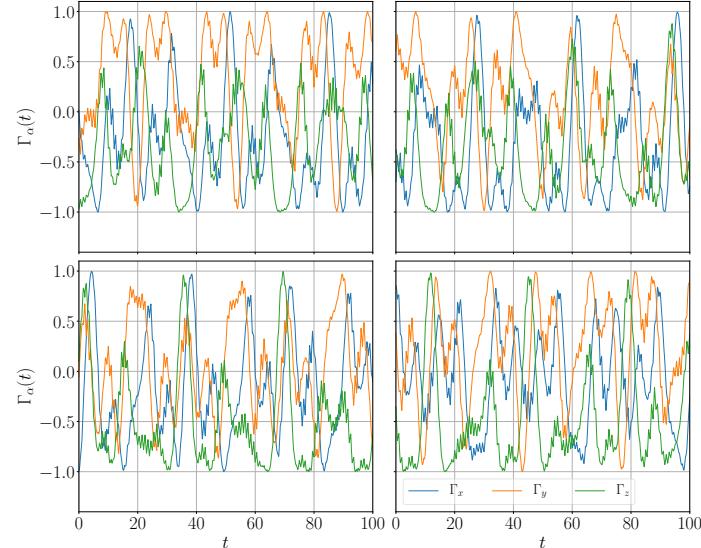
Sam časovni razvoj sem implementiral kot klasično različico Trotter-Suzukijevega propagatorja - periodo T sem razdelil na dva podintervala polovične dolžine in nato spinsko konfiguracijo na prvem podintervalu propagiral v skladu s hamiltonko H_1 , na drugem pa v skladu s hamiltonko H_2 . Začetne spinske konfiguracije sem izžrebal v skladu s pravilom za generiranje enakomerno porazdeljenih smeri na posameznih enotskih sferah, pri čemer je spinska konfiguracija $3N$ -dimenzionalen vektor - N zaradi števila spinov, 3 zaradi števila prostostnih stopenj posameznega spina.

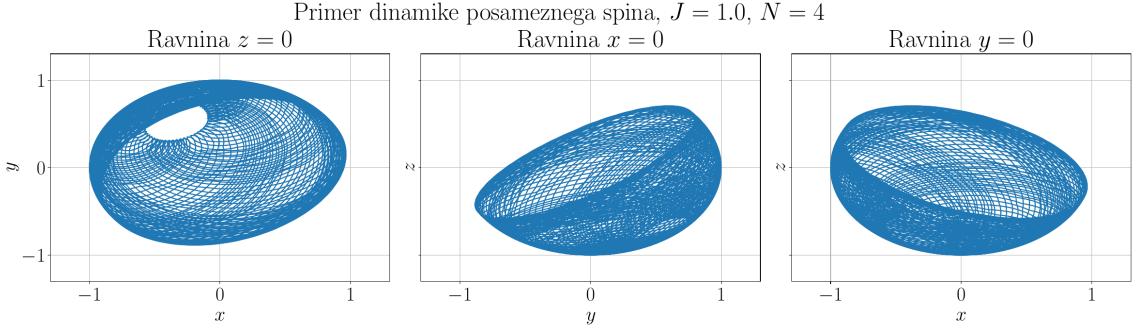
2.3 Numerična implementacija rešitve gibalnih enačb

Postopek numerične implementacije rešitve gibalnih enačb je razviden iz poročila priloženega programa, napisanega v programskem jeziku **python**. Pred samim izračunom Ljapunovih eksponentov, ki ga zahteva naloga, me je zanimalo, kako dobro so pri časovnem razvoju spinske konfiguracije upoštevane fizikalne omejitve, denimo zahteva po normiranosti posameznih spinov in zahteva po ohranitvi celotnega spina. Primer časovnega razvoja začetne spinske konfiguracije je prikazan na Slikah 1 in 2, primer časovne odvisnosti energije pa na Sliki 4.

Primer dinamike posameznih spinov, $J = 1.0$, $N = 4$

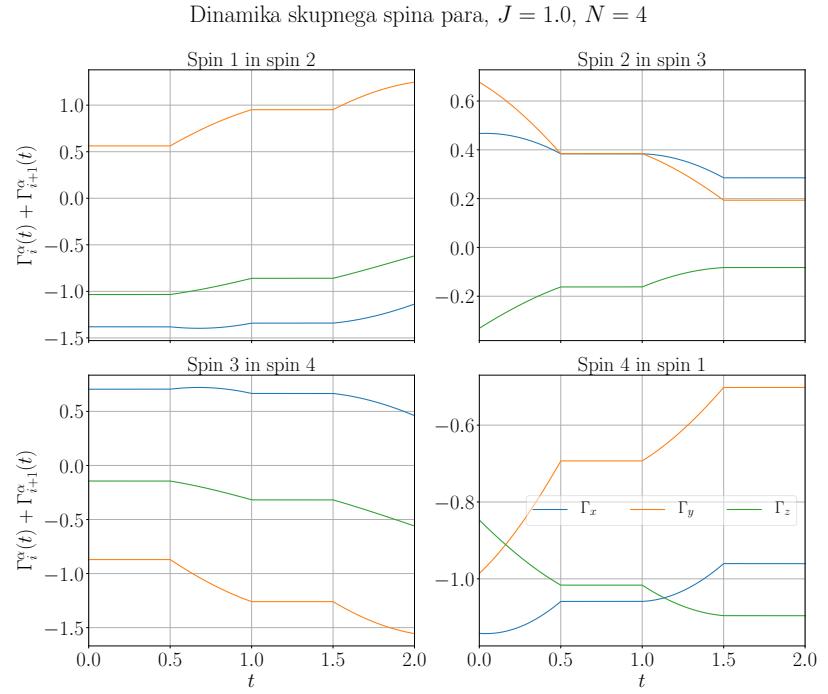
Slika 1: Primer časovnega razvoja komponent vrtilne količine za vsakega izmed spinov v primeru $N = 4$ in $J = 1$ za neko naključno izžrebano začetno spinsko konfiguracijo. Uvodoma spina $\vec{\Gamma}_1$ in $\vec{\Gamma}_2$ precedira okrog njunega skupnega spina, enako velja tudi za preostala spina. Na drugi polovici Trotter-Suzukijevega koraka se sklopita spina $\vec{\Gamma}_2$ in $\vec{\Gamma}_3$ oziroma $\vec{\Gamma}_4$ in $\vec{\Gamma}_1$, kar določi nove precesijske osi.





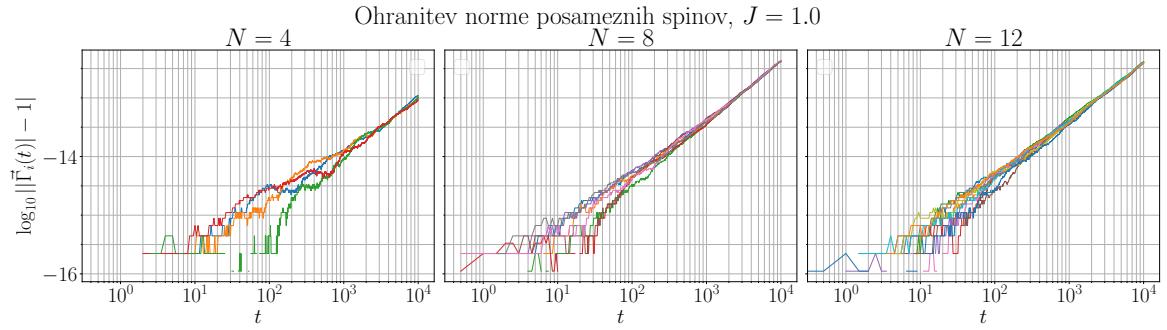
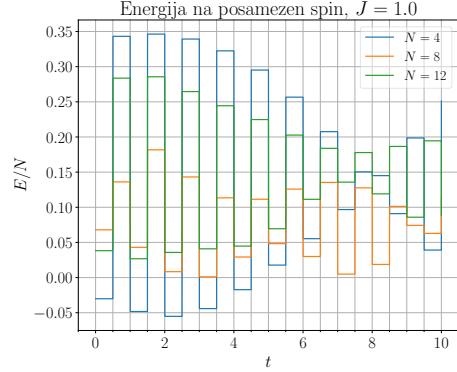
Slika 2: Fazni portreti prvega spina v primeru $N = 4$ v ravninah $z = 0$, $x = 0$ in $y = 0$ za časovni razvoj na intervalu med $t = 0$ in $t = 1000$. Začetni pogoji niso enaki kot pri grafih na Slikah 1 in 4.

Slika 3: Prikaz časovne dinamike skupne vrtilne količine para spinov v primeru $N = 4$ in $J = 1.0$. Z grafov na levi je razvidno, da hamiltonka H_1 resnično ne spremeni skupne vrtilne količine za lihe pare spinov, enak sklep velja seveda tudi za grafa na desni v primeru sodih parov spinov in hamiltonke H_2 . Spina, ki ju medsebojno sklaplja npr. hamiltonka H_1 , se med delovanjem hamiltonke H_2 razvijata neodvisno drug od drugega, zato se v vmesnem časovnem intervalu njuna skupna vrtilna količina spremeni.

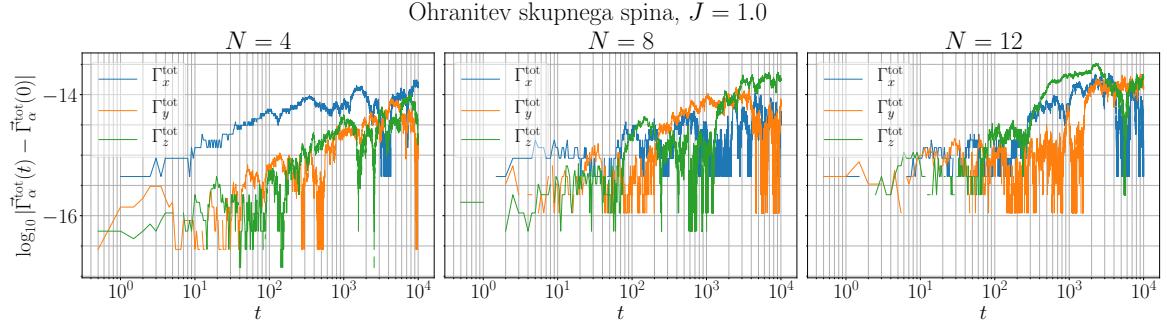


Grafa na Slikah 5 in 6 prikazujejo analizo odstopanja norme posameznih spinov in celotnega spina sistema od začetnih vrednosti.

Slika 4: Časovna odvisnost energije za časovno odvisno hamiltonko, ki jo podaja En. (1). Energija je konstantna zgolj na intervalih dolžine Δt , na katerih se kot med sklopljenimi spini ohranja. Ob preklopu med H_1 in H_2 energija skoči, saj se tedaj spini sklopijo s svojim preostalim najbližnjim sosedom, glede na katerega so se predhodno neodvisno časovno razvijali.



Slika 5: Odstopanje norme posameznih spinov v sistemu od predpisane enotske vrednosti pri propagaciji s Trotter-Suzukijevim polkorakom $\Delta t = 0.5$. Odstopanje sčasoma narašča, vendar je tudi po času $t = 10^4$ zaznavno šele pod 12. decimalko. Slednje sem moral ustrezno upoštevati pri izbiro dolžine začetnih perturbacijskih vektorjev v Benettinovem algoritmu za izračun eksponentov Ljapunova.



Slika 6: Odstopanje skupnega spina po času t od začetne vrednosti po komponentah. Tudi po času $t = 10^4$ je odstopanje v okolici 14. decimalke. Tudi v tem primeru je bil uporabljen Trotter-Suzukijev polkorak dolžine $\Delta t = 0.5$.

3 Eksponentni Ljapunova

V tem poglavju predstavim implementacijo Benettinovega algoritma in numerične izračune. Slednje sem deloma izvedel na svojem računalniku, deloma na pa gruči LIPS na odseku F1 na Inštitutu Jožef Stefan.

3.1 Benettinov algoritem in izračun eksponentov Ljapunova

Pri implementaciji Benettinovega algoritma sem sledil vsebini predavanj pri predmetu in zapisanemu na spletni strani predmeta. Poleg izbrane spinske konfiguracije \vec{S}_0 sem v času z zgoraj opisanim Trotter-Suzukijevim algoritmom propagiral še $3N$ trajektorij z nekoliko perturbiranimi začetnimi pogoji:

$$\vec{S}_i(t) = \vec{S}_0(t) + \delta\vec{S}_i(t), \quad i = 1, \dots, 3N. \quad (11)$$

Pri tem $\delta\vec{S}_i$ označuje i -ti deviacijski vektor, \vec{S}_i pa ustrezajočo perturbirano spinsko konfiguracijo. Začetne deviacijske vektorje $\vec{S}_i(0)$ sem izžrebal kot vektorje naključnih števil z intervala med -1 in 1 , ki sem jih nato normiral na velikost $\tilde{\delta}$. Pri žrebanju naključnih vrednosti sem uporabil funkcijo `random.uniform()` iz Pythonove knjižnice `numpy`. Pri časovnem razvoju osnovne in perturbiranih konfiguracij sem beležil relativno spremembo velikosti deviacijskih vektorjev

$$\tilde{\varepsilon}_i = \frac{\|\delta\vec{S}_i(t)\|}{\tilde{\delta}} = \frac{\|\vec{S}_i(t) - \vec{S}_0(t)\|}{\tilde{\delta}}.$$

V kolikor je katera izmed vrednosti $\tilde{\varepsilon}_i$ ob nekem času t_k presegla vnaprej izbrano mejno vrednost $\tilde{\varepsilon}_{gs}$, sem izvedel Gram-Schmidtov postopek, s katerim sem deviacijske vektorje najprej ortogonaliziral:

$$\begin{aligned} \vec{\delta\tilde{S}}_1(t_k) &= \vec{\delta S}_1(t_k) \\ \vec{\delta\tilde{S}}_2(t_k) &= \vec{\delta S}_2(t_k) - \frac{\vec{\delta S}_2 \cdot \vec{\delta\tilde{S}}_1(t_k)}{\left| \vec{\delta\tilde{S}}_1(t_k) \right|^2} \vec{\delta\tilde{S}}_1(t_k) \\ &\vdots \\ \vec{\delta\tilde{S}}_j(t_k) &= \vec{\delta S}_j(t_k) - \sum_{i=1}^{j-1} \frac{\vec{\delta S}_j \cdot \vec{\delta\tilde{S}}_i(t_k)}{\left| \vec{\delta\tilde{S}}_i(t_k) \right|^2} \vec{\delta\tilde{S}}_i(t_k), \quad j = 2, \dots, 3N. \end{aligned} \quad (12)$$

Po ortogonalizaciji sem velikosti deviacijskih vektorjev še ponastavil nazaj na velikost $\tilde{\delta}$ in shranil vrednosti reskalirnih faktorjev:

$$\vec{\delta S}_j(t_k) \leftarrow \frac{\vec{\delta\tilde{S}}_j(t_k)}{\left| \vec{\delta\tilde{S}}_j(t_k) \right|} \tilde{\delta}, \quad j = 1, \dots, 3N. \quad (13)$$

Pred nadaljnjo propagacijo sem ponastavil tudi vrednosti perturbiranih spinskih konfiguracij, in sicer z upoštevanjem popravljenih deviacijskih vektorjev v En. (11). Za začetno velikost deviacijskih vektorjev sem tipično izbral vrednost $\tilde{\delta} = 10^{-10}$, pred izvedbo zgoraj opisanega korekcijskega postopka pa sem počakal dovolj dolgo, da je relativna sprememba deviacijskih vektorjev doseгла vrednost denimo $\tilde{\varepsilon}_{gs} = 10^5$. Simulacijo sem poganjala dovolj dolgo, da se je korekcijski postopek v Benettinovem algoritmu večkrat ponovil. Potem sem j -ti Ljapunov eksponent določil kot

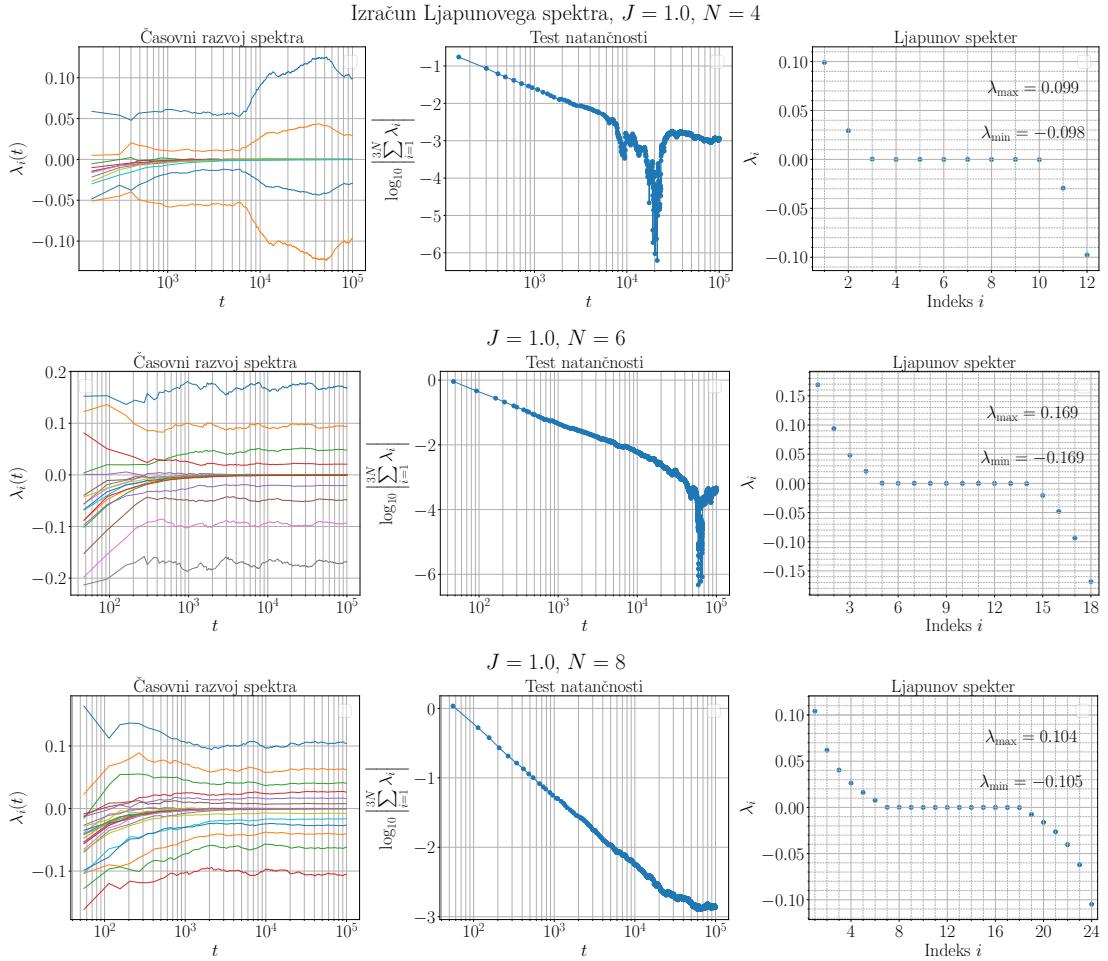
$$\lambda_j(t_k) = \frac{1}{t_k} \sum_{l=1}^k \log \frac{\left| \vec{\delta S}_j(t_k) \right|}{\left| \vec{\delta S}_j(t_l) \right|}, \quad (14)$$

kjer vsota teče po vseh reskalirnih faktorjih do časa t_k . V limiti $t_k \rightarrow \infty$ mora veljati

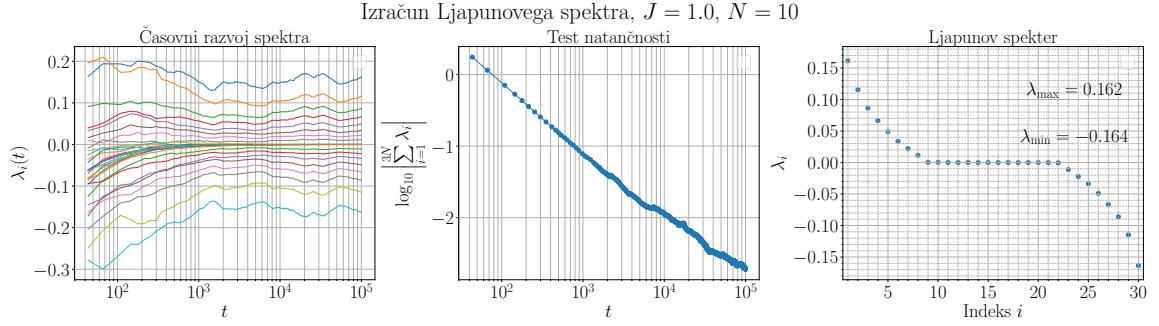
$$\lambda_j = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_j(t_k).$$

3.2 Numerični izračuni

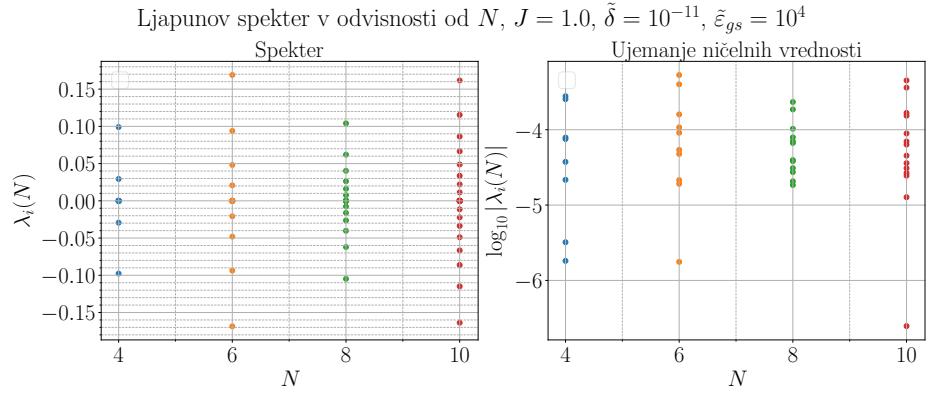
Na spodnjih grafih so prikazani rezultati numeričnih izračunov Ljapunovega spektra za različne velikosti sistema N . Natančnost izračunov sem preverjal glede na ujemanje vsote Ljapunovih eksponentov in ničelne vrednosti, v katero se morajo sešteeti vrednosti v Ljapunovem spektru v konzervativnem sistemu. Zaradi zveznosti dinamičnega sistema, ki zagotavlja obstoj vsaj enega ničelnega Ljapunovega eksponenta (ta ustreza majhnim premikom vzdolž orbite), ohranitve velikosti vrtilne količine N spinov in ohranitve 3 komponent skupnega spina sem v spektru pričakoval $N + 4$ ničelnih Ljapunovih eksponentov.



Slika 7: Rezultati numeričnih izračunov Ljapunovega spektra z Benettinovim algoritmom pri $J = 1.0$ in $N = 4, 6, 8$. Na levi je vsakokrat prikazan časovni razvoj spektra med izvajanjem Benettinovega algoritma, v sredini pa odstopanje vsote Ljapunovih eksponentov od pričakovane ničelne vrednosti, na desni pa Ljapunov spekter z označeno največjo in najmanjšo vrednostjo. Algoritem pravilno napove $N + 4$ ničelne vrednosti Ljapunovih eksponentov, odstopanje katerih od točne vrednosti je prikazano na Sliki 9. Vrednosti neničelnih Ljapunovih eksponentov nastopajo v konjugiranih parih. Nedoločene so najmanj do velikosti fluktuacij izračunanih vrednosti na intervalu med $t = 10^4$ in $t = 10^5$, ki so v primeru $N = 4$ znatne. Sodeč po primerjavi z grafi na Sliki 8 vrednosti maksimalnega Ljapunovega eksponenta alternirajo med vrednostima $\lambda_{\max} \approx 0.10$ in $\lambda_{\max} \approx 0.16$ v odvisnosti od števila parov spinov, ki jih na Trotter-Suzukijevih polkorakih sklapljata hamiltonki H_1 in H_2 . Pri izračunih sem uporabil vrednosti $\tilde{\varepsilon}_{gs} = 10^4$ in $\tilde{\delta} = 10^{-11}$.

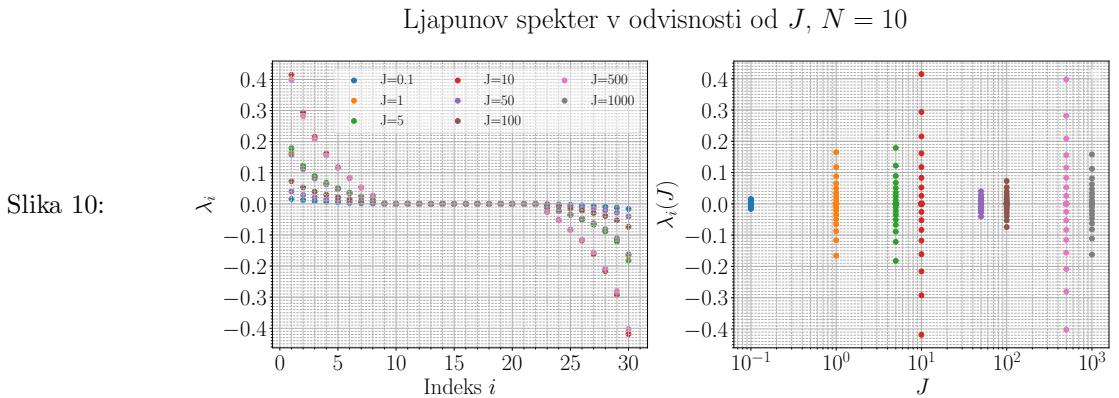
Slika 8: Enaki izračuni kot na Sliki 7, le da za primer $N = 8$.

Slika 9: Spekter Ljapunova v odvisnosti od velikosti sistema in ujemanje eksponentov v sredini spektra s pričakovano ničelno vrednostjo. Odstopanje se vselej pojavi pod tretjo decimalko.



Z izvajanjem Benettinovega algoritma na časovnem intervalu do $t = 10^5$ lahko na podlagi ničelnih vrednosti v spektru Ljapunova do tretje decimalke natančno napovem število ohranjenih količin v sistemu. N ničelnih vrednosti ustrezajo perturbacijam v smereh pravokotnih na enotske sfere posameznih spinov, 3 ustrezajo perturbacijam, ki ne ohranjajo skupnega spina, preostala ničelna vrednost pa je že omenjena značilnost zveznih dinamičnih sistemov.

Za največji obravnavan sistem, torej pri velikosti $N = 10$, sem spektre Ljapunova izračunal še pri različnih vrednostih sklopitvene konstante J . Vrednosti sem izbiral z intervala med $J = 0.1$ in $J = 1000$. Rezultate prikazuje Slika 10.



Slika 10: