

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



# Simplektična integracija

**Avtor: Simon Perovnik**

Predavatelj: prof. dr. Tomaž Prosen

Asistent: Jaš Bensa

Tretja domača naloga pri Višjih računskih metodah

Ljubljana, marec 2023

# 1 Uvod

Obravnavajmo klasični delec v dveh dimenzijah z maso  $m = 1$ , ki se giblje v potencialu

$$V(q_1, q_2) = \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + \lambda q_1^2 q_2^2. \quad (1)$$

Gre seveda za 2D anharmoniški potencial, kjer parameter  $\lambda$  določa jakost kvartičnega, anharmoničnega člena. Delcu pripišemo še kinetično energijo  $T = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2)$ , kar nam da celoten Hamiltonian

$$H = T + V = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + \lambda q_1^2 q_2^2. \quad (2)$$

Definiramo lahko operator časovnega razvoja delca

$$U(t) = e^{t\mathcal{L}} = \exp[t(\{\cdot, T\} + \{\cdot, V\})] \quad (3)$$

tako da velja

$$\rho(x(t)) = U(t)\rho(x(t=0)). \quad (4)$$

Operator je tipa  $\exp(z(A + B))$ , pri čemer se izkaže, da je apliciranje posameznega dela na porazdelitev  $\rho$  enostavno in ga lahko zapišemo kot

$$\begin{aligned} \exp[t(\{\cdot, V\})]\rho(x(t=0)) &= \left(q_1, q_2, p_1 - \frac{\partial V}{\partial q_1}t, p_2 - \frac{\partial V}{\partial q_2}t\right), \\ \exp[t(\{\cdot, T\})]\rho(x(t=0)) &= \left(q_1 + \frac{\partial T}{\partial p_1}t, q_2 + \frac{\partial T}{\partial p_2}t, p_1, p_2\right). \end{aligned} \quad (5)$$

To nas motivira, da poskusimo celoten  $U(t)$  razpisati zgolj z uporabo eksponentnih funkcij te oblike. Pri tem lahko imamo na voljo več različnih t. i. “split-step” razcepov, odvisno od tega, kako natančno želimo razpisati eksponent, za vse pa velja, da so simplektični (gre za kanonične transformacije), kar pomeni, da (vsaj v principu) ohranjajo volumen faznega prostora. V nalogi bomo uporabljali tri različne sheme

$$\begin{aligned} \exp(z(A + B)) &= S_2(z) = e^{\frac{1}{2}zA}e^{zB}e^{\frac{1}{2}zA}, \\ \exp(z(A + B)) &= S_4(z) = S_2(x_1z)S_2(x_2z)S_2(x_1z), \quad x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad x_2 = 1 - 2x_1, \\ \exp(2z(A + B)) &= S_3(z)S_3^*(z) = e^{p_1zA}e^{p_2zB}e^{p_3zA}e^{p_4zB}e^{p_5zA}, \end{aligned} \quad (6)$$

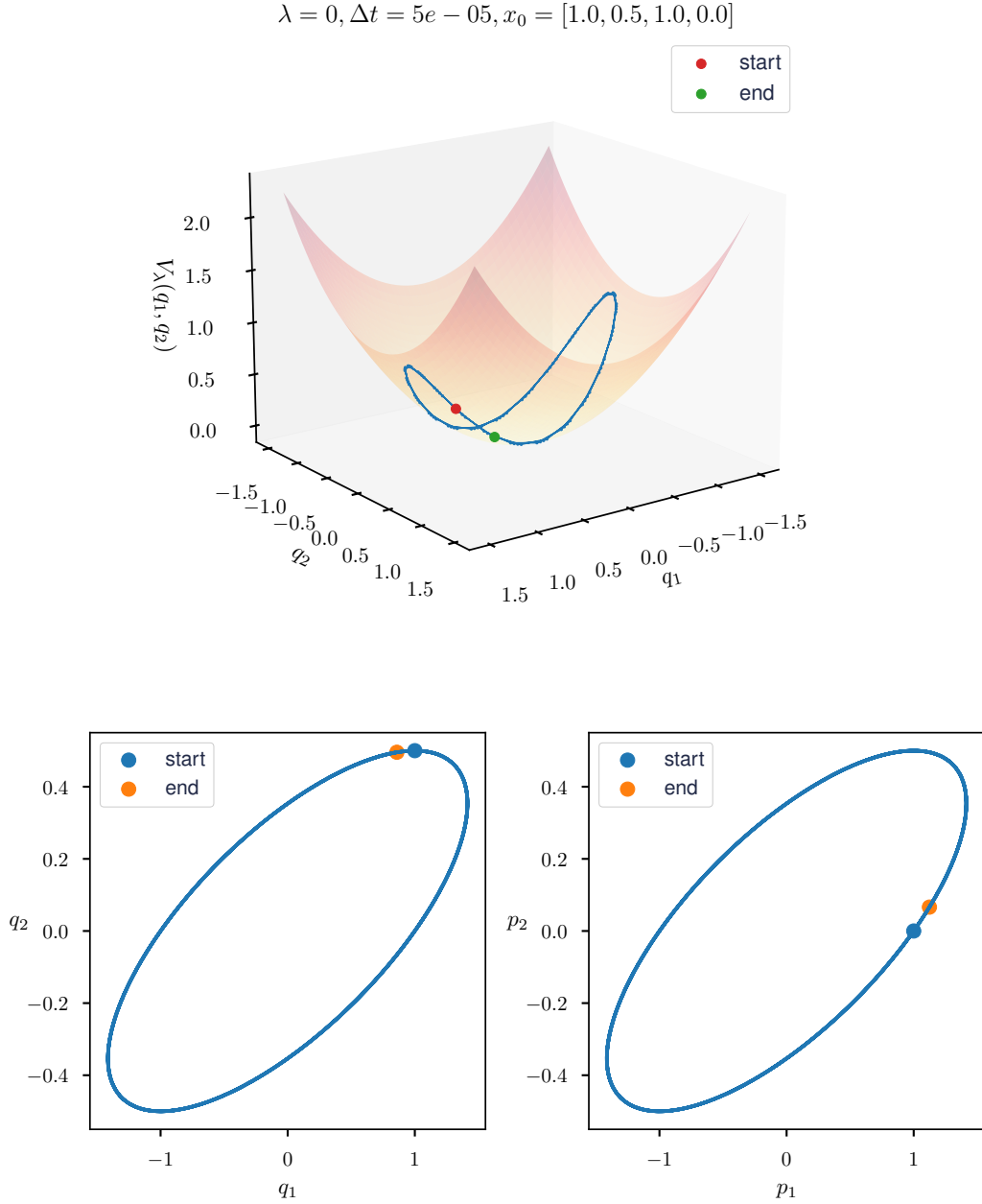
kjer so koeficienti

$$p_1 = p_5^* = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{i}{\sqrt{3}}\right), \quad p_2 = p_4^* = 2p_1, \quad p_3 = \frac{1}{2}, \quad (7)$$

z  $S_3^*$  pa je mišljena konjugacija teh koeficientov.

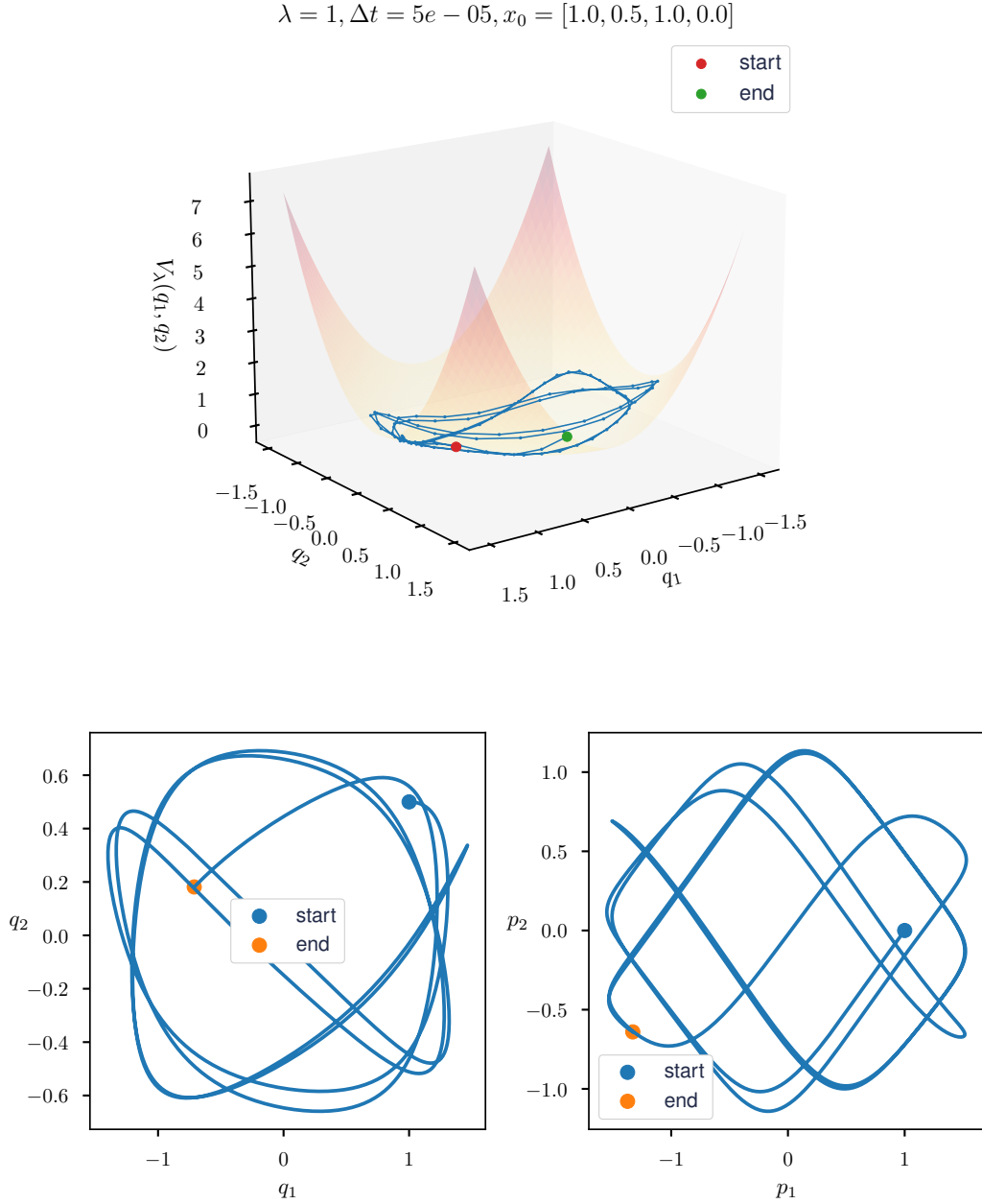
## 2 Časovna propagacija

Da dobimo splošen občutek, kako se sistem obnaša v anharmoničnem potencialu, si najprej oglejmo trajektorije za različne vrednosti parametra  $\lambda$ . Pri tem bom spremljali kje se glede na potencial nahaja delec, kot tudi fazna prostora  $(q_1, q_2)$  in  $(p_1, p_2)$ . Vse simulacije (prikazane na slikah (1), (2) in (3)) bomo izvajali pri časovnem koraku  $\Delta t = 5e - 05$  in pri začetnih pogojih  $x_0 = [1, 0.5, 1, 0]$ .



Slika 1: Trajektorija delca v anharmoniĉnem potencialu pri  $\lambda = 0$  glede na potencial (zgoraj) in fazna portreta (spodaj). Z modro in oranĝno sta oznaĉeni toĉki zaĉetka in konca simulacije.

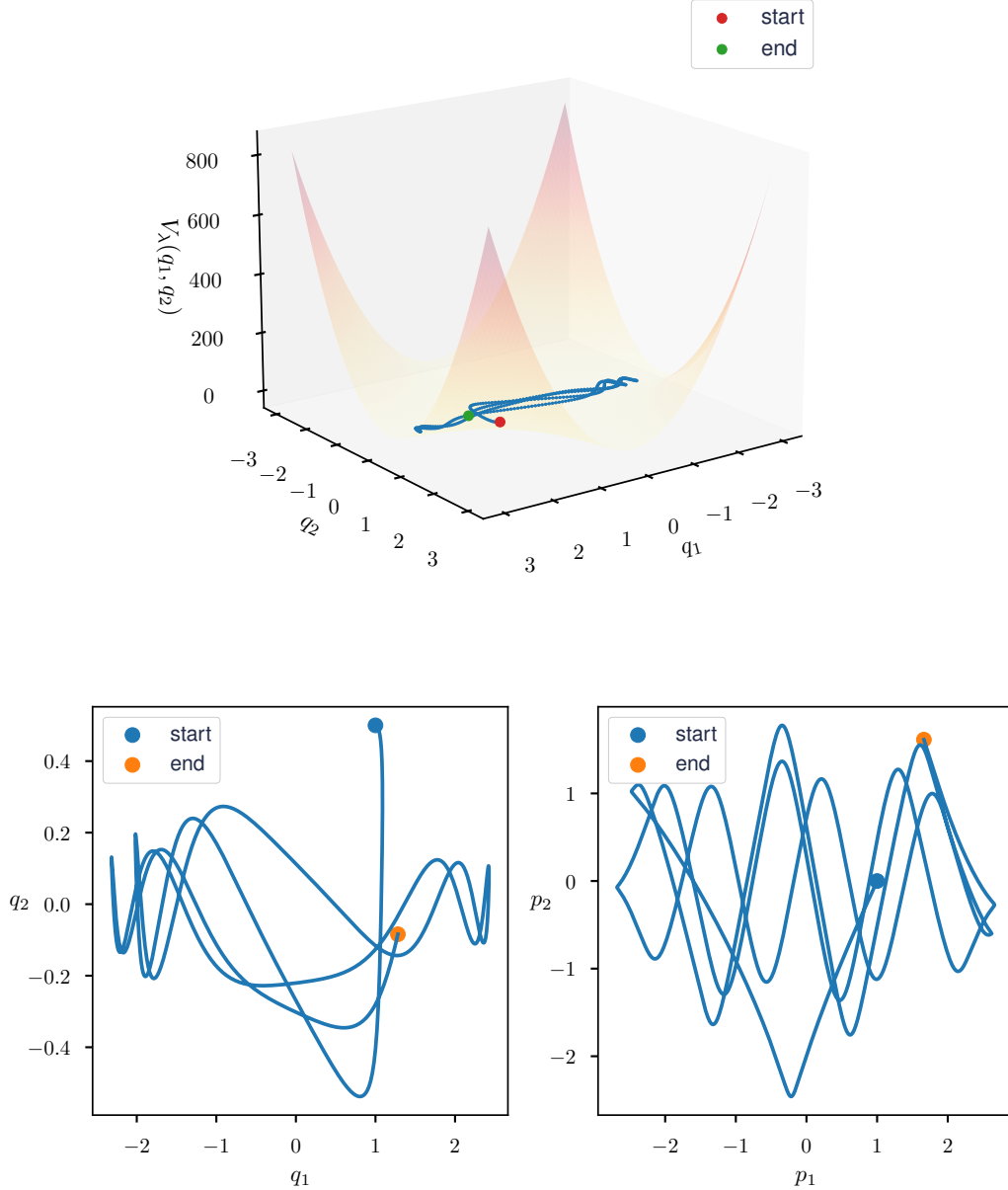
Delec v faznem prostoru opiše elipso, s slike trajektorije pa vidimo, da opiše obliko nekakšnega sedla, pri ĉemer oĉitno oscilira okoli izhodišĉa. Vidimo, da se delec tudi po mnogih obhodih nahaja na isti tirnici, kar je dober znak, da je integrator zares simplektičen. Njegova orbita je stabilna.



Slika 2: Trajektorija delca v anharmoniĉnem potencialu pri  $\lambda = 1$  glede na potencial (zgoraj) in fazna portreta (spodaj). Z modro in oranĝno sta oznaĉeni toĉki zaĉetka in konca simulacije.

Poveĉevanje jakosti “anharmoniĉnosti” rezultira v bolj sploŝenem potencialu, temu primerna pa je tudi trajektorija - delec se s teĝavo povzpne viŝje po potencialu. Videti je, da ni stabilne orbite, v katero bi se lahko delec ujel.

$$\lambda = 10, \Delta t = 5e - 06, x_0 = [1.0, 0.5, 1.0, 0.0]$$



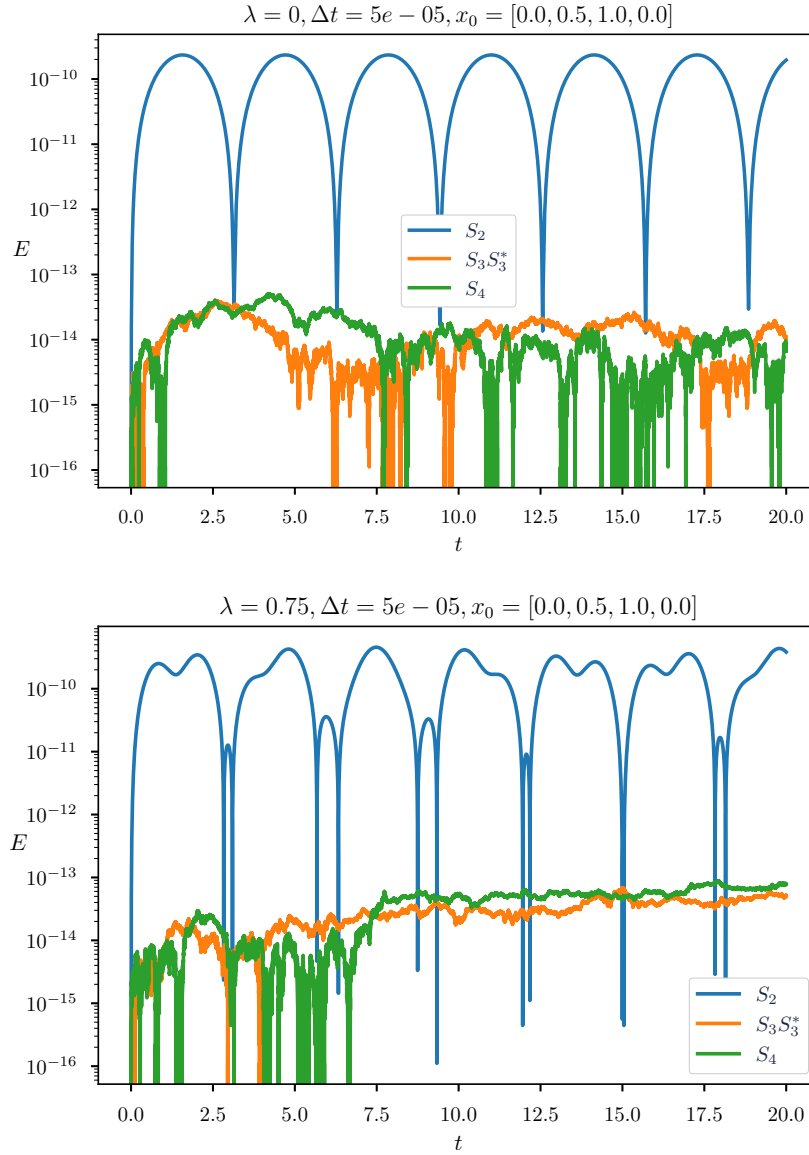
Slika 3: Trajektorija delca v anharmoničnem potencialu pri  $\lambda = 0$  glede na potencial (zgoraj) in fazna portreta (spodaj). Z modro in oranžno sta označeni točki začetka in konca simulacije. Opomba: Na faznem grafu sta osi  $q_1$  in  $q_2$  ravno zamenjani glede na sliko delca v potencialu.

Potencial je sedaj že tako globok, da je delec omejen na gibanje vzdolž osi  $q_1$ , oscilacije v smeri osi  $q_2$  pa so bistveno manjše, kar je zanimiv efekt začetnih pogojev - delec je namreč na začetku izmaknjen z osi  $q_1$ .

### 3 Ohranitev energije

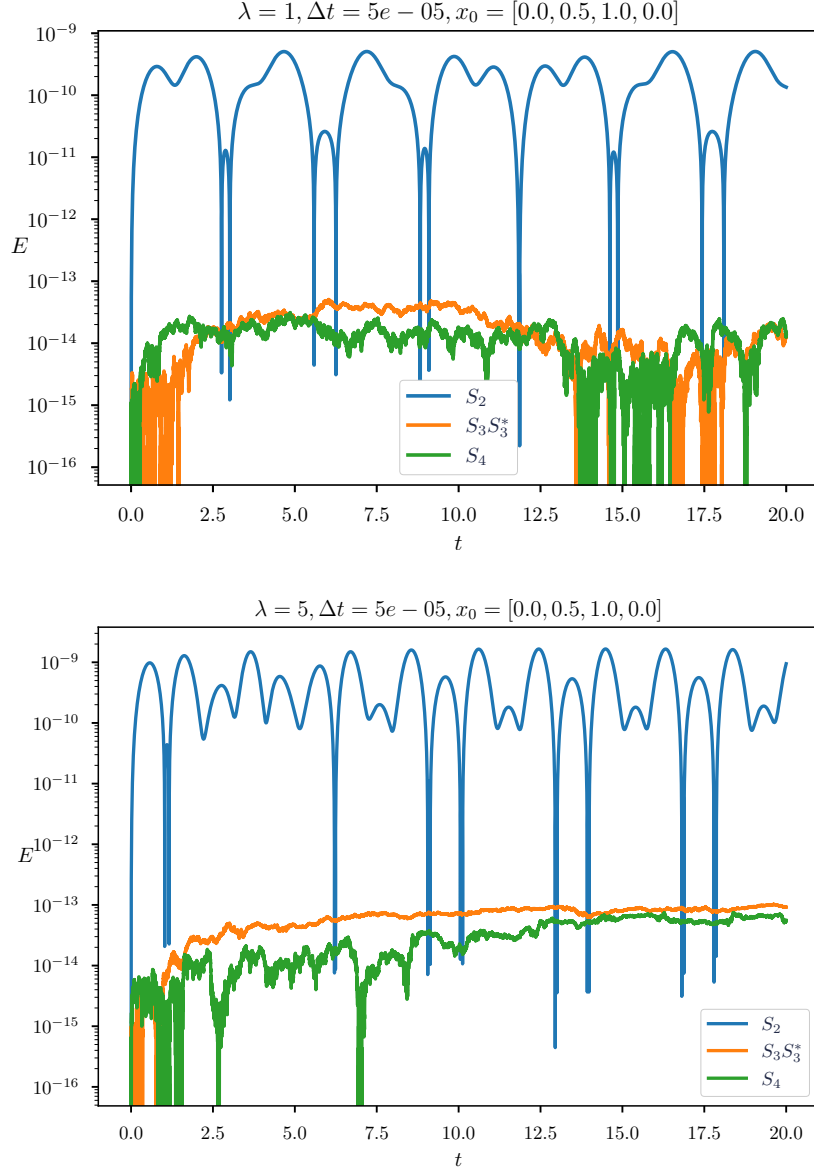
Sedaj, ko razumemo, kako se obnaša naš sistem, si pogledjmo, kaj se skozi integracijo dogaja z energijo. Na osi  $y$ , ki je označena z  $E$  bomo gledali kolikšna je velikost absolutnega odstopanja glede na začetno energijo  $E_0$ . Med

seboj bomo primerjali vse tri “split-step” sheme pri različnih vrednosti parametra  $\lambda$ . Simulacijo bomo izvajali pri časovnem koraku  $\Delta t = 5e - 05$  in pri začetnih pogojih  $x_0 = [1, 0.5, 1, 0]$ .



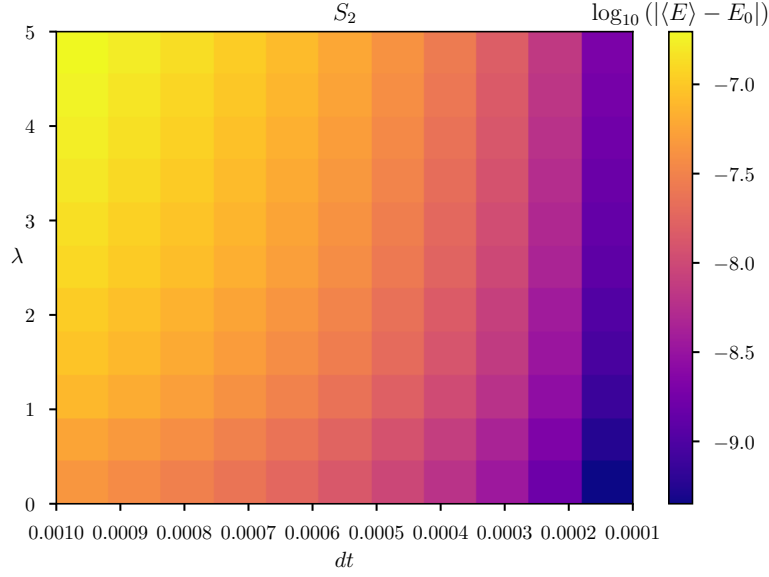
Slika 4: Ohranjanje energije med integracijo pri dveh različnih vrednostih parametra  $\lambda$  in različnih shemah razvoja operatorja časovnega razvoja, ki so opisani v enačbi (6).

Shema  $S_2$  s slike (4) močno izstopa od ostalih dveh, saj dosega nekaj redov slabšo natančnost, kar ni presenetljivo, glede na to, za kako preprost razvoj gre. Opazimo lahko tudi močno periodičnost odstopanja energije, katere vzrok ni povsem očiten. Podobnega efekta pri potekih ostalih dveh shem ni mogoče opaziti, tako da mora biti to efekt lasten prav temu razvoju. Med shemama  $S_4$  in  $S_3S_3^*$  ni bistvene razlike v natančnosti, saj se nekoliko izmenjujeta v tem, kako natančno se ohranja energija. Zanimivo je, da imamo pri  $\lambda = 0$  več primerov, ko odstopanje močno pade, praktično na strojno natančnost. Ta efekt postane šibkejši s povečevanjem  $\lambda$ .



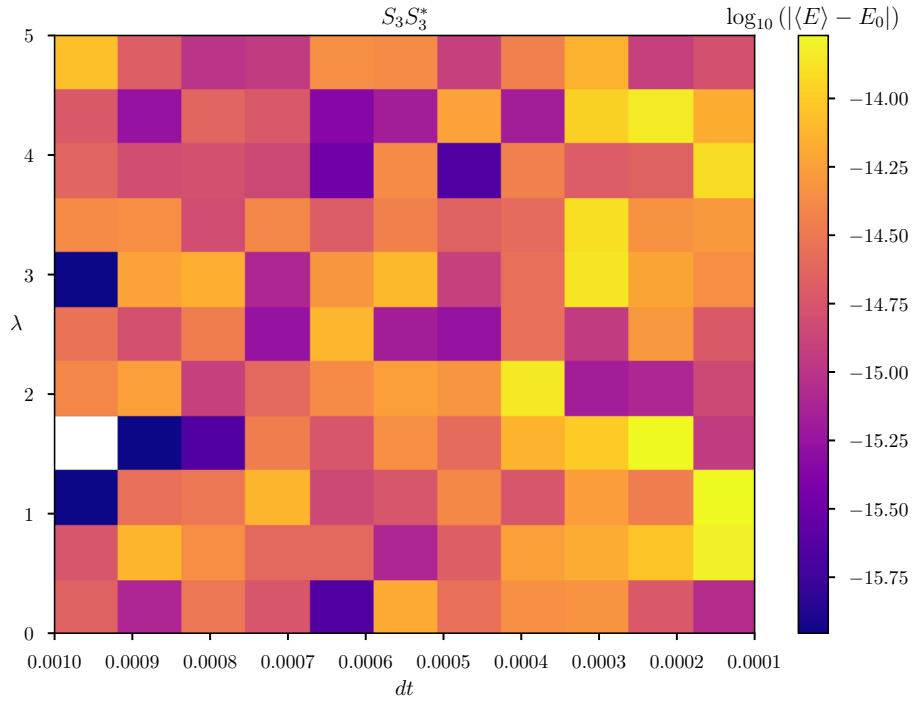
Slika 5: Ohranjanje energije med integracijo pri dveh različnih vrednostih parametra  $\lambda$  in različnih shemah razvoja operatorja časovnega razvoja, ki so opisani v enačbi (6).

Z zgornjih grafov (5) lahko opazimo zelo podobne efekte kot prej. Opazimo pa lahko, da se natančnost s povečevanjem parametra  $\lambda$  nekoliko zmanjšuje pri vseh treh shemah. S spodnjega grafa slike (5) se zdi, da odstopanja s časom nekoliko naraščajo, kar kaže da shemi vseeno nista povsem stabilni. Da bi dobili nekoliko širši vpogled v to, kako parameter  $\lambda$  in pa velikost časovnega koraka  $\Delta t$  vplivata na ohranjanje energije bomo primerjali časovna povprečja energije, oziroma odstopanja le-tega od energije  $E_0$  za vse tri sheme. Na grafih s slik (6, 7, 8) je to odstopanje logaritmirano in je prikazan tako kar eksponent odstopanja. Integracijo smo končali, ko smo dosegli čas  $t = 30$ .



Slika 6: Velikost odstopanja časovnega povprečja energije od energije  $E_0$  pri uporabi sheme  $S_2$  za različne vrednosti parametra  $\lambda$  in časovnega koraka  $dt$ .

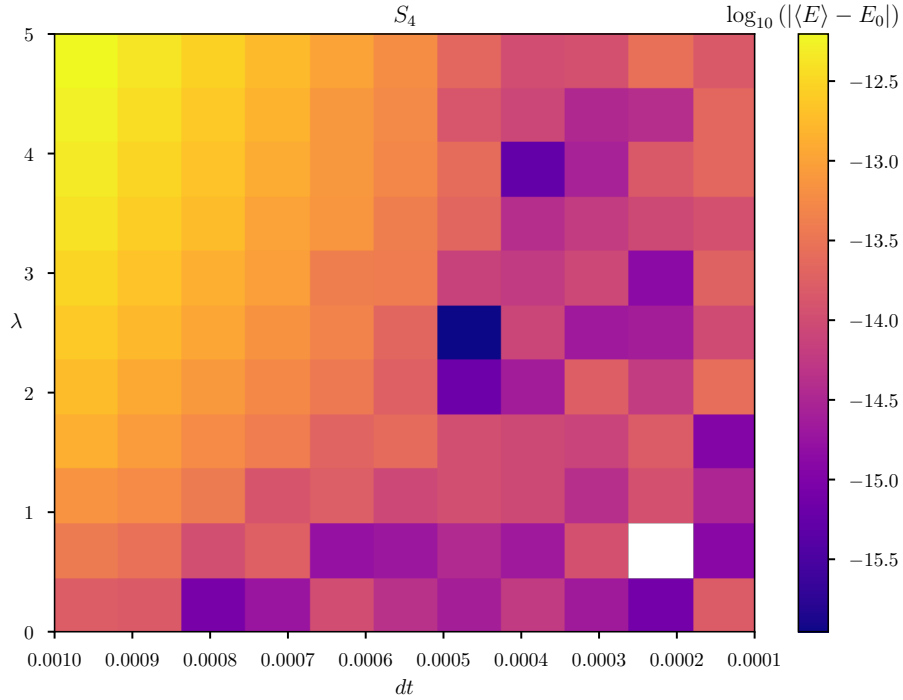
Pri uporabi sheme  $S_2$  se zelo jasno pokažeta efekta, kako se odstopanje od začetne energije manjša, če izvajamo integracijo pri manjših časovnih korakih in pri nizkih  $\lambda$ . S tem ko zmanjšamo korak iz 0.001 na desetinko le-tega, pridobimo približno dva reda natančnosti.



Slika 7: Velikost odstopanja časovnega povprečja energije od energije  $E_0$  pri uporabi sheme  $S_3S_3^*$  za različne vrednosti parametra  $\lambda$  in časovnega koraka  $dt$ .



Graf s slike (7) je razmeroma težko interpretabilen, saj ni jasnega vzorca kaj se dogaja z odstopanjem. To je razmeroma pričakovano, saj je bil končen čas razmeroma kratek in se močni skoki, kot smo jih opazili tudi že prej, močno poznajo pri časovnem povprečju. Kljub vsemu ostaja napaka vseskozi nizka. Pri kombinaciji  $dt = 0.001$  in  $\lambda \approx 1.5$  je bila napaka okoli strojne natančnosti, zaradi česar je logaritem divergiral in ni bila poračunano dejansko odstopanje.



Slika 8: Velikost odstopanja časovnega povprečja energije od energije  $E_0$  pri uporabi sheme  $S_4$  za različne vrednosti parametra  $\lambda$  in časovnega koraka  $dt$ .

Shema  $S_4$  ima precej bolj pregleden graf kot  $S_3S_3^*$ , ponovno spet vidimo enaka trenda, kot smo jih opisali pod sliko (6). Tudi tu je natančnost vseskozi zelo dobra, spet pa se je pojavil primer, ko je bila le-ta pod strojno natančnostjo zaradi česar je en kvadratale v mreži ostal nepobarvan. Opazimo lahko, da je za velike  $\lambda$  in kratke časovne korake natančnost sheme  $S_4$  slabša od sheme  $S_3S_3^*$  in to kar za približno dva reda.