Kandidaatintutkielma
Fysikaalisten tieteiden kandiohjelma
Teoreettinen fysiikka

Symplektiset integrointimenetelmät

Arttu Hyvönen

20.4.2020

Ohjaaja(t): Pauli Pihajoki

Tarkastaja(t): arvostelija Testi
arvostelija Arvostelija

Helsingin Yliopisto
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta

PL 64 (Gustaf Hällströmin katu 2a)
00014 Helsingin yliopisto

HELSINGIN YLIOPISTO — HELSINGFORS UNIVERSITET — UNIVERSITY OF HELSINKI

Tiedekunta — Fakultet — Faculty	Koulutusohjelma — Utbildningsprogram — Degree programme
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta	Fysikaalisten tieteiden kandiohjelma Teoreettinen fysiikka

Tekijä — Författare — Author

Arttu Hyvönen

Työn nimi — Arbetets titel — Title

Symplektiset integrointimenetelmät

Työn laji — Arbetets art — Level	Aika — Datum — Month and year	Sivumäärä — Sidantal — Number of pages
Kandidaatintutkielma	20.4.2020	17

Tiivistelmä — Referat — Abstract

Kirjoita tiivistelmään lyhyt, enintään 250 sanan yhteenveto työstäsi: mitä olet tutkinut, millaisia menetelmiä olet käyttänyt, millaisia tuloksia sait ja millaisia johtopäätöksiä niiden perusteella voi tehdä.

Avainsanat — Nyckelord — Keywords

LaTeX

Säilytyspaikka — Förvaringsställe — Where deposited

Muita tietoja — Övriga uppgifter — Additional information

Sisältö

1. Johdanto

rakenne

* taustaa: numeerisia menetelmiä
* mitä työllä haetaan: Symplektisyys = cool
* mitä ihmettä: selitetään hamilton + symplektisyys
* miten näytetään: Verrataan 2 menetelmää symp. ja ei symp.

2. Liikeyhtälöt

Jos halutaan ratkaista fysikaalisen systeemin kehitys, ensin tarvitaan yhtälöt kuvaavaamaan tätä kehitystä. Monesti järkevin tapa systeemin liikeyhtälöiden selvittämiseen on käyttää Hamiltonin mekaniikka.

Hamiltonin mekaniikka voidaan johtaa Lagrangen mekaniikasta, joka uudelleen muotoili Newtonin mekaniikan variaatiolaskennan avulla. Muista tavoista poiketen Hamiltonin mekaniikalla liikeyhtälöiksi saadaan ensimmäisen asteen differentiaaliyhtälöitä, joka tekee numeerisesta laskennasta suoraviivaisempaa.

Lagrangen mekaniikka

Fysikaaliset systeemit useimmiten kehittyvät ajassa seuraten pienimmän vaikutuksen periaatetta†. Eli toisin sanoen systeemin, jolla on N vapausastetta, kehitys saadaan funktionaalin

$$S[\mathbf{q}(t)] = \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), t)\, dt \tag{2.1}$$

ääriarvona. Missä Lagrangen funktio L on kineettisen- ja potentiaalienergian erotus, $\mathbf{q}$ on yleistetty N ulotteinen koordinaattivektori ja $\dot{\mathbf{q}}$ vastaava nopeus. Koordinaattivektoreiden komponentteja tullaan merkitsemään alaindeksillä i.

Funktionaalista 2.1 voidaan edelleen johtaa Eulerin-Lagrangen yhtälöt

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \tag{2.2}$$

joista saadaan N toisen asteen differentiaaliyhtälöä systeemin kehitykselle. [Arnold, 1989]

Hamiltonin mekaniikka

Lagrangen mekaniikan avulla saadaan N toisen asteen differentiaaliyhtälöä. Hamiltonin mekaniikalla saman systeemin kehitys kuvataan ensimmäisen asteen differentiaaliyhtälöillä joita on $2N$ kappaletta.

† engl. Principle of least action

Legendre muuntamalla Lagrangen funktio $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ muuttujien $\dot{q}_i$ suhteen saadaan Hamiltonin funktio

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \tag{2.3}$$

josta voidaan eliminoida $\dot{q}_i$ yleistetyn liikemäärän

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{2.4}$$

avulla. Nyt tarkastelemalla Hamiltonin funktion kokonaisderivaattaa päädytään Hamiltonin yhtälöihin

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{2.5}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{2.6}$$

jotka ovat systeemin liikeyhtälöt. Nämä yhtälöt ovat ekvivalentteja yhtälöiden 2.2 kanssa. [Tuominen, 2017]

Lisäksi jos systeemin kineettinen energia on tavallista muotoa $T = \frac{1}{2}\sum m_i \dot{q}_i^2$ ja potentiaalienergia $V = V(\mathbf{q})$, voidaan Hamiltonin funktio kirjoittaa muodossa

$$H = T + V \tag{2.7}$$

joka on systeemin kokonaisenergia.[Arnold, 1989]

Symplektisyys

Harmoninen oskillaattori

Harmonisen oskillaattorin Lagrangen funktio on

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}kq^2 \tag{2.8}$$

mistä saadaan liikemäärä yhtälön 2.4 avulla $p = m\dot{q}$. Nyt saadaan Hamiltonin funktio käyttämällä yhtälöä 2.5

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kq^2 \tag{2.9}$$

Hamiltonin funktiosta pystytään nyt ratkaisemaan liikeyhtälöt

$$\dot{p} = -kq \tag{2.10}$$

$$\dot{q} = \frac{p}{m} \tag{2.11}$$

joilla voidaan kuvata systeemin kehitys. Vaihtoehtoisesti Lagrangen funktiosta voidaan johtaa suoraan toisen asteen differentiaaliyhtälö

$$\ddot{q} = -\frac{k}{m}q \tag{2.12}$$

jonka ratkaisu on yleisesti tunnettu.

$$q(t) = A\cos(\sqrt{\frac{k}{m}}t + \phi) \tag{2.13}$$

missä A ja ϕ riippuvat systeemin alkuarvoista.

3. Runge-Kutta

RK johdantoa

Ensimmäisenä menetelmänä käytetään neljännen asteen Runge-Kutta menetelmää.

Menetelmän toiminta/johto

Runge-Kutta menetelmällä voidaan ratkaista ensimmäisen asteen differentiaaliyhtälöitä. Eli yhtälöitä, jotka ovat muotoa

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y) \tag{3.1}$$

missä $y(t)$ on funktio, joka yritetään ratkaista ja $f(t, y)$ on mielivaltainen tiedetty funktio. Lisäksi tarvitaan alkuarvo $y(t_0) = y_0$, jotta ratkaiseminen voidaan aloittaa.

Integroimalla yhtälöä 3.1 puolittain yhden aika-askeleen h matkan verran ja merkitsemällä $y_1 \equiv y(t_0 + h)$ saadaan

$$y_1 = y_0 + \int_{t_0}^{t_0+h} f(t, y)dt \tag{3.2}$$

ja tästä voidaan approksimoida puolisuunnikassäännöllä

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}\left[f(t_0,\ y_0) + f(t_0 + h,\ y_1)\right] \tag{3.3}$$

Nyt huomataan ongelma. Arvo y_1, joka halutaan ratkaista, on yhtälössä molemmilla puolilla. Ongelmasta päästään eroon korvaamalla y_1 yhtälön oikealla puolella arviolla $y_1 \approx y_0 + hf(t_0, y_0)$. Sijoitetaan arvio yhtälöön 3.3, jolloin saadaan

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}\left[f(t_0,\ y_0) + f(t_0 + h,\ y_0 + hf(t_0, y_0))\right] \tag{3.4}$$

Nyt voidaan huomata, että $k_1 = f(t_0, y_0)$ ja $k_2 = f(t_0+h, y_0+hk_1)$ ovat kulmakertoimia ja kun kirjoitetaan 3.4 uudestaan niiden avulla saadaan

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}k_1 + \frac{h}{2}k_2 \tag{3.5}$$

Eli seuraavan aika-askeleen arvo saadaan ottamalla edellisen askeleen arvo ja sen jälkeen seuraamalla ensimmäistä kulmakerrointa aika-askeleen puoleenväliin, minkä jälkeen seurataan toista kulmakerrointa askeleen loppuun. Tämän menetelmän ero pelkkään aika-askeleen puolittamiseen tulee siitä, että toisen kulmakertoimen laskemisessa on käytetty avuksi ensimmäistä kulmakerrointa.

Kahden kulmakertoimen sijasta menetelmä voidaan yleistää useammalle kulmakertoimelle joilla jokaisella on oma painotuksensa. Eli seuraavan askeleen arvo n:llä kulmakertoimella saadaan summalla

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^{n} b_i k_i \tag{3.6}$$

missä b_i ovat tiedettyjä kertoimia. Kahden kulmakertoimen esimerkissä jälkimmäisen kulmakertoimen laskemisessa käytettiin apuna ensimmäistä. Nyt otetaan huomioon kaikki edeltävät kulmakertoimet, jolloin kulmakertoimet saadaan kaavalla

$$k_i = f(t_0 + hc_i\,,\; y_0 + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\, k_j) \tag{3.7}$$

missä c_i ja a_{ij} ovat tiedettyjä kertoimia, jotka yhdessä kaavan 3.6 kertoimien b_i kanssa määrittelevät eri Runge-Kutta menetelmät.

Näin määritellyt menetelmät ovat eksplisiittisiä. Menetelmä voi olla myös implisiittinen, jolloin kulmakertoimet voivat riippua kaikista aika-askeleen muista kulmakertoimista, eivät vain edeltävistä. Molemmassa tapauksessa kertoimet esitetään yleensä kuten taulukossa 3.1. Eksplisiittisessä tapauksessa kertoimet a_{ij}, joissa $i \leq j$ ovat nollia ja monesti jätetään siksi tyhjiksi.

$$\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
c_n & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \dots & b_n
\end{array}$$

Taulukko 3.1: Butcher taulukko Runge-Kutta menetelmien kertoimille

[Hairer et al., 2006] Hairer et al. [2006]

Toteutus

Menetelmän toteutus.

4. Loikkakeino

Loikkakeino johdantoa

Johto

Loikkakeinon johto.

Toteutus

Menetelmän toteutus.

5. Vertailu

Vertaillaan Runge-Kuttaa, loikkakeinoa ja analyyttistä ratkaisua.

6. Päätelmät

Mitä johtopäätöksiä voidaan tehdä tuloksista ja vertailusta.

7. Liitteet

Liitteissä voi esitellä esimerkiksi työssä käytettyjä tietokonekoodeja:

Kirjallisuutta

Arnold, V. I. (1989). *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer.

Hairer, E., Lubich, C., and Wanner, G. (2006). *Geometric Numerical Integration*. Springer.

Tuominen, K. (2017). Analytical mechanics.