

TEKST NR 317

1996

**Poincaré
og
symplektiske
algoritmer**

Af Ulla Rasmussen
Vejleder: Anders Madsen

TEKSTER fra

IMFUFA **ROSKILDE UNIVERSITETSCENTER**
INSTITUT FOR STUDIET AF MATEMATIK OG FYSIK SAMT DERES
FUNKTIONER I UNDERVISNING, FORSKNING OG ANVENDELSER

IMFUFA, Roskilde Universitetscenter
Postbox 260, 4000 Roskilde, Denmark

Poincaré og symplektiske algoritmer
3. modul rapport af Ulla Rasmussen
Vejleder: Anders Madsen, IMFUFA

IMFUFA-tekst 317/1996 (53 sider) ISSN 0106-6242

Abstract:

Projektet er et 3. modul matematikprojekt i videnskabsfag. Projektet behandler sammenhængen mellem Poincaré's arbejde med n -legeme problemet, og den diskussion der har været indenfor Molecular Dynamics simuleringer om anvendelse af symplektiske algoritmer.

Projektet omfatter en kort historisk redegørelse for n -legemeproblemet frem til Poincaré, samt en opsummering af dele af Poincaré's arbejde med n -legemeproblemet. Desuden behandles k -former og Hamilton-mekanik defineret ud fra symplektiske rum. I projektet skabes en matematisk sammenhæng mellem Hamilton-mekanik defineret ud fra symplektiske rum og Poincaré's observationer omkring n -legemeproblemets egenskaber.

Til sidst i projektet beskrives de problemer i simulering af Hamilton-systemer, der kan afhjælpes med symplektiske algoritmer, og anvendeligheden af symplektiske algoritmer diskuteres.

Denne projektrapport, der er udarbejdet af Ulla Eghave Rasmussen i foråret 1995, knytter sig til 3. modul (videnskabsfagsprojekt) på matematikuddannelsen ved Roskilde Universitetscenter.

Jeg vil gerne rette en stor tak til alle, der har hjulpet mig med projektet. Specielt skal nævnes lektor Anders Madsen (IMFUFA, Roskilde Universitetscenter), som har været vejleder på projektet, samt professor Eigil Præstgaard (Institut 1, Roskilde Universitetscenter) og docent Søren Toxværd (Kemisk Laboratorium 1, Københavns Universitet), som begge har givet mig inspiration til projektet og været til stor hjælp undervejs.

Indhold

Indhold	2
Formål	4
Indledning	5
Kapitel 1: Forudsætninger	6
1.1 1-Former	6
1.2 Differential 1-former	6
1.3 Vektorfunktioner	8
1.4 Differentialligninger	9
1.5 Faseflow	10
Kapitel 2: Poincaré og n-legemeproblemet	11
2.1 Lidt historie	11
2.2 N-legemeproblemet	13
2.3 Hamilton-mekanik	15
2.4 Hill's reducerede problem	17
2 legemer	17
Det reducerede problem	18
2.5 Poincaré's arbejde med n-legemeproblemet	19
Kapitel 3: Differentialformer	22
3.1 K-former	22
Definition af k-former	22
Ydre produkt af 1-former	23
Ydre produkt af k-former	23
Geometrisk betydning af ydre produkt	24
Differential k-former	25
3.2 Integration af former	26
Integration	26
3.3 Stokes lemma	27
Ydre afledet	27
Stokes formel	27
Stokes Lemma	27
Kapitel 4: Hamilton-mekanik på symplektiske rum	29
4.1 Symplektiske former	29
4.2 Konstruktion af Hamilton-vektorfeltet	30
4.3 Bevarelse af den symplektiske struktur	31
4.4 Poincaré's invariante integraler	35
Kapitel 5: Symplektiske algoritmer	37
5.1 Numerisk integration	37
5.2 Kanoniske transformationer	38
5.3 Symplektiske algoritmer	40
5.4 A Horror Story	40
5.5 Om valg af algoritme	43
Opsamling	44

Formål

Baggrunden for dette projekt er, at jeg i min kemiuddannelse har arbejdet med Molecular Dynamics- (MD-) simuleringer. MD-simuleringer er meget kort sagt simuleringer af n-legemeproblemer.

I dette arbejde er jeg stødt på en del artikler, der argumenterer for brug af såkaldte symplektiske algoritmer frem for "almindelige" algoritmer til simulering af n-legemeproblemer. Begrundelsen for dette er bl.a. at Hamilton-systemer, hvorunder n-legemeproblemet hører, bevarer en symplektisk struktur, hvilket en symplektisk algoritme ligeledes gør. Af de artikler jeg har læst, har specielt [13] (se evt. afsnit 5.4) været inspirationskilde til dette projekt, idet den tydeligt illustrerer, hvilke forskelle, der kan opstå, når man bruger en symplektiske algoritme frem for en ikke symplektisk.

N-legemeproblemet, som udover molekylesystemer også kan beskrive planet-bevægelser, er et klassisk matematisk problem, der har været forsøgt løst analytisk, fra Newton opstillede bevægelsesligningerne i 1600-tallet, til Poincaré i slutningen af 1800-tallet viste, at 3-legemeproblemet ikke kan løses analytisk.

I arbejdet med 3-legemeproblemet lægger Poincaré bl.a. grunden til både kaosteori og symplektisk geometri, og dermed til symplektiske algoritmer. Poincaré's "opdagelse" af kaosfænomener afspejler sig i nutidens matematik, specielt indendfor systemdynamik. Derudover afspejler Poincaré's arbejde sig yderligere i spørgsmålet om anvendelse af symplektiske algoritmer til simulering af n-legemeproblemer. Dette hænger sammen med, at Poincaré via sit arbejde med n-legemeproblemet tilsyneladende opnår indsigt i egenskaber som er specielle for Hamilton-systemer.

Disse overvejelser har ledt frem til følgende problemformulering:

Via en beskrivelse af Poincarés analyse af n-legemeproblemet, med henblik på den indsigt, der fører til symplektisk geometri, belyses hvilken rolle Poincarés arbejde spiller for spørgsmålet om anvendelsen af symplektiske algoritmer til simulering af n-legemeproblemet.

Indledning

I dette projektet forsøger jeg at illustrere den matematiske sammenhæng mellem Poincaré's opdagelser og symplektiske algoritmer, mens den mellemliggende historiske udvikling (af omfangsmæssige grunde) stort set er udeladt. Således behandler projektet problemstillinger på to tidspunkter i historien, og forsøger at give et indblik i den matematiske sammenhæng mellem dem. De to tidspunkter er Poincaré's tid (ca. 1889), hvor matematikere m.fl. søgte løsninger til n-legemeproblemet, og idag, hvor anvendeligheden af forskellige algoritmer, herunder symplektiske, diskuteres.

Både Poincaré's arbejde og symplektiske algoritmer er snævert knyttet til Hamilton-mekanik, hvorfor Hamilton-mekanik spiller en væsentlig rolle i projektet. Jeg finder Hamilton-mekanik lettere at forstå, når det er formuleret på mangfoldigheder frem for vektorrum. Dette skyldes bl.a., at de fleste engelsksprogede lærebøger benytter sig af en fremstilling på mangfoldigheder. På denne baggrund ville det være oplagt at formulere Hamilton-mekanik vha. mangfoldigheder, men dette ville kræve definitioner af kort, atlas, differentiable mangfoldigheder m.m., som ikke har umiddelbar forbindelse med Poincaré og symplektiske algoritmer. Derfor har jeg valgt at begrænse mig til vektorrum. Dog forsøger jeg at definere de fleste begreber så tæt på en mangfoldighedsformulering som muligt, således at projektet kan forstås i sammenhæng med bøger, der anvender en fremstilling på mangfoldigheder.

Projektet er bygget op på følgende måde:

I kapitel 1 opsummeres de matematiske grundbegreber, der er nødvendige for at forstå projektet, f.eks. differentialformer og vektorfelter.

I kapitel 2 beskrives den matematiske og historiske baggrund for Poincaré's arbejde med n-legemeproblemet. Desuden gøres der rede for de elementer i Poincaré's arbejde, som har forbindelse til Hamilton-mekanik og symplektiske algoritmer. Til sidst kommer jeg meget kort ind på nogle af Poincaré's resultater, som var væsentlige på hans tid, og som, uden direkte forbindelse til symplektiske algoritmer, har ført til en videreudvikling indenfor matematik.

I kapitel 3 beskrives den grundlæggende teori for symplektisk geometri. Dette indebærer specielt definition af differential k-former. På baggrund af disse udledes Stokes sætning, som er væsentlig i det følgende.

I kapitel 4 beskrives Hamilton-systemer, og på baggrund af Stokes sætning udledes nogle væsentlige egenskaber for disse. Desuden udledes Poincaré's resultater ud fra Hamilton-mekanik, og det præciseres, hvad der menes med at Hamilton-systemer bevarer en symplektisk form.

I kapitel 5 beskrives et eksempel på de problemer, der kan opstå i forbindelse med simulering af Hamilton-systemer, og der gøres kort rede for, hvordan bevarelse af den symplektiske struktur kan afhjælpe disse problemer. Endelig diskuteres styrke og svagheder ved symplektiske algoritmer kort i slutningen af dette kapitel.

Kapitel 1: Forudsætninger

1.1 1-Former

I det følgende er E^n et n -dimensionalt vektorrum udstyret med en basis (e_1, \dots, e_n) . (Når n fremgår af sammenhængen eller er underordnet skrives blot E).

Definition 1.1: En 1-form er en lineær funktion $\omega: E \rightarrow \mathbf{R}$. Dvs. at der for alle $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbf{R}$ og $\xi_1, \xi_2 \in E$ gælder

$$\omega(\lambda_1 \xi_1 + \lambda_2 \xi_2) = \lambda_1 \omega(\xi_1) + \lambda_2 \omega(\xi_2). \quad (1.2)$$

Mængden af alle 1-former på et vektorrum E er selv et vektorrum¹, når sum af to 1-former og multiplikation med skalar defineres ved

$$(\omega_1 + \omega_2)(\xi) = \omega_1(\xi) + \omega_2(\xi) \quad (1.3)$$

$$(\lambda \omega)(\xi) = \lambda \omega(\xi). \quad (1.4)$$

Dette rum kaldes dualrummet til E , og betegnes E^* .

Til den i 'te basisvektor $e_i \in E^n$ kan der knyttes en koordinatfunktion $x_i: E \rightarrow \mathbf{R}$, hvis funktionsværdi på en vektor er den i 'te komponent af vektoren, dvs.:

$$x_i(e_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (1.5)$$

Koordinatfunktionerne er lineære, og dermed 1-former (jvf. def. 1.1). Det kan vises² at de n 1-former x_1, \dots, x_n udgør en basis i dualrummet, som dermed er et n -dimensionalt vektorrum. Da koordinatfunktionerne udgør en basis i dualrummet, kan enhver 1-form skrives som en linearkombination af koordinatfunktioner

$$\omega = \sum_i a_i x_i, \quad a_i \in \mathbf{R}. \quad (1.6)$$

1.2 Differential 1-former

Lad en differentiabel kurve gennem et punkt $x \in E$ være givet ved en parameterfremstilling $\gamma: \mathbf{R} \rightarrow E$, således at $\gamma(0) = x$. Denne kurve har da en tangent i x givet ved

¹ 1-former kan således opfattes både som funktioner og vektorer. I det følgende betegnes de med almindelige bogstaver (x_i) fremfor vektornotationen (x_i) .

² Se f.eks. [6] s.164

$$\mathbf{v} = \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t=0} \quad (1.7)$$

Definition 1.8: Lad $\mathbf{x} \in E$ være et punkt i vektorrummet E . Mængden af tangentvektorer i \mathbf{x} til alle kurver gennem \mathbf{x} , kaldes tangentrummet til E i \mathbf{x} , og betegnes $TE_{\mathbf{x}}$.

Det kan vises, at tangentrummet $TE_{\mathbf{x}}$ til et vektorrum E har samme dimension som E , og da er der i praksis ingen forskel på de to vektorrum E og $TE_{\mathbf{x}}$, som begge kan udspændes af den samme basis³.

Med $dx_i: TE_{\mathbf{x}} \rightarrow \mathbf{R}$ betegnes koordinatfunktionen på tangentrummet hørende til den i 'te basisvektor i $TE_{\mathbf{x}}$. Da E og $TE_{\mathbf{x}}$ er identiske, er dx_i og x_i i praksis identiske funktioner (dx_i er koordinatfunktioner på tangentrummet $TE_{\mathbf{x}}$, mens x_i er koordinatfunktioner på E). Funktionerne dx_i udspænder (jvf. afsnit 1.1) et dualrum til $TE_{\mathbf{x}}$, som kaldes kotangentrummet, og betegnes $(TE_{\mathbf{x}})^*$. Når E er et vektorrum, er $(TE_{\mathbf{x}})^*$ identisk med E^* .

Definition 1.9: Tangentbundet TE til et vektorrum E , er mængden af par (\mathbf{x}, ξ) defineret ved

$$TE = \left\{ (\mathbf{x}, \xi) \in E \times \bigcup_{y \in E} TE_y \mid \xi \in TE_{\mathbf{x}} \right\}. \quad (1.10)$$

Af denne definition følger, at tangentbundet til et n -dimensionalt vektorrum er et $2n$ -dimensionalt vektorrum.

Analogt til definition 1.9 defineres kotangentbundet TE^* , som mængden af par (\mathbf{x}, ω) , hvor $\mathbf{x} \in E$ og $\omega \in (TE_{\mathbf{x}})^*$.

Definition 1.11: En differential 1-form ω på et vektorrum E er en glat afbildning på tangentbundet TE til E , $\omega: TE \rightarrow \mathbf{R}$, givet ved

$$\omega(\mathbf{x}, \xi) = \sum_i a_i(\mathbf{x}) dx_i(\xi), \quad (1.12)$$

hvor $\mathbf{x} \in E$, $\xi \in TE_{\mathbf{x}}$, a_1, \dots, a_n er glatte funktioner, $a_i: E \rightarrow \mathbf{R}$, og hvor ω er lineær på hvert af tangentrummene $TE_{\mathbf{x}}$.

Ud fra denne definition og definition 1.1 ses, at forskellen på en 1-form og en differential 1-form kun er de rum, de er defineret på. En 1-form på et vektorrum E er defineret på vektorrummet selv, mens en differential 1-form på E er defineret på tangentrummet til E .⁴

En differential 1-form taget i et fastholdt punkt $\mathbf{x} \in E$, er en 1-form på tangentrummet $TE_{\mathbf{x}}$:

³ Forskellen på de to rum opstår, når E er en mangfoldighed.

⁴ På mangfoldigheder er denne forskel meget væsentlig

$$\omega_{\mathbf{x}} = \omega(\mathbf{x}, \cdot) = \sum_i a_i(\mathbf{x}) dx_i. \quad (1.13)$$

Normalt udelades index \mathbf{x} i denne notation, og $\omega_{\mathbf{x}}$ betegnes blot ω , hvilket vil blive benyttet i det følgende.

1.3 Vektorfunktioner

Ved en vektorfunktion F forstås en afbildning mellem to vektorrum $F: E^n \rightarrow E^m$, dvs. en funktion

$$F(\mathbf{x}) = (F_1(\mathbf{x}), \dots, F_m(\mathbf{x})), \quad (1.14)$$

hvor F_i er glatte funktioner $F_i: E^n \rightarrow \mathbf{R}$ og $\mathbf{x} \in E^n$.

Definition 1.15: Differentialiet $DF_{\mathbf{x}_0}$ til en vektorfunktion F i et punkt $\mathbf{x}_0 \in E^n$ er en lineær afbildning mellem tangentrum $DF_{\mathbf{x}_0}: TE_{\mathbf{x}_0}^n \rightarrow TE_{F(\mathbf{x}_0)}^m$ givet ved

$$DF_{\mathbf{x}_0}(\xi) = \left(\sum_{j=1}^n \frac{\partial F_1}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} dx_j(\xi), \dots, \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_m}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} dx_j(\xi) \right), \xi \in TE_{\mathbf{x}_0}^n, \quad (1.16)$$

hvor dx_j er koordinatfunktioner på $TE_{\mathbf{x}_0}^n$, $\frac{\partial F_i}{\partial x_j}$ er de partielle afledede, og $\xi \in TE_{\mathbf{x}_0}^n$.

Lad $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ være en vektor i $TE_{\mathbf{x}_0}^n$, da kan $DF_{\mathbf{x}_0}$ udtrykkes på matrixform på følgende måde:

$$DF_{\mathbf{x}_0}(\xi) = A\xi = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_m}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial F_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Matricen A kaldes funktionen F 's Jacobi-matrix.

Differentialiet af en funktion med reel funktionsværdi $F: E \rightarrow \mathbf{R}$ er en lineær afbildning $DF_{\mathbf{x}}: TE_{\mathbf{x}} \rightarrow TR_{F(\mathbf{x})}$. Ved at identificere $TR_{F(\mathbf{x})}$ med \mathbf{R} , kan differentialiet $DF_{\mathbf{x}}$ opfattes som en differential 1-form på E , $DF_{\mathbf{x}}: TE_{\mathbf{x}} \rightarrow \mathbf{R}$ (def. 1.11):

$$DF_{\mathbf{x}}(\xi) = \sum_i \frac{\partial F}{\partial x_i} dx_i(\xi), \quad \xi \in TE_{\mathbf{x}}. \quad (1.18)$$

Da koordinatfunktionerne dx_i udspænder kotangentrummet $(TE_x)^*$, svarer dette til at DF_x er en vektor i kotangentrummet $(TE_x)^*$ med koordinaterne $\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}\right)$.

1.4 Differentialligninger

Samtlige differentialligningssystemer i dette projekt vil (på nær ét enkelt) være 1.ordens autonome differentialligningssystemer.

Lad $\mathbf{x} = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ være en parameterfremstilling for en kurve i E^n , hvor $x_i: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ er differentiable funktioner. Da kan et system af n 1.ordens autonome differentialligninger skrives som

$$\frac{dx_i}{dt} = F_i(\mathbf{x}), \quad (1.19)$$

hvor F_i er funktioner $F_i: U \rightarrow \mathbf{R}$, og hvor $U \subseteq E^n$, er en delmængde af E^n . Alternativt kan systemet skrives som en enkelt vektorligning

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}), \quad (1.20)$$

hvor $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_n)$.

Definition 1.21: Ved et vektorfelt på et vektorrum E forstås en funktion \mathbf{V} , der til hvert punkt i E på entydig måde knytter en vektor.

Venstre side af ovenstående differentialligning(er) kan opfattes som en vektor i tangentrummet TE_x til E i et punkt \mathbf{x} (jvf. def. (1.8)). Således giver differentialligninger generelt et vektorfelt \mathbf{V} på det rum hvorpå de er defineret

$$\mathbf{V} = (F_1, \dots, F_n) = \mathbf{F}. \quad (1.22)$$

Til ethvert vektorfelt kan på samme måde knyttes et differentialligningssystem.

Ved en løsning til et differentialligningssystem (og det tilførende vektorfelt) forstås en differentiabel parameterfremstilling $\mathbf{x}: I \rightarrow E$ (hvor $I \subseteq \mathbf{R}$), som opfylder ligningen (1.20), for ethvert $t \in I$. En løsning siges at være maksimal, hvis den ikke er en ægte restriktion af nogen anden løsning.

Definition 1.23: En funktion $\mathbf{F}: U \rightarrow E^n$, hvor $U \subseteq E^n$ er en åben delmængde, siges at opfylde en lokal Lipschitz-betingelse på U , hvis der for ethvert $\mathbf{x}_0 \in U$ findes en omegn $W \subseteq U$ om \mathbf{x}_0 , og et tal $K > 0$ således at der for alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in W$ gælder at

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}(\mathbf{y})\| \leq K\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|. \quad (1.24)$$

Såfremt F i (1.20) opfylder en lokal Lipschitz-betingelse på en åben mængde $U \subseteq E$, eksisterer der til ethvert punkt $\mathbf{x}_0 \in U$ og tidspunkt t_0 én og kun én maksimal løsning gennem \mathbf{x}_0 til tiden t_0 . En tilstrækkelig betingelse, for at en funktion F opfylder en lokal Lipschitz-betingelse, er at F er C^1 .

Af hensyn til fremstillingen antager jeg i det følgende, at løsninger kan udvides til hele tidsaksen. (Dette gælder dog ikke for n -legemeproblemet, hvilket vil fremgå i afsnit 2.2).

1.5 Faseflow

Antag at funktionen F i (1.20) opfylder en Lipschitz-betingelse på hele vektorrummet E . Da findes der en maksimal løsning $\mathbf{x}(t)$ gennem ethvert punkt $\mathbf{x}_0 \in E$. Antag yderligere at \mathbf{x} går gennem \mathbf{x}_0 til tiden $t = 0$, dvs. $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$. Værdien til tiden t af denne løsning afhænger af punktet \mathbf{x}_0 , hvorfor det resulterende punkt betegnes $g^t(\mathbf{x}_0)$. Da er g^t en transformation $g^t: E \rightarrow E$. Det kan vises at g^t er en diffeomorfi⁵ på E . Diffeomorfierne g^t , hvor $t \in \mathbb{R}$, danner en gruppe med sammensætning som komposition, idet

$$g^t \circ g^s(\mathbf{x}) = g^{t+s}(\mathbf{x}) \quad (1.25)$$

$$g^t \circ g^0(\mathbf{x}) = g^0 \circ g^t(\mathbf{x}) = g^t(\mathbf{x}) \quad (1.26)$$

$$g^t \circ g^{-t}(\mathbf{x}) = g^{-t} \circ g^t(\mathbf{x}) = \mathbf{x}. \quad (1.27)$$

Gruppen g^t kaldes faseflowet.

Faseflowet og vektorfeltet er knyttet sammen via differentiation af faseflowet:

$$\left. \frac{d}{dt} g^t(\mathbf{x}) \right|_{t=0} = F(\mathbf{x}). \quad (1.28)$$

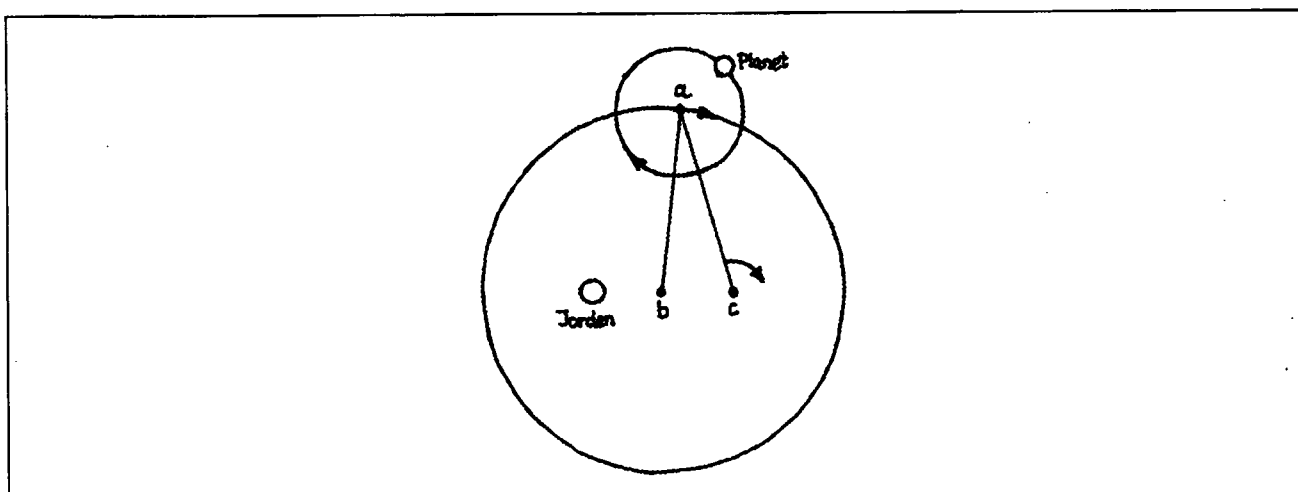
⁵ Dvs. en differentiabel injektiv afbildning med differentiabel invers.

Kapitel 2: Poincaré og n-legemeproblemet

2.1 Lidt historie⁶

N-legemeproblemet stammer historisk set fra observationer af rummet. Jeg tror mennesker, så længe sådanne har været til, har betragtet himlen og spekuleret over, hvad der er derude, og hvad solen, månen og stjernerne mon er for nogle. I hvertfald kan man i mange gamle kulturer se, at solen og månen indgår som væsentlige elementer i religionen. Tænk f.eks. på Inkaerne, der havde solen og månen som de "overordnede" guder, eller egypterne og solguden Ra.

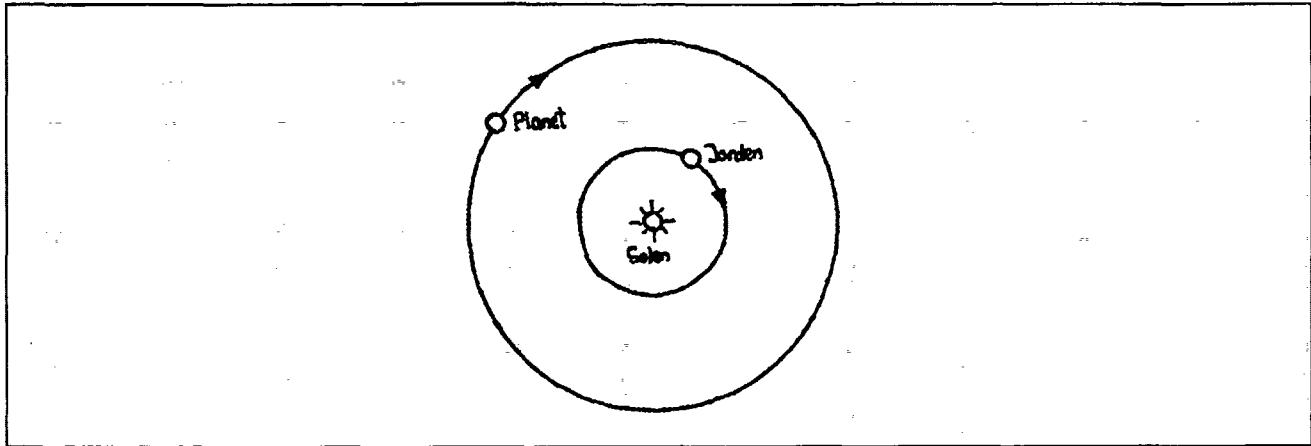
I historisk tid starter den mere matematiske beskrivelse af himmellegemernes bevægelse hos grækerne. Ptolemæus lavede omkring år 100 e.kr. en model for solsystemet, hvor jorden ligger stille. De øvrige planeter bevæger sig i cirkulære baner om et imaginært punkt (a) (se figur 2.1), som igen bevæger sig i cirkulære baner om et punkt (b), der er lidt forskudt fra jorden. Omdrejningshastigheden af punktet (a) er ikke konstant i cirkelbevægelsen om (b), men derimod om et tredje punkt (c).



Figur 2.1: Ptolemæus's model

Denne model, som (ved passende valg af radier og hastigheder) med forbløffende præcision kunne forudsige planeternes bevægelser, blev opretholdt i ca. 1400 år, indtil Copernicus i det 16. århundrede forsøgte at lette beregningerne på denne model. Dette indebar bl.a. at planeterne inklusiv jorden bevægede sig rundt om solen. Dette gav en mere elegant model, som byggede på matematiske overvejelser frem for observationer af rummet, men som ikke gav mere præcise forudsigelser af planeternes bevægelser [14].

⁶ Kilde til det meste af dette afsnit er [14]



Figur 2.2: Copernicus's model

I 1609 postulerer Kepler det, der idag kaldes Kepler's 1. og 2. lov, som bygger på en antagelse om, at planeterne bevæger sig i elliptiske baner med solen i det ene brændpunkt.

Da Kepler levede (1572-1630) var flyvemaskinen ikke opfundet, men til gengæld var Amerika blevet opdaget ikke så mange år forinden. Med andre ord var det en tid, hvor meget transport foregik med skib. Sømænd brugte forudsigelser og observationer af planeternes bevægelser til at navigere efter, hvorfor det at have så præcise forudsigelser som muligt var væsentligt. Keplers model for solsystemet kunne forudsige planeternes bevægelse mere præcist end de tidligere modeller, og blev derfor hurtigt accepteret. Keplers love bygger på observationer foretaget af Tycho Brahe de foregående år. Lovene er dermed rent empiriske, og giver ingen fysisk forklaring på årsagen til planeternes bevægelse.

En forklaring på bevægelserne kommer i juli 1687, hvor Newton i Principia Mathematica offentliggør tyngdeloven og bevægelsesligningerne. Newton viste, at man ved at betragte en enkelt planets bevægelse om solen kan udlede Keplers love. Tager man derimod planeternes indbyrdes vekselvirkning i betragtning holder Keplers love ikke længere. Keplers love kunne ganske vist forudsige planeternes bevægelse mere præcist end tidligere modeller, men de stemte ikke helt overens med observationer. Derfor måtte forudsigelser jævnligt justeres ud fra nyere observationer, hvilket var et meget stort regnearbejde med de metoder og redskaber man havde til rådighed på dette tidspunkt. Ud fra et håb om mere præcise forudsigelser opstod interessen for at anvende Newtons tyngdelov og bevægelsesligninger til at beregne planeternes positioner, når deres indbyrdes vekselvirkning blev taget i betragtning.

De efterfølgende ca. 150 år forsøgte man uden held at finde en eksakt eller approximativ løsning til 3-legemeproblemet, på samme måde som man havde fundet det til 2 legemeproblemet. Dette indebar løsning af et differentiallygningsystem. Der var primært to metoder, der blev brugt til dette formål. Den ene går ud på at finde funktioner, der er konstante på løsningerne til differentiallygningerne. Kan man finde tilstrækkelig mange sådanne funktioner, kan antallet af differentiallygninger reduceres til én, som herefter kan løses ved kvadratur. Den anden metode, der blev anvendt i forsøg på at finde approksimative løsninger til n-legemeproblemet, var perturbationsteori.

I 1858 påstod den tyske matematiker Dirichlet, at han havde en løsning til 3-legemeproblemet. Imidlertid blev dette resultat aldrig offentliggjort, og Dirichlet døde et år efter. I 1889 skulle den tyske matematiker Weierstrass deltage i udformningen af spørgsmål til en konkurrence, der blev udskrevet i anledning af den svenske kong Oscar d. 2.'s 60 års fødselsdag. Bemærkningen fra Dirichlet var nok en medvirkende årsag til, at Weierstrass formulerede et spørgsmål, hvis indhold gik på at finde en eksakt løsning til n-legemeproblemet.

Den franske matematiker Henri Poincaré tog udfordringen op og vandt konkurrencen, selvom han ikke løste n-legemeproblemet. Han behandlede derimod kun 3-legemeproblemet, og de fleste af hans resultater gælder endda kun for en specialudgave heraf, som kaldes Hill's reducerede problem, eller blot det reducerede problem. At Poincaré alligevel vandt konkurrencen skyldtes nok primært 3 ting [14]. Dels anvender han hidtil usete metoder, dels postulerer han egenskaber ved systemet, som man ikke tidligere havde været opmærksom på (herunder invariante integraler, som hænger snævert sammen med symplektiske former), og dels viser han at 3-legemeproblemet ikke kan løses med de tidligere anvendte strategier.

Poincaré's arbejde med 3-legemeproblemet har haft stor betydning for matematik i de ca. 100 år, der er gået siden han vandt konkurrencen - også udover anvendelsen i forbindelse med symplektiske algoritmer. Poincaré arbejdede selv videre efter konkurrencen, og udgav allerede et par år senere et 3-bindsværk [16], hvori hans metoder uddybes. Desuden udgav han lige før sin død (1912) et teorem, hvoraf mange af hans oprindelige resultater følger. Han var ikke selv istand til at vise teoremet, og udgav det i håb om at andre ville være istand til at vise det [17]. Det blev vist et år senere af den amerikanske matematiker G. D. Birkhoff [3].

En af de egenskaber Poincaré finder ved 3-legemeproblemet, er muligheden for eksistens af det, der er blevet kaldt "strange attractors"⁷. Med den stigende anvendelse og udvikling af computere i midten af dette århundrede begynder man at lede efter disse strange attractors (Se f.eks. [11]), både for n-legemeproblemet og andre systemer, hvilket er med til at føre frem til begrebet kaos og den teori, der idag anvendes på dynamiske systemer.

Idag afspejler Poincaré's arbejde sig i simulering af Hamilton-systemer (herunder n-legemeproblemer i MD-simuleringer), idet en af de egenskaber han finder (invariante integraler), som det vil fremgå i kapitel 4, har en snæver matematisk sammenhæng med symplektiske former.

2.2 N-legemeproblemet

N-legemeproblemet er en matematisk model for fysiske systemer, som består af legemer, der bevæger sig rundt mellem hinanden under gensidig vekselvirkning. Hvis vekselvirkningen er tyngdekraften beskriver n-legemeproblemet f.eks. solsystemet, som Poincaré arbejdede med. Lader man derimod vekselvirkningen være et Lennard-Jones potentiale (se f.eks. [23]), modelleres partikler i en væske, hvilket anvendes i MD-simuleringer idag.

I n-legemeproblemet betragtes legemerne som punktformige masser, der bevæger sig i et vektorrum. Legemerne bevæger sig ifølge Newtons 2. lov: $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$. Vekselvirkningen mellem partiklerne giver anledning til den kraft, der virker mellem dem. Når dette indsættes i Newtons 2. lov beskrives partiklernes bevægelse via accelerationen. Da Poincaré arbejdede med planetsystemer, vil vekselvirkningen gennem resten af projektet være tyngdeloven.

Ifølge Newtons tyngdelov er kraften mellem to legemer (1 og 2) givet ved

$$\mathbf{F}_{12} = G \frac{m_1 m_2}{r_{12}^2} \mathbf{e}_{12}, \quad (2.1)$$

hvor m_1 og m_2 er masserne af de to legemer, \mathbf{e}_{12} er en enhedsvektor fra legeme 1 i retning mod legeme 2, G er gravitationskonstanten, og r_{12} afstanden mellem de to legemer. G sættes i det følgende til 1 (svarende til at regne i enheder af G).

⁷ Hvis beskaffenhed jeg ikke vil komme nærmere ind på her

Af tyngdeloven (2.1) ses at kraften mellem to legemer ikke er defineret for sammenstød mellem legemer, dvs. for $r_{12} = 0$. Dette betyder ikke, at legemerne ikke kan støde sammen i det fysiske system, men kun at det er nødvendigt at udelukke kollisioner fra definitionsområdet for kraften, for at kunne beskrive systemet matematisk på denne måde.

I det følgende betegner $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$, positionen af det i 'te legeme, og det forudsættes at $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j$ for $i \neq j$, svarende til udelukkelse af kollisioner. Herved fås den kraft, der virker på legeme i fra legeme j , til:

$$\mathbf{F}_{ij} = \frac{m_i m_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2} \mathbf{e}_{ij}. \quad (2.2)$$

Den potentielle energi for hele systemet er givet ved [9]:

$$E_{\text{pot}} = -\sum_{i < j} \frac{m_i m_j}{r_{ij}} = -\sum_{i < j} \frac{m_i m_j}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|}. \quad (2.3)$$

Ved at differentiere dette udtryk for den potentielle energi mht. koordinaterne for det i 'te legeme, og skrive dette samt udtrykket for kraften (2.2) ud på koordinater, fås at den samlede kraft på det i 'te legeme \mathbf{F}_i er givet ved:

$$\mathbf{F}_i = -\left(\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial x_{i1}}(x_{i1}), \frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial x_{i2}}(x_{i2}), \frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial x_{i3}}(x_{i3}) \right) = -\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial \mathbf{x}_i}. \quad (2.4)$$

Anvendes Newtons 2. lov på det i 'te legeme fås

$$\mathbf{F}_i = m_i \mathbf{a}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = -\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial \mathbf{x}_i}. \quad (2.5)$$

Ved at substituere i dette udtryk med differentialligningen

$$\mathbf{v}_i = \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} \quad (2.6)$$

fås bevægelsesligningerne for n -legemeproblemet, der er et system af $6n$ sammenhørende 1.ordens differentialligninger

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \\ m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial \mathbf{x}_i} \end{cases}, \quad (2.7)$$

som beskriver bevægelsen af samtlige n partikler.

Funktionerne på højre side opfylder en lokal Lipschitz-betingelse, når forudsætningen om udelukkelse af kollisioner er opfyldt. Til enhver tilstand af systemet, dvs. et sæt af positioner og hastigheder for alle legemer $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$, som ikke er en kollision (dvs. $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j$ når $i \neq j$), findes der derfor én og kun én maksimal løsning, som antager netop denne tilstand til et givet tidspunkt t_0 (jvf. afsnit 1.4).

Systemets kinetiske energi er givet ved

$$E_{\text{kin}} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i \|\mathbf{v}_i\|^2, \quad (2.8)$$

hvor \mathbf{v}_i er det i 'te legemes hastighed. Da der i n -legemeproblemet ikke udveksles energi med omgivelserne, og der ikke sker nogen omsætning af bevægelsesenergi, er den totale energi for systemet konstant, og givet ved

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}. \quad (2.9)$$

Den totale energi spiller en meget stor rolle i Hamilton-mekanik, og det er vha. Hamilton-mekanik Poincaré behandler 3-legemeproblemet:

2.3 Hamilton-mekanik

Hamilton-mekanik kommer historisk set fra Lagrange-mekanik. Hamilton-mekanik behandles dog i det følgende uden brug af Lagrangemekanik. Dette er muligt, så længe den totale energi for det betragtede system kan splittes op i et led, der er kvadratisk i hastighederne, og ikke afhænger af positionerne, samt et led, der kun afhænger af positionerne. Af (2.3) og (2.8) ses at dette gælder for n -legemeproblemet. Desuden kræves der for den følgende formulering, at systemets bevægelse ikke er udsat for begrænsninger (som f.eks. et pendul, hvis bevægelse er begrænset af snoren).

Ved en konfiguration for et Hamilton-system forstås en angivelse af positionerne af samtlige legemer. Konfigurationsrummet K kan konstrueres som det kartesiske produkt af E^3 med sig selv n -gange $K = E^{3n}$, og er således rummet af alle mulige positioner for alle legemer. Ved en tilstand for systemet forstås tilsvarende en angivelse af samtlige legemers position og hastighed. Hastighederne er vektorer, der ligger i tangentrummene TK_x til konfigurationsrummet. Således bliver tilstandsrummet (rummet af samtlige mulige positioner og hastigheder for samtlige legemer) tangentbundet TK til konfigurationsrummet. I det følgende sættes for nemheds skyld $N = 3n$.

Lad $\mathbf{q} \in K$ være et punkt i konfigurationsrummet, og $\mathbf{q}' \in TK_{\mathbf{q}}$ et punkt i det tilhørende tangentrum, da kan en tilstand angives som

$$(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = (q_1, \dots, q_N, q'_1, \dots, q'_N), \quad (2.10)$$

$$\text{idet } q'_i = \frac{dq_i}{dt}.$$

Ved en "passende" ordning af koordinaterne i konfigurationsrummet kan man knytte egenskaber for det i 'te legeme til hver tre koordinater i konfigurationsrummet. På denne måde kan der knyttes f.eks. en masse til hver koordinat.

Lad m_i betegne massen hørende til den i 'te koordinat. Den kinetiske energi for systemet:

$$E_{\text{kin}} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i (q_i')^2, \quad (2.11)$$

er da en funktion på tangentrummene, $E_{\text{kin}}: \text{TK}_q \rightarrow \mathbf{R}$. Impulsen p for hele systemet defineres som differentialen af den kinetiske energi (jvf. (1.16))

$$p = DE_{\text{kin}} = \sum_i \left(\frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial q_i'} \right) dq_i' = \sum_i p_i dq_i'. \quad (2.12)$$

Da dette differential er en differential 1-form, er impulsen p en vektor⁸ i kotangentrummet $(\text{TK}_q)^*$. Faserummet defineres som rummet af samtlige mulige positioner og impulser for alle legemer, dvs. faserummet bliver kotangentbundet TK^* til konfigurationsrummet K , og faserummet er dermed et $2N$ -dimensionalt vektorrum (jvf. afsnit 1.2). Koordinater (q, p) i faserummet betegnes under ét generaliserede koordinater.

Koordinaterne til impulsen fås ved differentiation af den kinetiske energi (2.11)

$$p_i = \left(\frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial q_i'} \right) = m_i q_i'. \quad (2.13)$$

Ved indsættelse af dette i (2.11) kan den kinetiske energi skrives som

$$E_{\text{kin}} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} p_i^2. \quad (2.14)$$

Ved hjælp af ovenfor omtalte ordning af koordinaterne i konfigurationsrummet kan den potentielle energi udtrykkes som en funktion på faserummet, når positionen af det enkelte legeme knyttes til 3 koordinater i konfigurationsrummet. Hamilton-funktionen kan nu defineres som en funktion på faserummet givet ved

$$H(q, p) = E_{\text{pot}}(q) + E_{\text{kin}}(p). \quad (2.15)$$

Da den potentielle energi, og dermed Hamilton-funktionen, ikke er defineret for kollisioner, må disse udelukkes fra faserummet. Dette gøres ved at indskrænke konfigurationsrummet (og dermed faserummet) til $K = E^{3n} \Delta$, hvor Δ er rummet af kollisioner⁹.

Bevægelsesligningerne hørende til (2.15) udtrykt i generaliserede koordinater bliver

⁸ Da impulsen kan opfattes både som 1-form og vektor, anvendes ikke vektornotation (p) i det følgende, selvom impulsen i de fleste fremstillinger betegnes som en vektor.

⁹ En uddybning af, hvordan dette gøres, findes i [9].

$$\begin{cases} q_i' = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ p_i' = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases},$$

(2.16)

hvor $i = 1, \dots, N$. Disse ligninger kaldes Hamiltons ligninger eller de kanoniske ligninger, og er grundlaget for Poincaré's behandling af 3-legemeproblemet og det reducerede problem.¹⁰

2.4 Hill's reducerede problem

Hill's reducerede problem bygger på Keplers love, og dermed på løsningerne til 2-legemeproblemet.

2 legemer

Som beskrevet i afsnit 2.1 løste Newton bevægelsesligningerne for 2 legemer, og viste derved en overensstemmelse mellem tyngdeloven og Keplers love. 2-legemeproblemet kan beskrives ved to forskellige metoder.

Den ene metode går ud på at antage at det ene legeme (solen) ligger stille og har meget større masse end det andet (en planet), således at tyngdefeltet fra planeten ikke påvirker solens bevægelse. Herved fås en form for 1-legemeproblem (partikel i et centralfelt). Løses bevægelsesligningerne for dette problem fås keplers tre love, der kan formuleres på følgende måde [21].

1. Planeten bevæger sig i en elliptisk bane om solen med solen i det ene af ellipsens brændpunkter.
2. En radiusvektor fra solen til planeten vil i lige store tidsrum overstryge lige store arealer (se figur 2.3)
3. Forholdet mellem kvadratet på en planets omløbstid T i dens bane om solen og 3. potens af den halve storakse a , er ens for alle planeter, dvs.

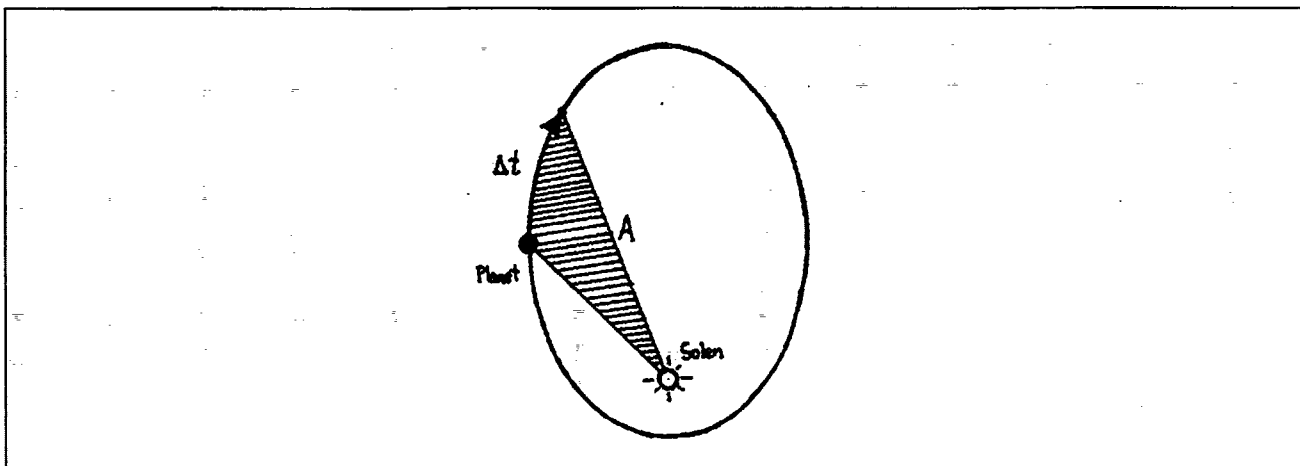
$$\frac{T^2}{a^3} = \text{konstant} . \quad (2.17)$$

¹⁰ De kanoniske ligninger er fremkommet af følgende beregninger:

$$q_i' = v_i = \frac{p_i}{m_i} = \frac{1}{m_i} \frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial q_i'} = \frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial m_i q_i'} = \frac{\partial E_{\text{kin}}}{\partial p_i} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

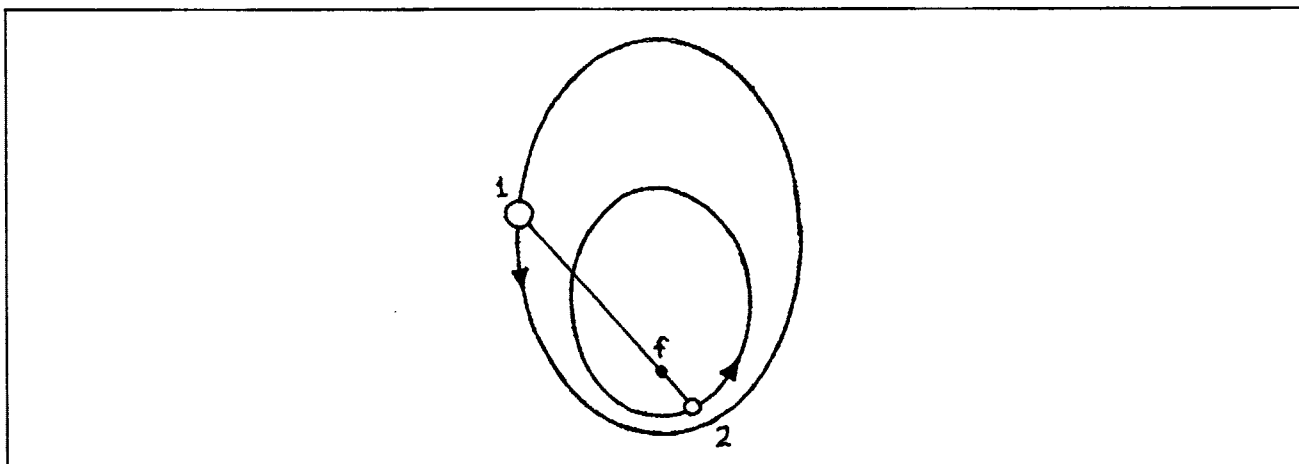
og

$$p_i' = m_i v_i' = -\frac{\partial E_{\text{pot}}}{\partial q_i} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$



Figur 2.3: Keplers 2. lov

Den anden metode til beskrivelse af 2-legemeproblemet, går ud på at lade masserne af de to legemer være af samme størrelsesorden, og antage at deres fælles massemidtpunkt ligge stille. Ved at løse de tilhørende bevægelsesligninger får man at de to planeter vil bevæge sig i ellipser med samme brændpunkter, hvor massemidtpunktet ligger i det ene. Da massemidtpunktet ligger på linien mellem de to legemer vil de bevæge sig med samme omløbsretning (se figur 2.4).



Figur 2.4: 2 legemer

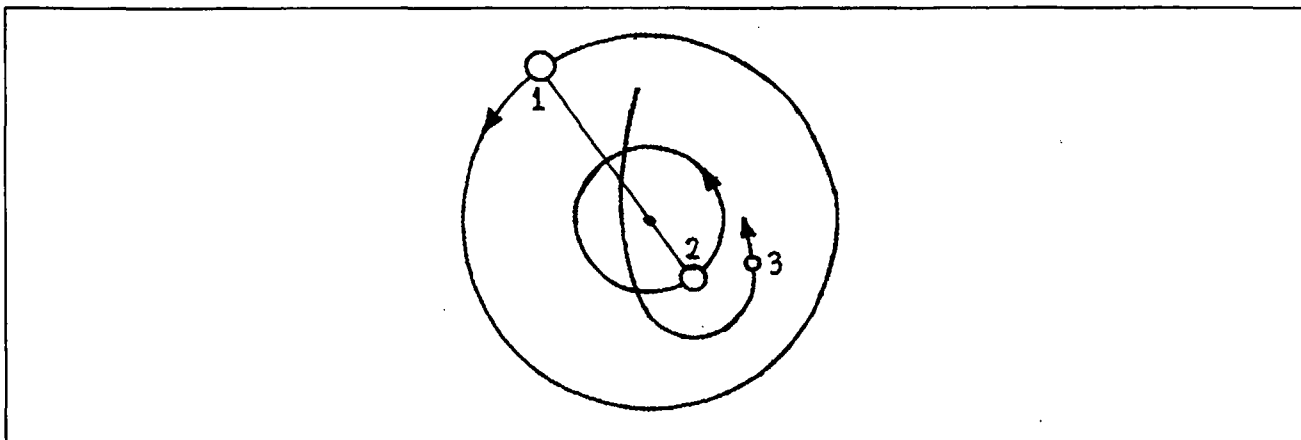
Det reducerede problem

3-legemeproblemet giver (jvf. 2.16) 18 1.ordens koblede differentiaalligninger. Det var de ligninger, som matematikere efter Newton forgæves forsøgte at finde løsninger til vha. kvadratur og perturbationsteori. I midten af 1800-tallet opstillede den amerikanske astronom G. W. Hill 3-legemeproblemet på en måde, som forsimples både problemet og beregningerne, og som bliver det gennemgående eksempel i Poincaré's arbejde med 3-legemeproblemet.

Hill's forsimpelse af 3-legemeproblemet består i at lade løsningen til 2-legemeproblemet være givet, og herefter undersøge, hvordan denne løsning (og medfølgende planetbevægelser) vil påvirke et tredje legeme. Denne opstilling af 3-legemeproblemet, fås ved at gøre følgende tre antagelser:

1. To af legemerne bevæger sig i cirkulære baner om deres fælles massemidtpunkt.

2. Det tredje legeme har negligabel masse i forhold til de to andre legemer, således at dets tilstedeværelse ikke påvirker banerne for de disse.
3. Det tredje legeme bevæger sig i samme plan som de to første.



Figur 2.5: Hill's reducerede problem

I modsætning til det "almindelige" 3-legemeproblem giver det reducerede problem kun 4 ligninger, idet der kun skal regnes på det tredje legemes bevægelse i en plan. Antages yderligere, at den totale energi af systemet er kendt, kan endnu en ligning reduceres væk, og systemet kan beskrives ved kun tre differentiallyigninger. Omvendt vil løsninger til dette ikke være løsninger til det generelle problem, hvor ovennævnte forudsætninger ikke kan anvendes.

2.5 Poincaré's arbejde med n-legemeproblemet

Hill's reducerede problem er som nævnt det gennemgående eksempel i Poincaré's behandling af 3-legemeproblemet i prisopgaven "Sur le Probleme des Trois Corps et les Équations de la Dynamique" [15]. Denne prisopgave er Poincaré's forsøg på at besvare Weierstrass's spørgsmål, der på dansk lyder nogenlunde som følger:

For et system af vilkårligt mange massepunkter, som tiltrækker hinanden i henhold til Newtons love, antagende at der aldrig er to punkter der kolliderer, giv koordinaterne til de individuelle punkter til alle tider som en sum af uniformt konvergente rækker, hvis led er dannet af kendte funktioner¹¹

Poincaré vinder prisen, ved primært at behandle det reducerede problem. Det reducerede problem er langt fra så generelt, som spørgsmålet lægger op til, idet der bl.a. kun indgår 3 legemer, hvor det ene oven i købet ikke påvirker de 2 andre legemer. Det væsentligste bidrag til datidens matematik var nok, at Poincaré viser, at den eneste funktion, der er konstant på løsningerne til både det reducerede problem og det generelle 3-legemeproblem, er energifunktionen. Dette resultat medfører, at man må opgave at løse ligningerne med de strategier der hidtil var anvendt.

¹¹ Oversat fra [14]

I forbindelse med symplektiske algoritmer er det der er mest interessant i Poincaré's arbejde definitionen (og opdagelsen) af invariante integraler. De defineres på nogenlunde følgende måde [16]:

Betragt et differentiaalligningssystem

$$\frac{dx_1}{X_1} = \frac{dx_2}{X_2} = \dots = \frac{dx_n}{X_n} = dt, \quad (2.18)$$

hvor hver X_i er en funktion af (x_1, \dots, x_n) , $X_i: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$.

Lad σ_0 være en punktmængde i \mathbf{R}^n . Antag at en løsning $\phi(t)$ til ligningerne til tiden $t = 0$ går gennem et punkt $p_0 \in \sigma_0$. Denne løsning fører startpunktet p_0 til punktet p til tiden $t = \tau$, dvs. $p = \phi(\tau)$. På samme måde føres alle andre punkter i σ_0 over i nye punkter til $t = \tau$. Denne mængde af punkter til $t = \tau$ betegnes σ . Antag at σ_0 og σ begge er sammenhængende områder med dimension $k \leq n$. Betragt følgende k 'te ordens integral

$$\int \sum_{i_1, \dots, i_k} A_{i_1, \dots, i_k} dx_{i_1} \dots dx_{i_k}, \quad (2.19)$$

hvor i_1, \dots, i_k er tal fra 1 til n . Der summeres over alle kombinationer af i_1 til i_k , hvor $i_1 < \dots < i_k$. Til hver kombination svarer en funktion A_{i_1, \dots, i_k} af (x_1, \dots, x_n) . Hvis dette integral antager samme værdi på σ_0 og σ , siges det at være et invariant integral.

Poincaré finder flere sådanne invariante integraler for Hamilton-systemer. Han viser generelt, at hvis der findes en funktion $M: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$, således at

$$\frac{\partial(MX_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(MX_2)}{\partial x_2} + \dots + \frac{\partial(MX_n)}{\partial x_n} = 0, \quad (2.20)$$

så er

$$J_n = \int M dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (2.21)$$

et n 'te ordens invariant integral (Her er $k = n$ i formel (2.19), hvilket svarer til at der kun er én kombination af i_1 til i_k , hvor $i_1 < \dots < i_k$). Hvis M er konstant 1, fås for de kanoniske ligninger

$$\sum_{i=1}^{2N} \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0, \quad (2.22)$$

idet $X_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ og $X_{N+i} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$

Heraf fås at integralet

$$\int M dq_1 \dots dq_N dp_1 \dots dp_N = \int dq_1 \dots dq_N dp_1 \dots dp_N \quad (2.23)$$

er et $2N$ 'te ordens invariant integral for Hamiltons ligninger.

Ved hjælp af andre metoder finder Poincaré flere invariante integraler. Heraf skal specialt nævnes to:

$$J_1 = \int (dq_1 dp_1 + dq_2 dp_2 + \dots + dq_N dp_N) \quad (2.24)$$

og

$$J_k = \int \sum_{i_1 \dots i_k} dq_{i_1} \dots dq_{i_k} dp_{i_1} \dots dp_{i_k}, \quad (2.25)$$

hvor $1 \leq k \leq N$, og hvor der summeres over alle kombinationer af i_1 til i_k , som tidligere beskrevet.

Som det vil fremgå i kapitel 4, spiller specielt det første (J_1) en væsentlig rolle i beskrivelsen af Hamilton-systemer på symplektiske rum.

Poincaré bruger de invariante integraler til at vise rekurrenssætningen:

Lad g være en volumenbevarende kontinuert bijektiv afbildning, som afbilder et begrænset område D på sig selv: $g(D) = D$. Da vil der i ethvert område $U \subseteq D$ eksistere et punkt $x \in U$ som kommer tilbage til U , dvs. der eksisterer et n så $g^n(x) \in U$.

Denne sætning bruges bl.a. til at vise, at der findes løsninger, som kommer tilbage til et vilkårligt område uendelig mange gange, men også at der kan være løsninger som ikke vil komme tilbage til det samme område mere end et endeligt antal gange. Dette hænger igen sammen med muligheden for eksistens af strange attractors, som der specielt i midten af dette århundrede blev ledt efter, og som fører frem til begrebet kaos.

I resten af projektet er det dog kun definition og eksistens af invariante integraler, som vil spille en rolle, da rekurrenssætningen ikke har nogen betydning for symplektiske algoritmer.

Kapitel 3: Differentialformer

I kapitel 1 blev differential 1-former defineret. I dette kapitel udvides dette til k-former, og nogle af deres egenskaber beskrives. Som det vil fremgå i kapitel 4, kan Hamilton-mekanik formuleres ud fra 2-former, mens de invariante integraler bygger på k-former.

3.1 K-former

Definition af k-former

Definition 3.1: En (ydre) k-form ω^k på \mathbf{R}^n er en k-lineær skævsymmetrisk funktion af k vektorer $\omega^k: (\mathbf{R}^n)^k \rightarrow \mathbf{R}$, dvs.

$$\omega^k(\lambda' \xi_1' + \lambda'' \xi_1'', \xi_2, \dots, \xi_k) = \lambda' \omega^k(\xi_1', \xi_2, \dots, \xi_k) + \lambda'' \omega^k(\xi_1'', \xi_2, \dots, \xi_k) \quad (3.2)$$

og

$$\omega^k(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_k}) = (-1)^v \omega^k(\xi_1, \dots, \xi_k), \quad (3.3)$$

hvor $\xi_i \in \mathbf{R}^n$, $\lambda_i \in \mathbf{R}$, og

$$v = \begin{cases} 0, & i_1, \dots, i_k \text{ er en lige permutation} \\ 1, & i_1, \dots, i_k \text{ er en ulige permutation} \end{cases} \quad (3.4)$$

For 2-former svarer linearitetskravet til bilinearitet

$$\omega^2(\lambda_1 \xi_1 + \lambda_2 \xi_2, \xi_3) = \lambda_1 \omega^2(\xi_1, \xi_3) + \lambda_2 \omega^2(\xi_2, \xi_3) \quad (3.5)$$

og kravet om skævsymmetri til

$$\omega^2(\xi_1, \xi_2) = -\omega^2(\xi_2, \xi_1) \quad (3.6)$$

En bilinær 2-form kan altid skrives på matrixform [6]

$$\omega^2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{v}, \quad (3.7)$$

hvor \mathbf{A} er en $n \times n$ matrix, der på grund af skævsymmetrien er antisymmetrisk:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & + \\ & \ddots \\ - & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Ydre produkt af 1-former

Definition 3.9: Lad $\xi_1, \xi_2 \in \mathbb{R}^n$ være to vektorer, og lad ω_1 og ω_2 være to 1-former på \mathbb{R}^n . Det ydre produkt er da en afbildning $(\omega_1 \wedge \omega_2): \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ givet ved

$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(\xi_1, \xi_2) = \begin{vmatrix} \omega_1(\xi_1) & \omega_2(\xi_1) \\ \omega_1(\xi_2) & \omega_2(\xi_2) \end{vmatrix}. \quad (3.10)$$

Ved beregning følger umiddelbart af denne definition, at for to vilkårlige 1-former ω_1 og ω_2 gælder

$$(\omega_1 \wedge \omega_2)(\lambda_1 \xi_1 + \lambda_2 \xi_2, \xi_3) = \lambda_1 \omega_1(\xi_1, \xi_3) + \lambda_2 \omega_2(\xi_2, \xi_3) \quad (3.11)$$

og

$$\omega_1 \wedge \omega_2(\xi_1, \xi_2) = -\omega_2 \wedge \omega_1(\xi_1, \xi_2), \quad (3.12)$$

når $\xi_i \in \mathbb{R}^n$. Heraf ses (jvf. (3.5) og (3.6)), at $\omega_1 \wedge \omega_2$ er en 2-form.

Koordinatfunktionerne (x_i) på et vektorrum E er (som beskrevet i kapitel 1) 1-former. Da følger af ovenstående, at det ydre produkt af to koordinatfunktioner $x_i \wedge x_j$ er en 2-form. Der er $n(n-1)/2$ sådanne 2-former, hvor $i < j$, og det kan vises at disse udgør en basis i rummet af 2-former på E (Se f.eks. [1]).

Heraf følger at enhver 2-form kan skrives på formen

$$\omega^2 = \sum_{i < j} a_{ij} x_i \wedge x_j, \quad (3.13)$$

hvor $a_{ij} \in \mathbb{R}$.¹²

Ydre produkt af k-former

Definition 3.14: Det ydre produkt $\omega^k \wedge \omega^m$ af k-formen ω^k og m-formen ω^m , er en $(k+m)$ -form givet ved

$$(\omega^k \wedge \omega^m)(\xi_1, \dots, \xi_{k+m}) = \sum_{i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_m} (-1)^v \omega^k(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_k}) \omega^m(\xi_{j_1}, \dots, \xi_{j_m}), \quad (3.15)$$

¹² Det kan vises at $\omega^2 = \omega^2(e_i, e_j)$ se [1]

hvor der summeres over alle kombinationer af $i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_m$ hvor $i_1 < \dots < i_k$ og $j_1 < \dots < j_m$, og hvor $v = 1$ hvis permutationen $i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_m$ er ulige, og ellers 0.

Som for 2-former kan det vises, at k -formerne $x_{i_1} \wedge \dots \wedge x_{i_k}$ (hvor $i_1 < \dots < i_k$), som er dannet ved det ydre produkt af k koordinatfunktioner, udgør en basis i rummet af k -former på \mathbb{R}^n . Således kan enhver k -form skrives på formen

$$\omega^k = \sum_{i_1, \dots, i_k} a_{i_1, \dots, i_k} x_{i_1} \wedge \dots \wedge x_{i_k}, \quad (3.16)$$

hvor $a_{i_1, \dots, i_k} \in \mathbb{R}$, og hvor der summeres over alle permutationer af i_1, \dots, i_k med $i_1 < \dots < i_k$.

Geometrisk betydning af ydre produkt

Betragtes to vektorer i planen: $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ og $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$, da er determinanten

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 \\ u_2 & v_2 \end{vmatrix} \quad (3.17)$$

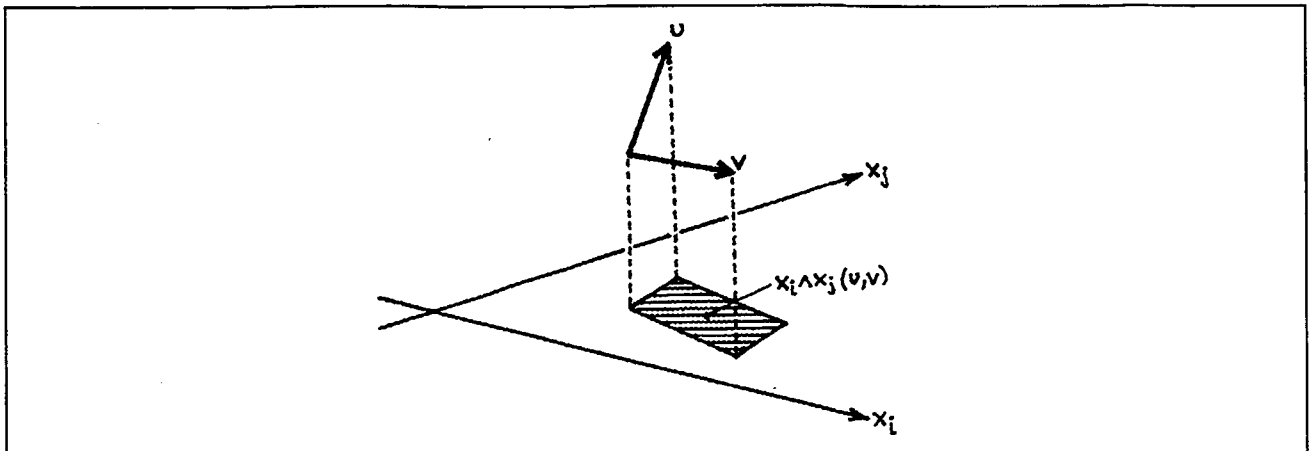
lig det orienterede areal (dvs. arealet udstyret med et fortegn, der afhænger af de to vektorers indbyrdes orientering) af det parallelogram, der udspændes af de to vektorer. Ved i \mathbb{R}^n at betragte det ydre produkt af to koordinatfunktioner $x_i \wedge x_j$ og to vektorer $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, fås ifølge definitionen af ydre produkt

$$x_i \wedge x_j(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \begin{vmatrix} x_i(\mathbf{u}) & x_i(\mathbf{v}) \\ x_j(\mathbf{u}) & x_j(\mathbf{v}) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} u_i & v_i \\ u_j & v_j \end{vmatrix}. \quad (3.18)$$

Dette er det orienterede areal af det parallelogram, som \mathbf{u}, \mathbf{v} vil udspænde i x_i, x_j - planen under en projektion parallel med de øvrige akser.

Da en 2-form altid kan skrives på formen (3.13), er en 2-form altså generelt en "vægtet" sum¹³ af arealer af parallelogrammer udspændt ved parallelprojektioner af to vektorer på x_i, x_j -planerne.

¹³ Hvor a_{ij} (jvf formel 3.13) er vægtningen.



Figur 3.1: Geometrisk betydning af 2-form

Den geometriske betydning af en k -form er tilsvarende summen af de generaliserede k -dimensionale orienterede volumener af alle de k -dimensionale parallellepipeda, som opstår ved parallelprojektioner af k vektorer på alle de k -dimensionale koordinatrum (dvs. de underrom, som er frembragt af k basisvektorer).

Differential k -former

Definition 3.19: En differential k -form ω_x^k på et vektorrum E i et punkt $x \in E$ er en k -form på tangentrummet TE_x , $\omega_x^k: (TE_x)^k \rightarrow \mathbb{R}$, som er differentiabel med hensyn til x .

Da koordinatfunktionerne dx_i er 1-former på TE_x , gælder som ovenfor, at 2-formerne $dx_i \wedge dx_j$ (hvor $i < j$) er en basis i rummet af 2-former på TE_x . I ethvert punkt $x \in E$ kan en differential 2-form ω_x^2 altså skrives som en linearkombination af formerne $dx_i \wedge dx_j$, hvor koefficienterne a_{ij} er glatte funktioner af (x_1, \dots, x_n) ¹⁴

$$\omega^2 = \sum_{i < j} a_{ij}(\mathbf{x}) dx_i \wedge dx_j. \quad (3.20)$$

For differential k -former gælder tilsvarende, at de kan skrives som linearkombinationer af k -formerne $dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$.

$$\omega_x^k = \sum_{i_1, \dots, i_k} a_{i_1, \dots, i_k}(x_1, \dots, x_n) dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}, \quad (3.21)$$

hvor $a_{i_1, \dots, i_k}: E \rightarrow \mathbb{R}$ er glatte funktioner, og $i_1 < \dots < i_k$.

¹⁴ Det kan vises at $a_{ij}(x) = \omega_x^2(e_i, e_j)$

3.2 Integration af former

Integration

For en differential k -form ω^k på \mathbb{R}^k , er der kun én permutation af tallene i_1, \dots, i_k , hvor $i_1 < \dots < i_k$. Derfor kan en differential k -form på \mathbb{R}^k skrives som

$$\omega^k = a(x_1, \dots, x_k) dx_1 \wedge \dots \wedge dx_k, \quad (3.22)$$

hvor a er en glat funktion, $a: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$.

Lad D være et konvekst begrænset polyeder¹⁵ i \mathbb{R}^k . Per definition er integralet af formen ω^k på D integralet af k -te orden af funktionen a i (3.22).

$$\int_D \omega^k = \int_D a(\mathbf{x}) dx_1 \dots dx_k. \quad (3.23)$$

Ved hjælp af dette kan integration af k -former i \mathbb{R}^n , hvor $n > k$, defineres. Lad S være et k -dimensionalt legeme (en mangfoldighed) i \mathbb{R}^n , som er givet ved en parameterfremstilling

$$\mathbf{X}: D \subseteq \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n. \quad (3.24)$$

Lad ω^k være en k -form på \mathbb{R}^n givet ved

$$\omega^k = \sum_{i_1, \dots, i_k} a_{i_1, \dots, i_k}(x_1, \dots, x_n) dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}. \quad (3.25)$$

Parameterfremstillingen \mathbf{X} giver anledning til en k -form $\mathbf{X}^* \omega^k$ på \mathbb{R}^k givet ved

$$(\mathbf{X}^* \omega^k)(\xi_1, \dots, \xi_k) = \omega^k(D\mathbf{X}(\xi_1), \dots, D\mathbf{X}(\xi_k)), \quad (3.26)$$

hvor $\xi_1, \dots, \xi_k \in \mathbb{R}^k$ og $D\mathbf{X}$ er differentialen af \mathbf{X} . Skævsymmetri og linearitet for $\mathbf{X}^* \omega^k$ følger umiddelbart af de samme egenskaber for ω^k .

Integralet af ω^k på S kan nu defineres ved

$$\int_S \omega^k = \int_D \mathbf{X}^* \omega^k. \quad (3.27)$$

I det følgende vil integration over randen af en flade S blive anvendt. Konstruktionen af randen for S kræver en afbildning af randen af D over på randen af S , samt en orientering. Hermed muliggøres integration "rundt om" S , når der desuden tages højde for ikke differentiable "hjørner" på randen af S . En nærmere redegørelse for hvordan dette gøres findes i [1]. I det følgende betegnes randen af en flade S med ∂S .

¹⁵ Dette anføres uden begrundelse i [1], men er muligvis ikke en nødvendig betingelse for det følgende.

3.3 Stokes lemma

Ydre afledet

Definition 3.28: Lad ω være en 1-form givet ved

$$\omega = \sum_i a_i(\mathbf{x}) dx_i. \quad (3.29)$$

Den ydre afledede $d\omega$ er per definition givet ved 2-formen

$$d\omega = \sum_i Da_i \wedge dx_i, \quad (3.30)$$

hvor Da_i er differentialet af a_i betragtet som en 1-form (jvf. 1.18).

Stokes formel

Ved hjælp af den ydre afledede kan man vise Newton-Leibniz-Gauss-Green-Ostrogradskii-Stokes-Poincare formelen¹⁶ (i daglig tale Stokes formel)

$$\int_{\partial S} \omega = \int_S d\omega, \quad (3.31)$$

som siger, at integralet af en 1-form ω over randen af en mængde S er lig integralet af den ydre afledede af ω , $d\omega$, over mængden S . Et generelt bevis for denne sætning findes i [1]. Formlen bruges til at vise Stokes lemma.

Af Stokes lemma følger væsentlige resultater om Hamilton-mekanik, hvoraf igen invariante integraler følger.

Stokes Lemma

Før Stokes lemma opstilles, er følgende sætning nyttig:

Sætning 3.32: Lad ω^2 være en 2-form på det uligedimensionale vektorrum \mathbf{R}^{2n+1} . Da eksisterer der en vektor $\xi \neq 0$ således at

$$\omega^2(\xi, \eta) = 0, \quad (3.33)$$

for alle $\eta \in \mathbf{R}^{2n+1}$.

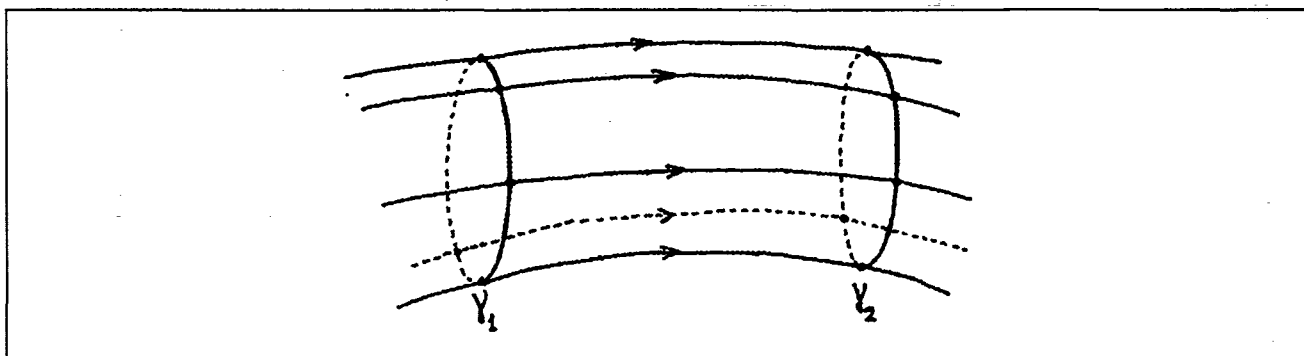
Denne sætning følger af skævsymmetrien af ω^2 , og svarer iøvrigt til at matricen A (formel (3.7)) har 0 som egenværdi, og ξ kan vælges som egenvektor til egenværdien 0.

¹⁶ Jvf [1] s. 192

Vektoren ξ kaldes en nulvektor. Nulvektorerne til ω^2 danner et lineært underrum i \mathbb{R}^{2n+1} . Formen ω^2 kaldes ikke-singulær hvis dette underrum har minimal rang (dvs. 1 i det uligedimensionale tilfælde, og 0 i det ligedimensionale).

Hvis der oprindeligt var givet en 1-form ω^1 på \mathbb{R}^{2n+1} , ville der til 2-formen $d\omega^1$ på samme måde være givet et nulrum i tangentrummet $T\mathbb{R}^{2n+1}$. Antag at $d\omega^1$ er ikke-singulær. Da ligger de tilhørende nulvektorer på en linie. Dennes retning (som kan repræsenteres ved en vektor) er entydigt bestemt, og kaldes vortex-retningen for ω^1 . På denne måde danner vortex-retningerne et vektorfelt på \mathbb{R}^{2n+1} . Løsningerne til dette vektorfelt kaldes vortex-linier til ω^1 .

Lad γ være en lukket kurve i \mathbb{R}^{2n+1} . De vortex-linier der går ud fra γ danner et "vortex-rør"



Figur 3.2: Stokes lemma

Sætning 3.34 (Stokes lemma): Integralerne af en 1-form ω^1 , langs 2 vilkårlige lukkede kurver γ_1 og γ_2 , som giver anledning til det samme vortex-rør, er det samme

$$\oint_{\gamma_1} \omega^1 = \oint_{\gamma_2} \omega^1. \quad (3.35)$$

Ved hjælp af Stokes formel og definitionen af vortex-linier fås Stokes lemma af følgende:

$$\oint_{\gamma_1} \omega^1 - \oint_{\gamma_2} \omega^1 = \int_{\partial\sigma} \omega^1 = \int_{\sigma} d\omega^1 = 0, \quad (3.36)$$

når $\gamma_1 - \gamma_2 = \partial\sigma$ ¹⁷. Det sidste lighedstegn følger af at $d\omega^1$ er nul på to vektorer, der begge er tangent til vortex-røret. Dette følger af lineariteten og skævsymmetrien af $d\omega^1$ og af at de to vektorer ligger i en plan fælles med vortex-retningen.

¹⁷ For en forklaring på notationen $\gamma_1 - \gamma_2$, se [1].

Kapitel 4: Hamilton-mekanik på symplektiske rum

Stokes lemma bruges i dette kapitel til at vise, at et Hamilton-faseflow bevarer en symplektisk form, og at dette svarer til eksistens af invariante integraler. For at kunne vise dette, defineres en såkaldt kanonisk symplektisk form, som derefter udnyttes til at konstruere et Hamilton-vektorfelt.

4.1 Symplektiske former

Definition 4.1: En symplektisk form ω på et vektorrum F er en differential 2-form, der er ikke-degenereret, dvs. for et vilkårligt $\mathbf{x} \in F$ gælder

$$\forall \mathbf{f}^0 \neq 0 \exists \mathbf{f}: \omega(\mathbf{f}^0, \mathbf{f}) \neq 0, \quad (4.2)$$

hvor $\mathbf{f}, \mathbf{f}^0 \in TF_{\mathbf{x}}$.

Ved et symplektisk rum forstås et vektorrum udstyret med en symplektisk form.

Af sætning (3.32) ses, at hvis der skal eksistere en symplektisk form på F , skal F være lighedimensional.

Lad nu F være et lighedimensionalt vektorrum med dimension $2n$. Da kan F skrives som det Cartesiske produkt af et vektorrum E med dets dualrum $F = E \times E^*$ [9]. Et element $\mathbf{f} \in F$ er da på formen $\mathbf{f} = (\mathbf{v}, \mathbf{w})$, hvor $\mathbf{v} \in E$ og $\mathbf{w} \in E^*$ (Denne konstruktion svarer nøje til definitionen af faserum (afsnit 2.3)).

Lad $\mathbf{f} = (\mathbf{v}, \mathbf{w})$ og $\mathbf{f}^0 = (\mathbf{v}^0, \mathbf{w}^0)$ være to vektorer i F . En symplektisk form kan da defineres ved

$$\omega_0(\mathbf{f}, \mathbf{f}^0) = \mathbf{w}^0(\mathbf{v}) - \mathbf{w}(\mathbf{v}^0). \quad (4.3)$$

Denne definition afhænger ikke af valget af basis for E , hvilket betyder at ω_0 er en "naturlig" symplektisk form (i det følgende kaldet den kanoniske symplektiske form) på F .

Vælges en basis for E fås ω_0 , ved hjælp af den inducerede basis på E^* på koordinatform til

$$\omega_0((\mathbf{v}, \mathbf{w}), (\mathbf{v}^0, \mathbf{w}^0)) = \sum_i w_i^0 v_i - \sum_i w_i v_i^0. \quad (4.4)$$

Det kan vises, at der til enhver symplektisk form, eksisterer en basis i E , således at den symplektiske form ω på $F = E \times E^*$, ved hjælp af den inducerede basis i E^* , kan skrives på ovennævnte form (Darboux' teorem).

Udtrykt i denne basis, kan enhver symplektisk form ω_0 skrives på matrixform som

$$\omega_0(\mathbf{f}, \mathbf{f}^0) = \mathbf{f}^T \mathbf{J} \mathbf{f}^0, \quad (4.5)$$

hvor \mathbf{J} er en $2n \times 2n$ matrix

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{E} \\ -\mathbf{E} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

$\mathbf{0}$ er $n \times n$ nulmatricen og \mathbf{E} er $n \times n$ enhedsmatricen. (Ved brug af koordinater ses at (4.5) giver højre side i (4.4)).

4.2 Konstruktion af Hamilton-vektorfeltet

Lad F være et $2n$ -dimensionalt vektorrum udstyret med en symplektisk form ω

$$\omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{v}, \quad (4.7)$$

for alle $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \text{TF}_x$, hvor $x \in F$ er et vilkårligt punkt (jvf. (3.7)).

Til enhver vilkårlig, men fastholdt, vektor $\mathbf{u} \in \text{TF}_x$ defineres en 1-form $\phi_u: \text{TF}_x \rightarrow \mathbf{R}$ ved

$$\phi_u(\mathbf{v}) = \omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}). \quad (4.8)$$

Da ϕ_u er en 1-form på TF_x tilhører ϕ_u kotangentrummet $(\text{TF}_x)^*$. Heraf kan der nu defineres en afbildning $\phi: \text{TF}_x \rightarrow (\text{TF}_x)^*$, som afbilder en vektor \mathbf{u} ind i den tilhørende 1-form ϕ_u :

$$\phi(\mathbf{u}) = \phi_u = \omega(\mathbf{u}, \cdot). \quad (4.9)$$

Ved at udnytte at ω er bilinear og ikke-degenereret kan det vises at ϕ er en isomorfi, og dermed har en invers ϕ^{-1} . Den inverse afbildning $\phi^{-1}: (\text{TF}_x)^* \rightarrow \text{TF}_x$ fører en 1-form på TF_x ind i en tangentvektor.

Lad U være en åben delmængde af F , og $H: U \rightarrow \mathbf{R}$ være en vilkårlig C^2 -funktion på U . Med DH_x betegnes differentialet H i et punkt $x \in U$. Differentialet DH_x opfattes her som en 1-form på TF_x (jvf. formel (1.18)).

Definition 4.10: C^1 -vektorfeltet \mathbf{X}_H givet ved

$$\mathbf{X}_H(\mathbf{x}) = \phi^{-1}(DH_x) \quad (4.11)$$

kaldes et Hamilton-vektorfelt, og funktionen H kaldes Hamilton-funktionen.

Ved at vælge basis således at matricen \mathbf{A} i (4.7) er lig \mathbf{J} ¹⁸, (svarende til at anvende den symplektiske form ω_0 , som er defineret i (4.3)), giver vektorfeltet \mathbf{X}_H anledning til de kanoniske ligninger. Dette kan vises ved at opsplutte F i det Cartesiske produkt af et vektorrum E med dets dualrum E^* . Et punkt $\mathbf{x} \in F$ kan da skrives som $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ hvor $\mathbf{q} \in E$ og $\mathbf{p} \in E^*$.

Hvis de generaliserede koordinater $(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ anvendes på F , kan DH_x skrives som

¹⁸ Hvilket altid er muligt, jvf. Darboux' teorem (afsnit 4.1).

$$DH_{(q,p)} = \sum_1^N \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_1^N \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i. \quad (4.12)$$

Idet der gælder at $\phi(\mathbf{X}_H) = DH_x$, er

$$\omega(\mathbf{X}_H, \mathbf{v}) = DH_x(\mathbf{v}) \quad (4.13)$$

for alle $\mathbf{v} \in TF_x$.

Ved at sætte koordinatudtrykket for ω_0

$$\omega_0(\mathbf{X}_H, \mathbf{v}) = \mathbf{X}_H^T \mathbf{J} \mathbf{v}, \quad (4.14)$$

hvor $\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{E} \\ -\mathbf{E} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$,

ind i (4.13), benytte udtrykket (4.12) for DH_x , sætte $\mathbf{v} = (dq, dp)$ (hvor dq, dp opfattes som basis i cotangentrummet $(TF_x)^*$), og isolere \mathbf{X}_H af den herved opnåede ligning, fås vektorfeltet

$$\mathbf{X}_H = \left(\frac{\partial H}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial H}{\partial p_N}, -\frac{\partial H}{\partial q_1}, \dots, -\frac{\partial H}{\partial q_N} \right). \quad (4.15)$$

Dette vektorfelt giver anledning til de kanoniske ligninger

$$\begin{cases} q_i' = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ p_i' = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases} \quad (4.16)$$

At definitionen (4.10) giver anledning til samme bevægelsesligninger som den tidligere definition af Hamilton-funktionen (2.15), betyder at den nye definition er konsistent med den tidligere.

Da \mathbf{X}_H er et C^1 vektorfelt på definitionsmængden for H , opfylder de kanoniske ligninger en lokal Lipschitz-betingelse på denne mængde. Lad nu $\mathbf{x}(t)$ være en løsning til \mathbf{X}_H . Det kan da ved hjælp af definitionen for \mathbf{X}_H og skævsymmetrien af ω vises at

$$\frac{d}{dt} H(\mathbf{x}(t)) = 0. \quad (4.17)$$

H er således en konstant funktion på en løsning over tid, hvilket er i overensstemmelse med den tidligere definition af Hamilton-funktionen som systemets totale energi.

4.3 Bevarelse af den symplektiske struktur

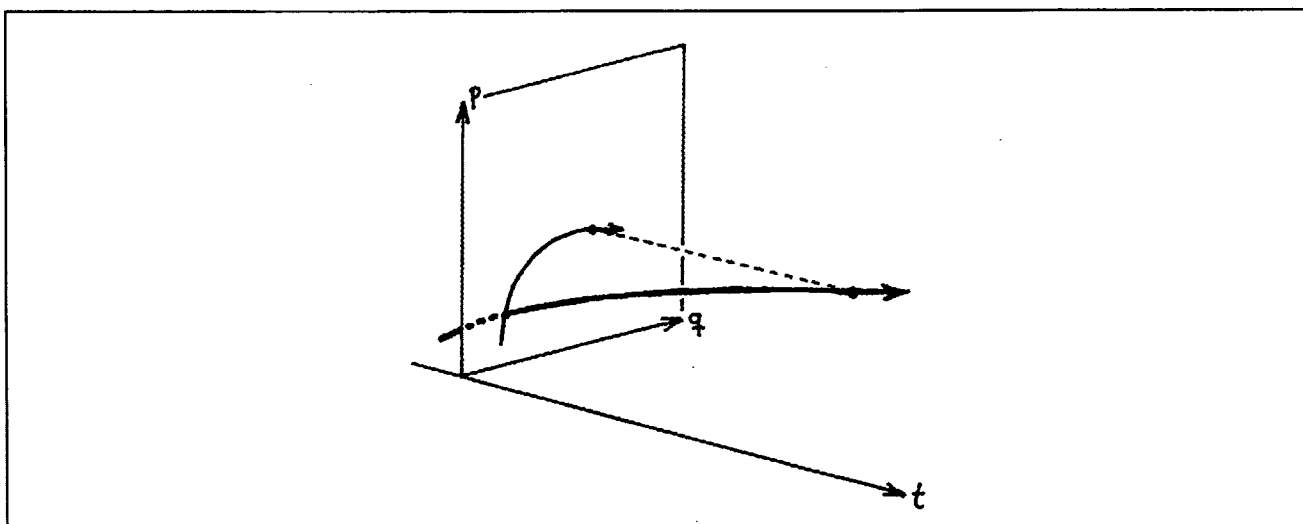
I det følgende betragtes det udvidede faserum (p, q, t) , som er uligedimensionalt. Her er tiden taget med som dimension i faserummet, hvilket i princippet betyder, at der er føjet en ekstra differentialligning: $t' = 1$, til de kanoniske ligninger, svarende til at Hamilton-vektorfeltet bliver

$$(-\mathbf{H}_q, \mathbf{H}_p, 1), \quad (4.18)$$

hvor

$$\mathbf{H}_q = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \text{ og } \mathbf{H}_p = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}.$$

Ved at projicere løsningskurverne til dette vektorfelt ind på den $2n$ -dimensionale p, q -plan fås løsningskurver til det almindelige $2n$ -dimensionale Hamilton-system.



Figur 4.1: Det udvidede faserum

På det udvidede faserum kan der defineres en differential 1-form ved

$$\omega^1 = pdq - Hdt, \quad pdq = p_1dq_1 + \dots + p_ndq_n. \quad (4.19)$$

Denne form er interessant fordi dens vortex-linier er løsningskurver til det udvidede Hamilton-vektorfelt (4.18). Dette formuleres som følgende sætning:

Sætning 4.20: Vortex-linierne i det $2n+1$ -dimensionale faserum til formen (4.19) har en bijektiv projektion på t -aksen, dvs. der findes funktioner $p=p(t)$ og $q=q(t)$, som tilfredsstiller de kanoniske ligninger.

Sætningen ses på følgende måde: ved at opskrive DH_x som (4.12), og udnytte at det ydre produkt er distributiv¹⁹, kan $d\omega^1$ skrives som

$$d\omega^1 = \sum \left(dp_i \wedge dq_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \wedge dt - \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i \wedge dt \right). \quad (4.21)$$

Ved hjælp af lidt lineær algebra og definitionen på ydre produkt, får matricen for 2-formen $d\omega^1$ i p, q, t koordinater formen

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{E} & \mathbf{H}_p \\ \mathbf{E} & \mathbf{0} & \mathbf{H}_q \\ -\mathbf{H}_p^T & -\mathbf{H}_q^T & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Rangen af denne $2n+1$ -dimensionale matrix er $2n$ (det øverste venstre hjørne er ikke-degenereret). Da er $d\omega^1$ ikke-singulær, og har (jvf. sætning 3.32) en linie som vortex-retning. Ved multiplikation af vektoren $(-\mathbf{H}_q, \mathbf{H}_p, 1)$ med A ses, at den er egenvektor med egen værdi 0 . Dvs. vortex-retningen for formen $\omega^1 = pdq - Hdt$, er vektoren $(-\mathbf{H}_q, \mathbf{H}_p, 1)$. Heraf følger, at der er en bijektion på tidsaksen, således at vortex-linierne kan opfattes som en funktion af tiden.

Da vortex-linierne til ω^1 (se side 28) er defineret som løsninger til vektorfeltet givet ved vortex-retningerne for ω^1 , fås nu at vortex-linierne for ω^1 er løsninger til vektorfeltet (4.18).

Ved brug af Stokes lemma fås nu direkte:

Sætning 4.23: Antag at to lukkede kurver γ_1 og γ_2 giver anledning til det samme rør af trajektorier til de kanoniske ligninger i det $2n+1$ -dimensionale faserum (dvs. til vortexlinier til $\omega^1 = pdq - Hdt$). Da er integralerne over dem det samme

$$\oint_{\gamma_1} pdq - Hdt = \oint_{\gamma_2} pdq - Hdt. \quad (4.24)$$

I det følgende betragtes kurver, der ligger i en $2n$ -dimensional plan hvor $t = 0$. Langs sådanne kurver er $dt = 0$, og ovenstående sætning giver da:

Sætning 4.25: Integralet over lukkede kurver af formen pdq er bevaret af faseflowet

$$\oint_{\gamma} pdq = \oint_{g_{t_0}^{t_1} \gamma} pdq. \quad (4.26)$$

Dette ses på følgende måde: lad g_t betegne faseflowet for de kanoniske ligninger. Da er $g_{t_0}^{t_1}$ transformationen af faserummet fra tiden t_0 til t_1 . Lad γ være en lukket kurve i $\mathbb{R}^{2n} \subset \mathbb{R}^{2n+1}$ (svarende

¹⁹ Se [1]

til den $2n$ -dimensionale plan $t = t_0$). Da faseflowet er en diffeomorfi er $g_{t_0}^1 \gamma$ også en lukket kurve. De to kurver indholder de samme trajektorier i \mathbb{R}^{2n+1} . Da $dt = 0$ på begge kurver fås det ønskede.

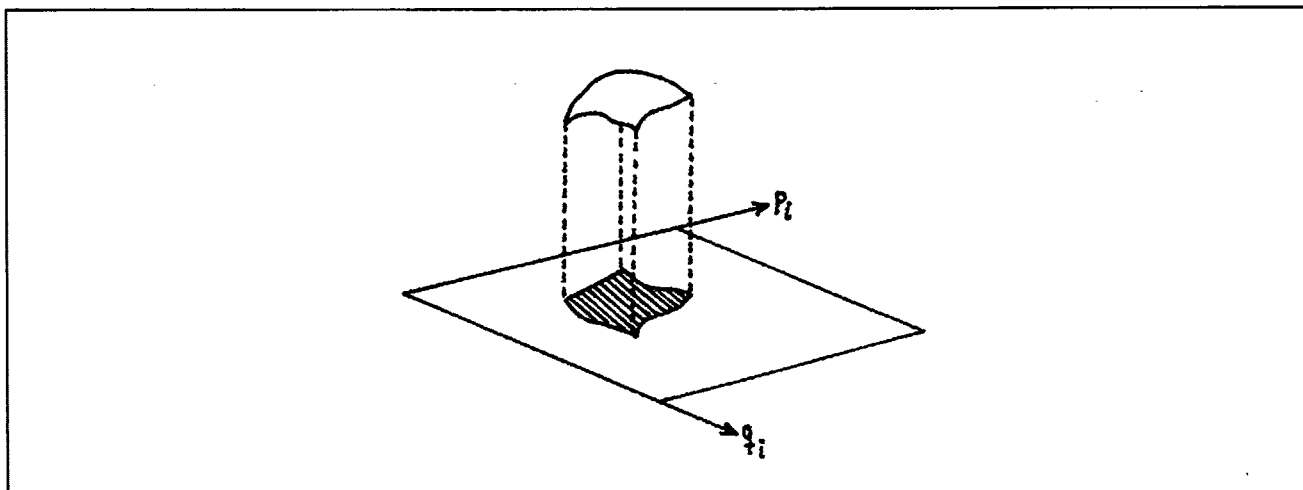
Denne sætning kan tolkes geometrisk: lad σ være en flade i det $2n$ -dimensionale faserum, og lad $\gamma = \partial\sigma$. Af Stokes formel og ovenstående sætning fås

$$\int_{\sigma} \sum dp_i \wedge dq_i = \int_{\gamma} \sum p_i dq_i = \int_{g_{t_0}^1 \gamma} \sum p_i dq_i = \int_{g_{t_0}^1 \sigma} \sum dp_i \wedge dq_i. \quad (4.27)$$

Dette kan (jvf. 3.18) udtrykkes som:

Sætning 4.28: Faseflowet bevarer summen af orienterede arealer af projektioner af en flade på de n -koordinatplaner (p_i, q_i) , dvs

$$\int_{\sigma} \sum dp_i \wedge dq_i = \int_{g_{t_0}^1 \sigma} \sum dp_i \wedge dq_i. \quad (4.29)$$



Figur 4.2: Projektioner af en flade på p, q -planerne

Af definitionen på integralet af en differentialform (3.27) følger den alternative udformning af denne formel (idet $g_{t_0}^1$ opfattes som parameterfremstillingen i (3.26))

$$(g_{t_0}^1)^* (dp \wedge dq) = dp \wedge dq, \text{ hvor } dp \wedge dq = \sum dp_i \wedge dq_i. \quad (4.30)$$

Differential 2-formen $dp \wedge dq$ på \mathbb{R}^{2n} er lig med den kanoniske symplektiske form ω_0 , hvilket følger af

$$(dp \wedge dq)(\mathbf{f}, \mathbf{f}^0) = \sum_i \begin{vmatrix} dq_i(\mathbf{f}) & dp_i(\mathbf{f}) \\ dq_i(\mathbf{f}^0) & dp_i(\mathbf{f}^0) \end{vmatrix} = \sum_i (w_i^0 v_i - w_i v_i^0) = \omega_0(\mathbf{f}, \mathbf{f}^0), \quad (4.31)$$

hvor $\mathbf{f} = (v_1, \dots, v_n, w_1, \dots, w_n)$ og $\mathbf{f}^0 = (v_1^0, \dots, v_n^0, w_1^0, \dots, w_n^0)$ er to vilkårlige vektorer i tangentrummet \mathbb{R}_x^{2n} (på samme måde som i 4.4).

Fra sætning 4.25 og frem er det på forskellig måde blevet udtrykt, hvad det vil sige, at et Hamilton-faseflow bevarer den symplektiske struktur. Af (4.31) fremgår, at den kanoniske symplektiske form altid vil være bevaret. Da en vilkårlig symplektisk form altid via basisskifte kan skrives som den kanoniske symplektiske form, er enhver symplektisk form således bevaret af et Hamilton-faseflow. Af sætning 4.28 fremgår at dette svarer til en form for arealbevarelse.

4.4 Poincaré's invariante integraler

Af definitionen på integration af former følger

$$\int_{\sigma} dp_i \wedge dq_i = \int_{\sigma} dp_i dq_i. \quad (4.32)$$

Ved at anvende dette på begge sider af (4.29) fås

$$\int_{\sigma} \sum dp_i dq_i = \int_{g_{t_0}^1 \sigma} \sum dp_i dq_i. \quad (4.33)$$

Dette er et invariant integral (defineret i afsnit 2.5), som er identisk med Poincaré's 2. ordens invariante integral (2.24). Udsagnet om at faseflowet bevarer den symplektiske form $dp \wedge dq$, er altså ækvivalent med Poincaré's invariante integral (2.24).

Det kan vises (ved direkte udregning) at det ydre produkt af 2-formen $dp \wedge dq$ med sig selv, er proportionalt med følgende 4-form²⁰

$$\omega^4 = \sum_{i < j} dp_i \wedge dp_j \wedge dq_i \wedge dq_j. \quad (4.34)$$

Tilsvarende er den 2k-form, der fås ved at multiplicere $dp \wedge dq$ med sig selv k gange, proportional med

$$\omega^{2k} = \sum dp_{i_1} \wedge \dots \wedge dp_{i_k} \wedge dq_{i_1} \wedge \dots \wedge dq_{i_k}. \quad (4.35)$$

Ved at benytte (4.30) og (4.29) fås

$$(g_{t_0}^1)^*(\omega^4) = \omega^4. \quad (4.36)$$

$$(g_{t_0}^1)^*(\omega^{2k}) = \omega^{2k}. \quad (4.37)$$

²⁰ Ved udregning ses at proportionalitetskonstanten er -2

Dette betyder at faseflowet bevarer k-formerne $\omega^4, \dots, \omega^{2n}$, hvilket svarer til Poincaré's invariante integraler af højere orden (2.25). Bevarelsen af ω^{2n} svarer til at faseflowet bevarer det generaliserede volumen i faserummet (For to dimensioner kaldes dette for Liouvilles teorem).

Heraf ses, at den egenskab ved de kanoniske ligninger, som Poincaré opdager, og formulerer som invariante integraler, følger matematisk af den generelle formulering af Hamilton-mekanik ud fra symplektiske former. Denne egenskab udnyttes i symplektiske algoritmer, og er i stand til at forklare nogle af de problemer, der har været (se afsnit 5.4) med simulering af Hamilton-systemer.

Kapitel 5: Symplektiske algoritmer

5.1 Numerisk integration

Lad et differentiallygningsystem i n variable x_1, \dots, x_n være givet ved:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \dots, x_n) \quad , \quad i = 1, \dots, n. \quad (5.1)$$

Hvis differentiallygningsystemet ikke kan løses ad matematisk vej, søger man ofte indsigt i løsningernes opførsel ved brug af numeriske metoder. Dette gøres almindeligvis ved at finde en følge af værdier for systemets variable til tidspunkter t_0, t_1, t_2, \dots , hvor tidsrummet mellem to tidspunkter kan være fast eller variabelt. I det følgende betragtes kun algoritmer med fast tidsskridt - benævnt h . Systemets variable antages at være kendt til tiden t_0 . Værdier af de variable til efterfølgende tidspunkter findes da af følgende rekursive formel:

$$\mathbf{x}^{i+1} = g(\mathbf{x}^i, \mathbf{x}^{i-1}, \dots, \mathbf{x}^{i-k+1}, t), \quad (5.2)$$

hvor \mathbf{x}^i betegner alle systemets variable (og ikke kun den i 'te) til tiden t_i . I formelen indgår værdier fra k forudgående tidskridt - man siger at algoritmen er af k 'te orden. I det følgende vil der kun blive betragte førsteordens algoritmer for autonome systemer²¹, hvor g kun afhænger af \mathbf{x}^i

$$\mathbf{x}^{i+1} = g(\mathbf{x}^i). \quad (5.3)$$

En meget simpel førsteordens algoritme (den såkaldte Euler-metode) fås ved at udnytte approksimationen

$$\mathbf{x}(t+h) = \mathbf{x}(t) + \frac{d\mathbf{x}}{dt} h. \quad (5.4)$$

For det ovenævnte system af differentiallyninger (5.1) fås følgende førsteordens udtryk for funktionen g

$$\mathbf{x}^{k+1} = g(\mathbf{x}^k) = \mathbf{x}^k + f(\mathbf{x}^k)h. \quad (5.5)$$

Normalt måles nøjagtigheden af en integrationsalgoritme på, hvor præcist de enkelte tidskridt følger den eksakte løsning. Generelt gælder at præcisionen øges med kortere tidskridt, og at højereordens metoder er mere præcise end lavereordens.

En algoritme kan konstrueres så transformationen fra et tidspunkt til det næste bevarer den symplektiske struktur. En sådan transformation kaldes kanonisk.

²¹ Der findes højere ordens symplektiske algoritmer se f.eks. [19] og [24].

5.2 Kanoniske transformationer

Definition 5.6: En kanonisk transformation er en afbildning g på faserummet (q,p) som opfylder

$$\oint_{\gamma} pdq = \oint_{g\gamma} pdq, \quad (5.7)$$

for alle lukkede kurver γ , eller alternativt

$$g^*\omega = \omega, \quad (5.8)$$

hvor ω er en symplektisk form på faserummet.

Ovenstående integrale er identisk med det invariante integrale (4.26), og afbildningerne g^t i et Hamilton-faseflow er derfor kanoniske transformationer. I det følgende skitseres hvorfor det omvendte, at enhver kanonisk transformation er faseflowet for et Hamilton-system, også gælder.

Lad der være givet en kanonisk transformation g_ε af faserummet, $g_\varepsilon: F \rightarrow F$, hvor $\varepsilon \in \mathbb{R}$ er en parameter til transformationen, og lad (Q,P) være billedet af (q,p) ved g_ε , dvs.

$$g_\varepsilon(q,p) = (Q,P). \quad (5.9)$$

Antag at g_ε er differentiabel med hensyn til ε , og at g_ε er lig med den identiske afbildning, når $\varepsilon = 0$, dvs

$$g_0(q,p) = (q,p). \quad (5.10)$$

Det kan så vises (Se [1] kap 9 afsnit 48) at der findes en glat funktion $S_\varepsilon: F \rightarrow \mathbb{R}$, der afhænger af ε , således at g_ε (via (5.9)) er givet ved

$$Q_i = q_i + \varepsilon \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial P_i} \quad (5.11)$$

$$P_i = p_i - \varepsilon \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial q_i}.$$

(Da der differentieres med hensyn til det "nye" punkt P_i forudsættes, at S kan skrives som en funktion af (q_i, P_i)).

Omvendt kan det vises, at hvis S_ε er en given funktion, vil g_ε givet ved (5.11) være en kanonisk transformation [1].

Dette resultat skal nu anvendes til to forskellige ting.

Lad S_ε være givet således at

$$S_0(q,p) = H(q,p), \quad (5.12)$$

hvor H er en Hamilton-funktion (dvs. en vilkårlig C^2 -funktion (jvf. afsnit 4.2)). Det antages at S_ε er differentiabel med hensyn til ε . Den afbildning g_ε , som er givet ved S_ε og (5.11), opfattes nu som funktionen g i en numerisk integrationsalgoritme (jvf. (5.3)), hvor ε er længden af et tidskridt. (q, p) og (Q, P) kan da opfattes som værdier af systemets variable til tiderne t og $t+\varepsilon$

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(t), & p_i &= p_i(t), \\ Q_i &= q_i(t+\varepsilon), & P_i &= p_i(t+\varepsilon) \end{aligned} \tag{5.13}$$

af ligningerne (5.11) fås ved indsættelse

$$\begin{aligned} \frac{q_i(t+\varepsilon) - q_i(t)}{(t+\varepsilon) - t} &= \frac{Q_i - q_i}{\varepsilon} = \frac{\partial S_\varepsilon}{\partial P_i} \\ \frac{p_i(t+\varepsilon) - p_i(t)}{(t+\varepsilon) - t} &= \frac{P_i - p_i}{\varepsilon} = -\frac{\partial S_\varepsilon}{\partial q_i}, \end{aligned} \tag{5.14}$$

ved at lade ε gå mod 0, fås de kanoniske ligninger i grænsen, idet venstresiderne går mod q' og p' , P går mod p , og S_ε går mod H

$$\begin{aligned} q'_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ p'_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \tag{5.15}$$

Det vil sige, at jo mindre ε (dvs. tidskridtet) er i en integrationsalgoritme, desto tættere vil det beregnede "trajektorie" ligge på løsningen til de kanoniske ligninger.

Ligningerne (5.11) kan desuden anvendes til at vise, at en vilkårlig 1-parametergruppe af kanoniske diffeomorfier er faseflow for et Hamilton-system. Ved at betragte parameteren ε som tiden t , og lade denne gå mod 0, fås på samme måde som ovenfor at [1]

$$\left. \frac{d}{dt} g^t \right|_{t=0} (q, p) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial q} \right) \tag{5.16}$$

Dvs. g^t er faseflow til et Hamilton-system. Dette betyder at enhver kanonisk transformation er faseflow til et Hamilton-system. Det skal dog bemærkes at dette resultat ikke giver Hamilton-funktionen, men kun viser at den eksisterer.

En integrationsalgoritme, hvor funktionen g er en kanonisk transformation, kaldes en kanonisk eller symplektisk algoritme.

Af ovenstående kan det konkluderes, at i en symplektisk algoritme, vil de fundne værdier være en løsning til et Hamilton-system, selvom dette Hamilton-system ikke nødvendigvis er identisk med det, der simuleres på.

5.3 Symplektiske algoritmer

I det følgende opstilles en simpel test for om en algoritme er symplektisk.

Hvis transformationen g i en algoritme skal være kanonisk, skal den ifølge ovenstående definition (5.6) opfylde

$$(g^* \omega)(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \omega(Dg(\mathbf{u}), Dg(\mathbf{v})) = \omega(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (5.17)$$

hvor Dg er differentiallet af g repræsenteret ved Jacobi-matricen

$$Dg(\mathbf{v}) = \mathbf{A}\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial q_n} & \frac{\partial g_1}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial g_1}{\partial p_n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial g_{2n}}{\partial q_1} & \dots & \frac{\partial g_{2n}}{\partial q_n} & \frac{\partial g_{2n}}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial g_{2n}}{\partial p_n} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{v}. \quad (5.18)$$

Som tidligere set (jvf. 4.5) kan den kanoniske symplektiske form $\omega_0 = dq \wedge dp$ skrives som

$$\omega = \mathbf{u}^T \mathbf{J} \mathbf{v}. \quad (5.19)$$

Ved at kombinere disse to udtryk, fås følgende simple matrixligning, der skal være opfyldt af en symplektisk algoritme

$$\mathbf{A}^T \mathbf{J} \mathbf{A} = \mathbf{J}. \quad (5.20)$$

I litteraturen formuleres kravet til en symplektisk algoritme ofte ved dette udtryk.

5.4 A Horror Story...

I dette afsnit illustreres med et eksempel hvilken forskel anvendelsen af en symplektisk kontra en ikke-symplektisk algoritme *kan* give. Eksemplet stammer fra den i formløbet omtalte artikel [13].

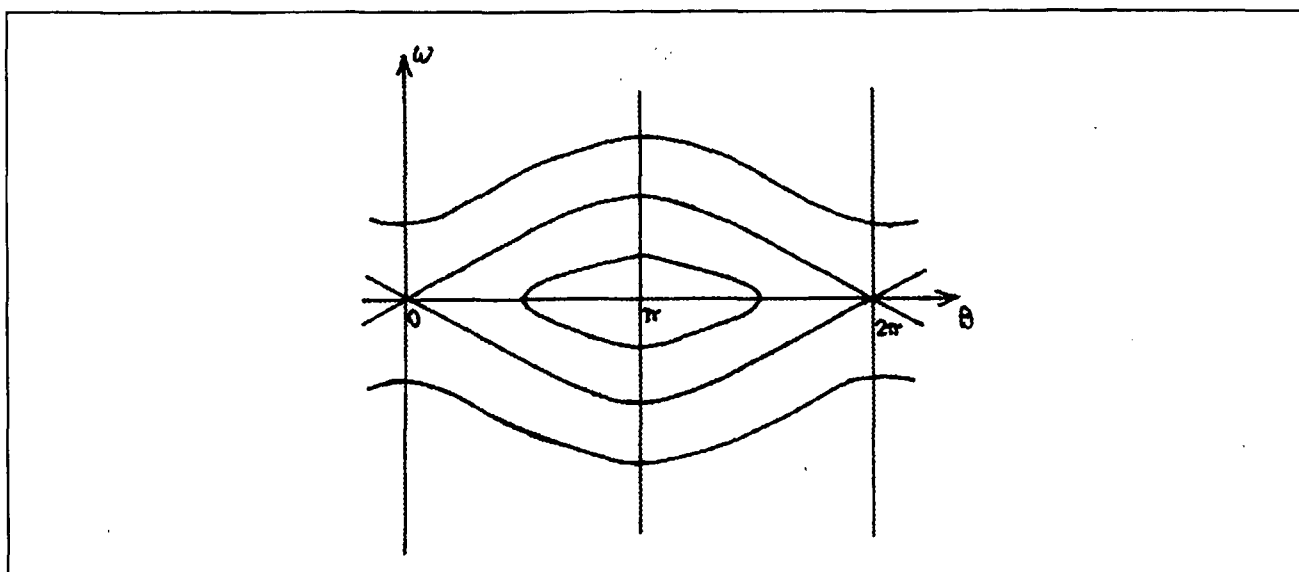
I denne artikel simuleres på et fysisk pendul (som er et Hamilton-system). Systemet kan løses eksakt, og dets løsninger er velkendte og lette at beskrive. Dette giver mulighed for at undersøge hvor "godt" en algoritme håndterer dette system.

Differentialligningerne for pendulet er:

$$\begin{aligned} \theta' &= \omega \\ \omega' &= -K \sin \theta \end{aligned} \quad (5.21)$$

hvor K er en konstant, der afhænger af pendulets længde. θ betegner vinklen mod en lodret line og ω er vinkelhastigheden. Løsningerne har to stationære punkter, dvs. punkter hvor systemet er i hvile: $\theta = \pi$, hvor pendulet hænger lodret ned, og $\theta = 0$, hvor pendulet "står på hovedet". Ved små udsving om $\theta = \pi$ har systemet kun periodiske løsninger, der former sig som lukkede kurver i faserummet

omkring det stationære punkt. Hvis pendulet får mere energi, vil det rotere hele vejen rundt, og igen fås kun periodiske løsninger, der snor sig tværs over faserummet fra $\theta = 0$ til $\theta = 2\pi$.



Figur 5.1: Trajektorier for det fysiske pendul

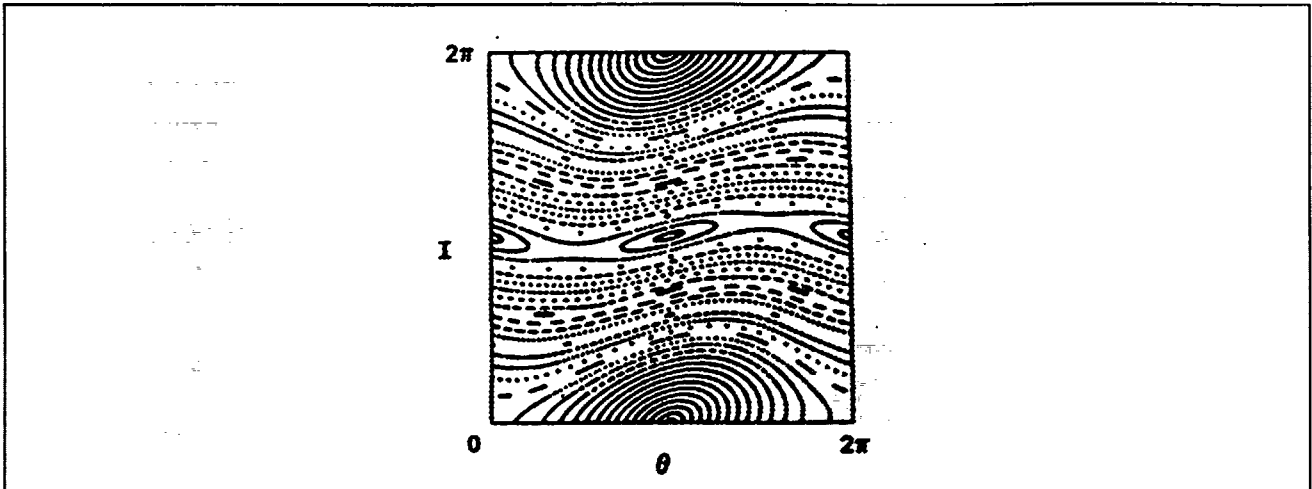
Disse to typer løsninger findes i adskilte områder i faserummet afgrænset af to trajektorier, der går ud fra det stationære punkt ved $\theta = 0$ (såkaldte separatricer).

Den ene integrationsalgoritme, der bliver anvendt, er en lettere modificeret udgave af Euler-metoden nævnt ovenfor - den såkaldte Leap-Frog-algoritme²²

$$\begin{aligned}\omega^{k+1} &= \omega^k + hK \sin \theta^k \\ \theta^{k+1} &= \theta^k + h\omega^{k+1}\end{aligned}\tag{5.22}$$

Ved at plote et antal punkter udregnet ud fra forskellige startværdier og et vist antal tidsskridt frem, fås følgende billede:

²² I denne metode gælder iøvrigt at ω^k betegner værdien af ω til tiden $t_k - h/2$ istedet for til tiden t_k .



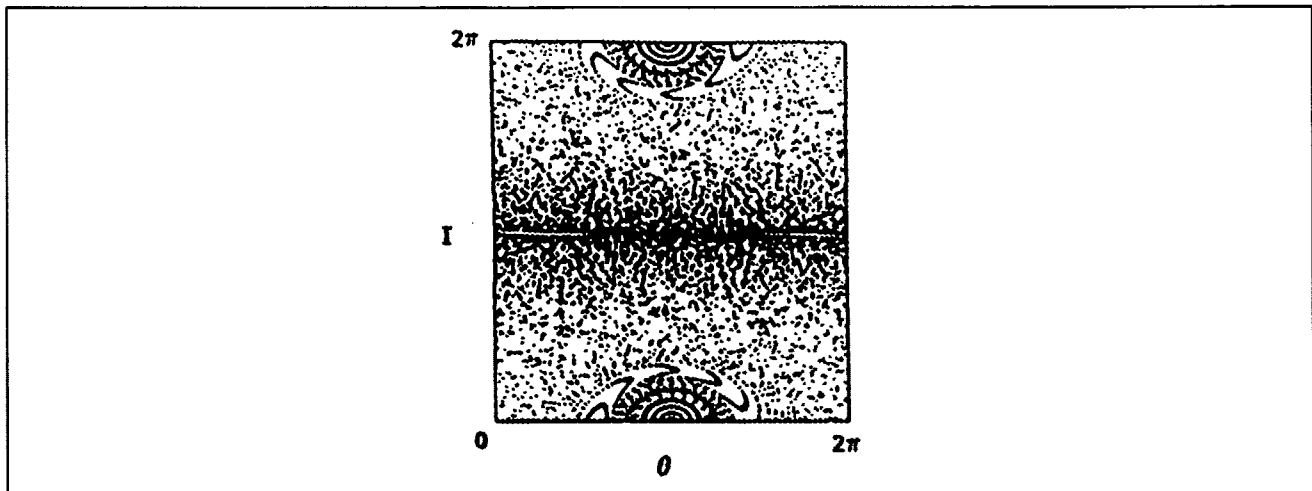
Figur 5.2: Simuleringsresultat for Leap-Frog algoritme

Det ses at den simulerede opførsel i store træk ligner det ovenfor beskrevne.

Den anden metode er en såkaldt prediktor-korrektor-algoritme, der normalt regnes for at være en rimeligt nøjagtig integrationsalgoritme. Pendulet beskrives ved denne metode ved følgende ligninger

$$\begin{aligned}\omega^{k+1} &= \omega^k + \frac{1}{2}Kh(\sin\theta^k + \sin(\theta^k + h\omega^k)) \\ \theta^{k+1} &= \theta^k + \frac{1}{2}h(\omega^{k+1} + \omega^k)\end{aligned}\tag{5.23}$$

Et plot svarende til det ovenstående af et antal simulerede værdier, fundet ved denne metode, ser således ud:



Figur 5.3: Simuleringsresultat for PK-algoritme

De pæne periodiske trajektorier omkring det stationære punkt ved $\theta = \pi$ er nu ganske forsvundet. I stedet (kan det vises) vil alle trajektorier konvergere mod en linie $\omega = \text{konstant}$, svarende til at systemet uanset begyndelsesbetingelsen søger mod en jævn roterende bevægelse, hvilket bestemt ikke er i overensstemmelse med observationer af noget pendul.

5.5 Om valg af algoritme

Ovenstående eksempel, viser hvor galt det kan gå med en ikke-symplektisk algoritme.

De artikler, jeg har læst, kan meget løst inddeles i to grupper. Den ene gruppe sammenligner symplektiske algoritmer med "almindelige" algoritmer ud fra forskellige kriterier. Den anden gruppe søger at udvikle nye og mere præcise (højere ordens) symplektiske algoritmer.

De fleste sammenligninger falder ud til symplektiske algoritmers fordel. Men som det påpeges i [19], er mange af sammenligningerne uretfærdige, idet de sammenligner en symplektisk algoritme med forholdsvis primitive ikke-symplektiske algoritmer. Dette er uretfærdigt, da der findes bedre ikke-symplektiske algoritmer, som kan klare sig udmærket overfor symplektisk algoritmer. Med "klare sig" menes, at de ikke-symplektiske algoritmer giver et lige så "præcist" (eller bedre) resultat, som de symplektiske, når der simuleres over begrænsede tidsrum.

Jeg tror konklusionen på spørgsmålet, om hvorvidt man skal anvende en symplektisk algoritme eller ej til et givet problem, afhænger af to ting: Den ene er den tid, man skal simulere over, og den anden er karakteren af de oplysninger, man ønsker at få ud af simuleringen.

Vil man simulere på solsystemet millioner af år ud i fremtiden for f.eks. at få oplysninger om dets stabilitet, skal man nok vælge en symplektisk algoritme, som vil sikre at man får "løsninger" til et Hamilton-system, der "ligger i nærheden" af det ønskede. Dette skal ses i modsætning til en ikke-symplektisk algoritme, hvor resultatet over et så stort tidsrum vil være meget upræcist på grund af metodefejl.

Vil man derimod regne på f.eks. opsendelse af en rumsonde, der skal observere et kometsammenstød med Jupiter, er det nok vigtigere at regne præcist end at Hamiltonsystemets egenskaber er overholdt. Observation af sammenstødet må kræve præcis viden om, dels hvor og hvornår sammenstødet vil finde sted, og dels om hvor rumsonden skal befinde sig, for at observere det ønskede bedst muligt.

I MD-simuleringer ønsker man ofte at simulere ved en given fysisk tilstand (dvs. samhørende værdier af tryk og temperatur). Dette medfører et ønske om at bevare systemets totale energi. Da molekylebevægelser er hurtige i forhold til ændringer i makroskopiske størrelser, er det ofte nødvendigt at simulere over mange tidsskridt, da tidsskridtets størrelse skal afpasses efter molekylebevægelserne.

Denne kombination af at skulle simulere over lang tid, samtidig med at energien ønskes bevaret, begrundes i sig selv et valg af en symplektisk algoritme. Derudover er de resultater (termodynamiske størrelser), der som oftest beregnes af MD-simuleringer, af statistisk karakter frem for en præcis beskrivelse af de enkelte molekylers bevægelse. Således er der for det meste ikke interesse for konkrete løsningernes opførsel, men derimod i middelværdier over så mange trajektorier som muligt i faserummet. Dette begrundes yderligere valg af en symplektisk algoritme.

Det er muligt at man i løbet af nogle år har symplektiske algoritmer, der kan regne lige så præcist som de ikke-symplektiske algoritmer kan nu. Dette vil selvfølgelig være ønskeligt, da man således kan opnå præcise beregninger, samtidig med at systemegenskaber bevares.

Opsamling

Som det fremgår af kapitel 4, er bevarelse af den symplektiske struktur og Poincaré's invariante integraler to sider af samme sag. Den symplektiske formulering af Hamilton-mekanik kommer historisk set efter Poincaré's arbejde, men er samtidig det teoretiske grundlag for invariante integraler. Poincaré's arbejde med Hamilton-mekanik bygger på matematiske beskrivelser af et fysisk system, mens den symplektiske formulering er en rent matematisk konstruktion, som "indfanger" det oprindelige system.

Ud fra den klare sammenhæng mellem bevarelse af den symplektiske struktur og de invariante integraler, og i et vist omfang ud fra Poincaré's egne kommentarer i [15] mener jeg, at Poincaré's arbejde med 3-legemeproblemet i al væsentlighed indeholder de erkendelser, der ligger til grund for Hamilton-mekanik, som vi betragter den idag. Her tænker jeg specielt på erkendelsen af at Hamilton-systemer bevarer "nogle arealer/volumener" i faserummet. Poincaré udtrykker eksplicit, at et af de invariante integraler bevarer volumen, og det samme følger som en sætning (4.37) i den moderne formulering af Hamilton-mekanik.

Poincaré har, som tidligere bemærket, haft en indflydelse på den måde vi idag behandler dynamiske systemer ved hjælp af computere, men ikke nok med det. Erkendelsen af eksistens af invariante integraler har stor betydning for simuleringer af Hamilton-systemer (og dermed for n -legemeproblemet) via udformningen af algoritmer. På denne måde kan man sige at, at to dele af Poincaré's arbejde via omveje, mødes igen i symplektiske algoritmer. Den ene del er selve metoden med at simulere og betragte differentiaalligningssystemer som dynamiske systemer. Den anden del er forståelsen af, at Hamilton-systemer bevarer en geometrisk struktur, som spiller ind, når vi ønsker at simuleringer skal bevare netop denne egenskab.

Kilder

- og supplerende litteratur

1. V. I. Arnold: *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. (Springer-Verlag, New York 1980).
2. G. D. Birkhoff: *Dynamical Systems*. (Am. Math. Soc., Providence 1979).
3. G. D. Birkhoff: Proof of Poincaré's Geometric Theorem. (Trans. Am. Math. Soc. Vol. 14, No 1, 1913).
4. G. Birkhoff, G.C. Rota: *Ordinary Differential Equations* (Wiley & Sons, New York 1978).
5. H. W. Broer et. al.: *Structures in Dynamics*. (North-Holland Elsevier Science Publ., Amsterdam 1991).
6. F. Fabricius-Bjerre: *Lærebog i geometri I* (Polyteknisk Forlag, Lyngby 1982)
7. P. M. Fitzpatrick: *Principles of Celestial Mechanics*. (Academic Press, New York 1970).
8. V. Lundsgaard Hansen: *Grundbegreber i den moderne analyse* (Matematisk Institut, DTH 1986).
9. M. V. Hirsh, S. Smale: *Differential Equations, Dynamical Systems, and Linear Algebra*. (Academic Press, New York 1974).
10. H. Elbrønd Jensen: *Matematisk Analyse*. (Matematisk Institut, DTH 1984)
11. E. N. Lorenz: *The Essence of Chaos* (UCL Press Ltd. London 1993).
12. R. McLachlan: *The World of Symplectic Space* (New Scientist, March 1994).
13. R. H. Miller: A Horror Story about Integration Methods. (J. Comp. Phys. 93, pp 489 - 476, 1991).
14. I. Peterson: *Newtons Clock - Chaos in the Solar System* (W.H. Freeman & Co. New York 1993).
15. H. Poincaré: *Sur le Probleme des Trois Corps et les Équations de la Dynamique*. (Acta Mathematica 13, 1890).
16. H. Poincaré: *Mécanique Céleste*, vol. 1 - 3. (Gauthier-Villars, Paris 1892 - 1899).
17. H. Poincaré: *Sur un théorème de Géométrie* (Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo, pp 375 - 407, vol 33, Palermo 1912).

18. R. D. Ruth: A Canonical Integration Technique (IEEE Trans. Nucl. Sci., vol 30 , pp 2669 - 2671, 1983).
19. J. M. Sanz - Serna: Symplectic Integrators for Hamiltonian Problems: an Overview. (Acta Numerica, 1991)
20. R. D. Skeel, C. W. Gear: Does Variable Step Size Ruin a Symplectic Integrator? (Physica D, 60, pp 311 - 313, North-Holland Elsevier Science Publ. 1992).
21. W. M. Smart: Spherical Astronomy. (Cambridge University Press, Cambridge 1977).
22. I. Stewart: The Symplectic Revolution. (The Sciences, Vol 30, p 28).
23. D. W. Heermann: Computer Simulation Methods in Theoretical Physics. (Springer-Verlag, Berlin 1990).
24. E. Forest, R. D. Ruth: Fourth-Order Symplectic Integration. (Physica D, 43, pp 105-117, North-Holland Elsevier Science Publ. 1990).

Liste over tidligere udkomne tekster
tilsendes gerne. Henvendelse herom kan
ske til IMFUFA's sekretariat
tlf. 46 75 77 11 lokal 2263

-
- 217/92 "Two papers on APPLICATIONS AND MODELLING
IN THE MATHEMATICS CURRICULUM"
by: Mogens Niss
- 218/92 "A Three-Square Theorem"
by: Lars Kadison
- 219/92 "RUPNOK - stationær strømning i elastiske rør"
af: Anja Boisen, Karen Birkelund, Mette Olufsen
Vejleder: Jesper Larsen
- 220/92 "Automatisk diagnosticering i digitale kredsløb"
af: Bjørn Christensen, Ole Møller Nielsen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 221/92 "A BUNDLE VALUED RADON TRANSFORM, WITH
APPLICATIONS TO INVARIANT WAVE EQUATIONS"
by: Thomas P. Branson, Gestur Ólafsson and
Henrik Schlichtkrull
- 222/92 On the Representations of some Infinite Dimensional
Groups and Algebras Related to Quantum Physics
by: Johnny T. Ottesen
- 223/92 THE FUNCTIONAL DETERMINANT
by: Thomas P. Branson
- 224/92 UNIVERSAL AC CONDUCTIVITY OF NON-METALLIC SOLIDS AT
LOW TEMPERATURES
by: Jeppe C. Dyre
- 225/92 "HATMODELLEN" Impedansspektroskopi i ultrarent
en-krystallinsk silicium
af: Anja Boisen, Anders Gorm Larsen, Jesper Varmer,
Johannes K. Nielsen, Kit R. Hansen, Peter Bøggild
og Thomas Hougaard
Vejleder: Petr Viscor
- 226/92 "METHODS AND MODELS FOR ESTIMATING THE GLOBAL
CIRCULATION OF SELECTED EMISSIONS FROM ENERGY
CONVERSION"
by: Bent Sørensen
- 227/92 "Computersimulering og fysik"
af: Per M.Hansen, Steffen Holm,
Peter Maibom, Mads K. Dall Petersen,
Pernille Postgaard, Thomas B.Schrøder,
Ivar P. Zeck
Vejleder: Peder Voetmann-Christiansen
- 228/92 "Teknologi og historie"
Fire artikler af:
Mogens Niss, Jens Høyrup, Ib Thiersen,
Hans Hedal
- 229/92 "Masser af information uden betydning"
En diskussion af informationsteorien
i Tor Nørretranders' "Mærk Verden" og
en skitse til et alternativ baseret
på andenordens kybernetik og semiotik.
af: Søren Brier
- 230/92 "Vinklens tredeling - et klassisk
problem"
et matematisk projekt af
Karen Birkelund, Bjørn Christensen
Vejleder: Johnny Ottesen
- 231A/92 "Elektrondiffusion i silicium - en
matematisk model"
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund,
Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen
- 231B/92 "Elektrondiffusion i silicium - en
matematisk model" Kildetekster
af: Jesper Voetmann, Karen Birkelund,
Mette Olufsen, Ole Møller Nielsen
Vejledere: Johnny Ottesen, H.B.Hansen
- 232/92 "Undersøgelse om den simultane opdagelse
af energiens bevarelse og isærdeles om
de af Mayer, Colding, Joule og Helmholtz
udførte arbejder"
af: L.Arleth, G.I.Dybkjær, M.T.Østergård
Vejleder: Dorthe Posselt
- 233/92 "The effect of age-dependent host
mortality on the dynamics of an endemic
disease and
Instability in an SIR-model with age-
dependent susceptibility
by: Viggo Andreasen
- 234/92 "THE FUNCTIONAL DETERMINANT OF A FOUR-DIMENSIONAL
BOUNDARY VALUE PROBLEM"
by: Thomas P. Branson and Peter B. Gilkey
- 235/92 OVERFLADESTRUKTUR OG POREUDVIKLING AF KOKS
- Modul 3 fysik projekt -
af: Thomas Jessen
-

- 236a/93 INTRODUKTION TIL KVANTE HALL EFFEKTEN
af: Anja Boisen, Peter Bøggild
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen
- 236b/93 STRØMSSAMMENBRUD AF KVANTE HALL EFFEKTEN
af: Anja Boisen, Peter Bøggild
Vejleder: Peder Voetmann Christiansen
Erland Brun Hansen
- 237/93 The Wedderburn principal theorem and Shukla cohomology
af: Lars Kadison
- 238/93 SEMIOTIK OG SYSTEMEGENSKABER (2)
Vektorbånd og tensorer
af: Peder Voetmann Christiansen
- 239/93 Valgsystemer - Modelbygning og analyse Matematik 2. modul
af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen, Maria Hermannsson, Allan Jørgensen, Ragna Clauson-Kaas, Poul Lützen
Vejleder: Mogens Niss
- 240/93 Patologiske eksempler. Om sære matematiske fisks betydning for den matematiske udvikling
af: Claus Dræby, Jørn Skov Hansen, Runa Ulsø Johansen, Peter Meibom, Johannes Kristoffer Nielsen
Vejleder: Mogens Niss
- 241/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 1
af: Bent Sørensen
- 242/93 Brovedligeholdelse - bevar mig vel
Analyse af Vejdirektoratets model for optimering af broreparationer
af: Linda Kyndlev, Kare Fundal, Kamma Tulinius, Ivar Zeck
Vejleder: Jesper Larsen
- 243/93 TANKEEKSPERIMENTER I FYSIKKEN
Et 1.modul fysikprojekt
af: Karen Birkelund, Stine Sofia Korremann
Vejleder: Dorthe Posselt
- 244/93 RADONTRANSFORMATIONEN og dens anvendelse i CT-scanning
Projektrapport
af: Trine Andreasen, Tine Guldager Christiansen, Nina Skov Hansen og Christine Iversen
Vejledere: Gestur Olafsson og Jesper Larsen
- 245a+b /93 Time-Of-Flight målinger på krystallinske halvledere
Specialerapport
af: Linda Szkotak Jensen og Lise Odgaard Gade
Vejledere: Petr Viscor og Niels Boye Olsen
- 246/93 HVERDAGSVIDEN OG MATEMATIK - LÆREPROCESSER I SKOLEN
af: Lena Lindenskov, Statens Humanistiske Forskningsråd, RUC, IMFUFA
- 247/93 UNIVERSAL LOW TEMPERATURE AC CONDUCTIVITY OF MACROSCOPICALLY DISORDERED NON-METALS
by: Jeppe C. Dyre
- 248/93 DIRAC OPERATORS AND MANIFOLDS WITH BOUNDARY
by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski
- 249/93 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht Addendum to Schappacher, Scholz, et al.
by: B. Booss-Bavnbek
With comments by W.Abikoff, L.Ahlfors, J.Cerf, P.J.Davis, W.Fuchs, F.P.Gardiner, J.Jost, J.-P.Kahane, R.Lohan, L.Lorch, J.Radkai and T.Söderqvist
- 250/93 EULER OG BOLZANO - MATEMATISK ANALYSE SET I ET VIDENSKABSTEORETISK PERSPEKTIV
Projektrapport af: Anja Juul, Lone Michelsen, Tomas Højgård Jensen
Vejleder: Stig Andur Pedersen
- 251/93 Genotypic Proportions in Hybrid Zones
by: Freddy Bugge Christiansen, Viggo Andreassen and Ebbe Thue Poulsen
- 252/93 MODELLERING AF TILFÆLDIGE FÆNOMENER
Projektrapport af: Birthe Friis, Lisbeth Helmsgaard, Kristina Charlotte Jakobsen, Marina Mosbæk Johannessen, Lotte Ludvigsen, Mette Hass Nielsen
- 253/93 Kuglepakning
Teori og model
af: Lise Arleth, Kåre Fundal, Nils Kruse
Vejleder: Mogens Niss
- 254/93 Regressionsanalyse
Materiale til et statistikkursus
af: Jørgen Larsen
- 255/93 TID & BETINGET UAFHÆNGIGHED
af: Peter Harremoës
- 256/93 Determination of the Frequency Dependent Bulk Modulus of Liquids Using a Piezoelectric Spherical Shell (Preprint)
by: T. Christensen and N.B.Olsen
- 257/93 Modellering af dispersion i piezoelektriske keramikker
af: Pernille Postgaard, Jannik Rasmussen, Christina Specht, Mikko Østergård
Vejleder: Tage Christensen
- 258/93 Supplerende kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse"
af: Mogens Brun Heefelt
- 259/93 STUDIES OF AC HOPPING CONDUCTION AT LOW TEMPERATURES
by: Jeppe C. Dyre
- 260/93 PARTITIONED MANIFOLDS AND INVARIANTS IN DIMENSIONS 2, 3, AND 4
by: B. Booss-Bavnbek, K.P.Wojciechowski

- 261/93 OPGAVESAMLING
Bredde-kursus i Fysik
Eksamensopgaver fra 1976-93
- 262/93 Separability and the Jones Polynomial
by: Lars Kadison
- 263/93 Supplerende kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse" II
af: Mogens Brun Heefelt
- 264/93 FOTOVOLTAISK STATUSNOTAT 2
af: Bent Sørensen
-
- 265/94 SPHERICAL FUNCTIONS ON ORDERED SYMMETRIC SPACES
To Sigurdur Helgason on his sixtyfifth birthday
by: Jacques Faraut, Joachim Hilgert and Gestur Olafsson
- 266/94 Kommensurabilitets-oscillationer i laterale supergitre
Fysikspeciale af: Anja Boisen, Peter Bøggild, Karen Birkelund
Vejledere: Rafael Taboryski, Poul Erik Lindelof, Peder Voetmann Christiansen
- 267/94 Kom til kort med matematik på Eksperimentarium - Et forslag til en opstilling
af: Charlotte Gjerrild, Jane Hansen
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 268/94 Life is like a sewer ...
Et projekt om modellering af aorta via en model for strømning i kloakrør
af: Anders Marcussen, Anne C. Nilsson, Lone Michelsen, Per M. Hansen
Vejleder: Jesper Larsen
- 269/94 Dimensionsanalyse en introduktion metaprojekt, fysik
af: Tine Guldager Christiansen, Ken Andersen, Nikolaj Hermann, Jannik Rasmussen
Vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 270/94 THE IMAGE OF THE ENVELOPING ALGEBRA AND IRREDUCIBILITY OF INDUCED REPRESENTATIONS OF EXPONENTIAL LIE GROUPS
by: Jacob Jacobsen
- 271/94 Matematikken i Fysikken. Opdaget eller opfundet NAT-BAS-projekt
vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 272/94 Tradition og fornyelse
Det praktiske elevarbejde i gymnasiets fysikundervisning, 1907-1988
af: Kristian Hoppe og Jeppe Guldager
Vejledning: Karin Beyer og Nils Hybel
- 273/94 Model for kort- og mellemdistanceløb
Verifikation af model
af: Lise Fabricius Christensen, Helle Pilemann, Bettina Sørensen
Vejleder: Mette Olufsen
- 274/94 MODEL 10 - en matematisk model af intravenøse anæstetikas farmakokinetik
3. modul matematik, forår 1994
af: Trine Andreasen, Bjørn Christensen, Christine Green, Anja Skjoldborg Hansen, Lisbeth Helmgård
Vejledere: Viggo Andreasen & Jesper Larsen
- 275/94 Perspectives on Teichmüller and the Jahresbericht 2nd Edition
by: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 276/94 Dispersionsmodellering
Projektrapport 1. modul
af: Gitte Andersen, Rehannah Borup, Lisbeth Friis, Per Gregersen, Kristina Vejro
Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 277/94 PROJEKTARBEJDSPÆDAGOGIK - Om tre tolkninger af problemorienteret projektarbejde
af: Claus Flensted Behrens, Frederik Voetmann Christiansen, Jørn Skov Hansen, Thomas Thingstrup
Vejleder: Jens Højgaard Jensen
- 278/94 The Models Underlying the Anaesthesia Simulator Sophus
by: Mette Olufsen(Math-Tech), Finn Nielsen (RISØ National Laboratory), Per Føge Jensen (Herlev University Hospital), Stig Andur Pedersen (Roskilde University)
- 279/94 Description of a method of measuring the shear modulus of supercooled liquids and a comparison of their thermal and mechanical response functions.
af: Tage Christensen
- 280/94 A Course in Projective Geometry
by Lars Kadison and Matthias T. Kromann
- 281/94 Modellering af Det Cardiovaskulære System med Neural Puls kontrol
Projektrapport udarbejdet af:
Stefan Frello, Runa Ulsøe Johansen, Michael Poul Curt Hansen, Klaus Dahl Jensen
Vejleder: Viggo Andreasen
- 282/94 Parallele algoritmer
af: Erwin Dan Nielsen, Jan Danielsen, Niels Bo Johansen

- 283/94 Grænser for tilfældighed
(en kaotisk talgenerator)
af: Erwin Dan Nielsen og Niels Bo Johansen
- 284/94 Det er ikke til at se det, hvis man ikke
lige ve' det!
Gymnasie matematikkens begrundelsesproblem
En specialerapport af Peter Hauge Jensen
og Linda Kyndlev
Vejleder: Mogens Niss
- 285/94 Slow coevolution of a viral pathogen and
its diploid host
by: Viggo Andreasen and
Freddy B. Christiansen
- 286/94 The energy master equation: A low-temperature
approximation to Bässler's random walk model
by: Jeppe C. Dyre
- 287/94 A Statistical Mechanical Approximation for the
Calculation of Time Auto-Correlation Functions
by: Jeppe C. Dyre
- 288/95 PROGRESS IN WIND ENERGY UTILIZATION
by: Bent Sørensen
- 289/95 Universal Time-Dependence of the Mean-Square
Displacement in Extremely Rugged Energy
Landscapes with Equal Minima
by: Jeppe C. Dyre and Jacob Jacobsen
- 290/95 Modellering af uregelmæssige bølger
Et 3.modul matematik projekt
af: Anders Marcussen, Anne Charlotte Nilsson,
Lone Michelsen, Per Mørkegaard Hansen
Vejleder: Jesper Larsen
- 291/95 1st Annual Report from the project
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH
ENERGY SYSTEM
an example of using methods developed for the
OECD/IEA and the US/EU fuel cycle externality study
by: Bent Sørensen
- 292/95 Fotovoltaisk Statusnotat 3
af: Bent Sørensen
- 293/95 Geometridiskussionen - hvor blev den af?
af: Lotte Ludvigsen & Jens Frandsen
Vejleder: Anders Madsen
- 294/95 Universets udvidelse -
et metaprojekt
Af: Jesper Duelund og Birthe Friis
Vejleder: Ib Lundgaard Rasmussen
- 295/95 A Review of Mathematical Modeling of the
Controlled Cardiovascular System
By: Johnny T. Ottesen
- 296/95 RETIKULER den klassiske mekanik
af: Peder Voetmann Christiansen
- 297/95 A fluid-dynamical model of the aorta with
bifurcations
by: Mette Olufsen and Johnny Ottesen
- 298/95 Mordet på Schrödingers kat - et metaprojekt om
to fortolkninger af kvantemekanikken
af: Maria Hermannsson, Sebastian Horst,
Christina Specht
Vejledere: Jeppe Dyre og Peder Voetmann Christiansen
- 299/95 ADAM under figenbladet - et kig på en samfunds-
videnskabelig matematisk model
Et matematisk modelprojekt
af: Claus Dræby, Michael Hansen, Tomas Højgård Jensen
Vejleder: Jørgen Larsen
- 300/95 Scenarios for Greenhouse Warming Mitigation
by: Bent Sørensen
- 301/95 TOK Modellering af træers vækst under påvirkning
af ozon
af: Glenn Møller-Holst, Marina Johannessen, Birthe
Nielsen og Bettina Sørensen
Vejleder: Jesper Larsen
- 302/95 KOMPRESSORER - Analyse af en matematisk model for
aksialkompressorer
Projektrapport af: Stine Bøggild, Jakob Hilmer,
Pernille Postgaard
Vejleder: Viggo Andreasen
- 303/95 Masterlignings-modeller af Glasovergangen
Termisk-Mekanisk Relaksation
Specialerapport udarbejdet af:
Johannes K. Nielsen, Klaus Dahl Jensen
Vejledere: Jeppe C. Dyre, Jørgen Larsen
- 304a/95 STATISTIKNOTER Simple binomialfordelingsmodeller
af: Jørgen Larsen
- 304b/95 STATISTIKNOTER Simple normalfordelingsmodeller
af: Jørgen Larsen
- 304c/95 STATISTIKNOTER Simple Poissonfordelingsmodeller
af: Jørgen Larsen
- 304d/95 STATISTIKNOTER Simple multinomialfordelingsmodeller
af: Jørgen Larsen
- 304e/95 STATISTIKNOTER Mindre matematisk-statistisk opslagsværk
indeholdende bl.a. ordforklaringer, resuméer og
tabeller
af: Jørgen Larsen

- 305/95 The Maslov Index:
A Functional Analytical Definition
And The Spectral Flow Formula

By: B. Booss-Bavnbek, K. Furutani
- 306/95 Goals of mathematics teaching

Preprint of a chapter for the forthcoming International Handbook of Mathematics Education (Alan J. Bishop, ed)

By: Mogens Niss
- 307/95 Habit Formation and the Thirdness of Signs

Presented at the semiotic symposium

The Emergence of Codes and Intensions as a Basis of Sign Processes

By: Peder Voetmann Christiansen
- 308/95 Metaforer i Fysikken

af: Marianne Wilcken Bjerregaard,
Frederik Voetmann Christiansen,
Jørn Skov Hansen, Klaus Dahl Jensen
Ole Schmidt

Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og
Petr Viscor
- 309/95 Tiden og Tanken

En undersøgelse af begrebsverdenen Matematik udført ved hjælp af en analogi med tid

af: Anita Stark og Randi Petersen

Vejleder: Bernhelm Booss-Bavnbek
- 310/96 Kursusmateriale til "Lineære strukturer fra algebra og analyse" (E1)

af: Mogens Brun Heefelt
- 311/96 2nd Annual Report from the project
LIFE-CYCLE ANALYSIS OF THE TOTAL DANISH ENERGY SYSTEM

by: Hélène Connor-Lajambe, Bernd Kuemmel,
Stefan Krüger Nielsen, Bent Sørensen
- 312/96 Grassmannian and Chiral Anomaly

by: B. Booss-Bavnbek, K.P. Wojciechowski
- 313/96 THE IRREDUCIBILITY OF CHANCE AND
THE OPENNESS OF THE FUTURE

The Logical Function of Idealism in Peirce's Philosophy of Nature

By: Helmut Pape, University of Hannover
- 314/96 Feedback Regulation of Mammalian Cardiovascular System

By: Johnny T. Ottesen
- 315/96 "Rejsen til tidens indre" - Udarbejdelse af
a + b et manuskript til en fjernsynsudsendelse
+ manuskript

af: Gunhild Hune og Karina Goyle

Vejledere: Peder Voetmann Christiansen og
Bruno Ingemann
- 316/96 Plasmaoscillation i natriumklynger

Specialerapport af: Peter Meibom, Mikko Østergård

Vejledere: Jeppe Dyre & Jørn Borggreen