

# IMFUFA **tekst**

- I, OM OG MED MATEMATIK OG FYSIK

## **Geodætbevægelser på højdimensionelle mangfoldigheder**

**En karikaturmodel for væskedynamik**

Dan E. Albrechtsen, Peter Bjerre,  
Tommy Buch-Madsen, Andreas Elmerdahl Olsen  
& Jon Tofteskov

Juni 2012

**nr. 488 - 2012**



Roskilde University,  
Department of Science, Systems and Models, IMFUFA  
P.O. Box 260, DK - 4000 Roskilde  
Tel: 4674 2263 Fax: 4674 3020

### **Geodætbevægelser på højdimensionelle mangfoldigheder En Karikaturmodel for væskedynamik**

Af: Dan Elmkvist Albrechtsen, Peter Bjerre, Tommy Buch-Madsen, Andreas Elmerdahl  
Olsen & Jon Tofteskov, Juni 2012

IMFUFA tekst nr. 488/ 2012

- 65 sider -

ISSN: 0106-6242

I dette projekt undersøges geodætbevægelse på højdimensionelle mangfoldigheder i et forsøg på at skabe en karikaturmodel til forståelse af væskedynamik. For væskesystemer af  $N$  partikler i  $\mathbb{R}^3$  er det muligt at fortolke dette som en mangfoldighed  $\mathcal{L}$  i  $\mathbb{R}^{3N}$ , hvorpå der i ethvert punkt vil være bevaret potentiel energi, hvilket giver anledning til den såkaldte  $NVU$ -dynamik. Ved brug af en algoritme fra [7], der tillader bevægelse på geodæter, er det muligt at bevæge sig rundt på en mangfoldighed  $\mathcal{L}$ . På grund af energibarrierer vil det fysiske system befinde sig i omegnen af et særligt stabilt punkt  $\omega_1 \in \mathcal{L}$  i lang tid, hvorefter man på meget kort tid, vil omlejre sig til et nyt stabilt punkt  $\omega_2 \in \mathcal{L}$ . Da den geometriske udformning af geodæterne på en sådan  $\mathcal{L}$  er særligt interessant, konstruerer vi en familie af mangfoldigheder  $\mathcal{M}_{\epsilon,N} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N | \Phi(\bar{x}) = 0\}$ , hvor  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N (x_i^2 - \frac{1}{N})^2 - 1$ , i et forsøg på at kunne indfange karakteristika for  $\mathcal{L}$ . For at forstå strukturen af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  undersøges forskellige relationer mellem  $\epsilon$  og  $N$  analytisk og ved brug af geodæt-algoritmen. I den forbindelse undersøges en hypotese om, at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  som enkeltsammenhængende flade kan indfange de fysiske karakteristika lignende det, der observeres på en mangfoldighed  $\mathcal{L}$  alene ved en justering af antallet af dimensioner, hvori  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  befinder sig. Det viser sig igennem en række simuleringer ikke at være tilfældet. Ved at justere den indgående parameter  $\epsilon$  i forhold til  $N$  vises det, at det er muligt at ændre topologien for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvilket frembringer den ønskede opførsel. Således kan  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , under de rigtige omstændigheder, anses som karikaturmodel for væskedynamik og dermed et udgangspunkt for en større forståelse af konfigurationelle egenskaber ved væskesystemer.

GEODÆTBEVÆGELSER PÅ  
HØJDIMENSIONELLE  
MANGFOLDIGHEDER  
  
EN KARIKATURMODEL  
FOR VÆSKEDYNAMIK

---

PROFESSIONSPROJEKT FORÅR 2012

DAN E ALBRECHTSEN  
PETER BJERRE  
TOMMY BUCH-MADSEN  
ANDREAS ELMERDAHL OLSEN  
JON TOFTESKOV

VEJLEDER: BERNHELM BOOSS-BAVNBÆK

IMFUFA - NSM  
ROSKILDE UNIVERSITET



## Resumé

I dette projekt undersøges geodætbevægelse på højdimensionelle mangfoldigheder i et forsøg på at skabe en karikaturmodel til forståelse af væskedynamik. For væskesystemer af  $N$  partikler i  $\mathbb{R}^3$  er det muligt at fortolke dette som en mangfoldighed  $\mathcal{L}$  i  $\mathbb{R}^{3N}$ , hvorpå der i ethvert punkt vil være bevaret potentiel energi, hvilket giver anledning til den såkaldte  $NVU$ -dynamik. Ved brug af en algoritme fra [7], der tillader bevægelse på geodæter, er det muligt at bevæge sig rundt på en mangfoldighed  $\mathcal{L}$ . På grund af energibarrierer vil det fysiske system befinde sig i omegnen af et særligt stabilt punkt  $\omega_1 \in \mathcal{L}$  i lang tid, hvorefter man på meget kort tid, vil omlejre sig til et nyt stabilt punkt  $\omega_2 \in \mathcal{L}$ . Da den geometriske udformning af geodæterne på en sådan  $\mathcal{L}$  er særligt interessant, konstruerer vi en familie af mangfoldigheder  $\mathcal{M}_{\epsilon,N} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N | \Phi(\bar{x}) = 0\}$ , hvor  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)^2 - 1$ , i et forsøg på at kunne indfange karakteristika for  $\mathcal{L}$ . For at forstå strukturen af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  undersøges forskellige relationer mellem  $\epsilon$  og  $N$  analytisk og ved brug af geodæt-algoritmen. I den forbindelse undersøges en hypotese om, at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  som enkeltssammenhængende flade kan indfange de fysiske karakteristika lignende det, der observeres på en mangfoldighed  $\mathcal{L}$  alene ved en justering af antallet af dimensioner, hvori  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  befinder sig. Det viser sig igennem en række simuleringer ikke at være tilfældet. Ved at justere den indgående parameter  $\epsilon$  i forhold til  $N$  vises det, at det er muligt at ændre topologien for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvilket frembringer den ønskede opførsel. Således kan  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , under de rigtige omstændigheder, anses som karikaturmodel for væskedynamik og dermed et udgangspunkt for en større forståelse af konfigurationelle egenskaber ved væskesystemer.

## Abstract

In this project, we investigate geodesic motion on high dimensional manifolds, in an attempt at creating a caricature model which may help in the understanding of fluid dynamics. For such systems of  $N$  particles in  $\mathbb{R}^3$ , it is possible to interpret this as a manifold  $\mathcal{L} \in \mathbb{R}^{3N}$ , defined such that the potential energy will be constant at every point, which gives rise to the  $NVU$ -dynamics. By using an algorithm from [7], which allows only geodesic motion, it is possible to move around on a manifold  $\mathcal{L}$ . Because of energy barriers the system will waggle in the neighbourhood of an especially stable point  $\omega_1 \in \mathcal{L}$  for a long time, before it changes position very fast to another stable point  $\omega_2 \in \mathcal{L}$ . Because of our interest in the geometric structure of geodesics on  $\mathcal{L}$ , we are constructing a family of manifolds  $\mathcal{M}_{\epsilon,N} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N | \Phi(\bar{x}) = 0\}$ , where  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)^2 - 1$ , in an attempt to capture the characteristics movements on  $\mathcal{L}$ . To understand the structure of  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , we investigate different relations between  $\epsilon$  og  $N$  analytically, and by use of the geodesic algorithm. We investigate a hypothesis saying that, a simply connected surface can possess the physical characteristics, that are observed on the manifold  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  alone by adjusting the number of dimensions,  $N$ . By doing a series of computersimulations we show that this is not the case. When adjusting the parameter  $\epsilon$  after  $N$ , it is showed, that it is possible to change the topology for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . By making this topology change we get the behavior we where looking for. This indicates that  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  can work as a caricatur model for fluid dynamics, and in that way help getting a better understanding of configurational properties of fluid behavior.

## Forord

Dette projekt, omhandlende modellering og simulering af geodætbevægelse på højdimensionelle mangfoldigheder, er skrevet på 2. kandidatmodul som professionsprojekt i kategorien modelleringsprojekt på Roskilde Universitet i forårssemesteret 2012.

Modelbyggervarianten af professionsprojektet har til formål at præsentere en konkret udført modelleringsopgave, der her består af en opstilling og undersøgelse af en karikaturmodel for væskedynamik ved modellering af partikelsystemer som højdimensionelle mangfoldigheder.

Hvis læseren ønsker et dybere kendskab til fysikken bag problemstillingen, end den der præsenteres i følgende kapitel, henvises læseren til artiklerne [7] og [8].

Vi ønsker at takke Professor Jeppe Dyre, fra grundforskningsgruppen Glas og Tid under NSM på Roskilde Universitet, for hans inspiration til og engagement i projektet. Desuden vil vi gerne takke vores vejleder; lektor Bernhelm Booss-Bavnbek.





# Indhold

<b>1</b>	<b>Indledning</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Formål og hypotese . . . . .	4
1.3	Problemformulering . . . . .	5
1.4	Målgruppe . . . . .	6
1.5	Metode . . . . .	6
1.6	Opbygning af rapporten . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Præsentation og undersøgelse af <math>\mathcal{M}_{\epsilon,N}</math></b>	<b>9</b>
2.1	Præsentation af $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . . . . .	9
2.2	Betydningen af $\epsilon$ . . . . .	10
2.3	Kritiske punkter . . . . .	16
2.4	$\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ som mangfoldighed . . . . .	18
2.5	Sammenhæng mellem løsningmængder . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Implementering af modellen</b>	<b>21</b>
3.1	Udledning af <i>NVU</i> -algoritmen . . . . .	21
3.2	Ergodisitet af algoritmen . . . . .	23
3.3	Programmet . . . . .	24
3.4	Kontrolsimuleringer . . . . .	26
3.5	Testsimulering på adskilte fladestykker . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Simulering og databehandling</b>	<b>33</b>
4.1	Analyse af den enkeltstående flade . . . . .	33
4.2	Analyse af $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ med huller . . . . .	36
4.3	Analyse af den usammenhængende flade . . . . .	39
4.4	Sammenfatning . . . . .	39
<b>5</b>	<b>Diskussion</b>	<b>41</b>
<b>6</b>	<b>Konklusion</b>	<b>45</b>
<b>7</b>	<b>Perspektivering</b>	<b>47</b>
	<b>Litteratur</b>	<b>51</b>

*INDHOLD*

A Ergode teori	53
B Kildekoden	55

# 1 Indledning

## 1.1 Motivation

Den problemstilling, der arbejdes med i denne rapport, har sit udgangspunkt i fysikken, og derfor vil vi i dette afsnit gennemgå den nødvendige fysik i korte træk, så det er muligt at forstå udgangspunktet for projektet. Afsnittets primære formål er at give en basal idé om, hvilken interesse der er i problemstillingen samt at redegøre for, hvorfor visse dele af det senere modelarbejde udfærdiges som det gør.

Den primære inspiration til denne rapport kommer fra molecular dynamics(MD)-simuleringer. MD-simuleringer er i løbet af sidste halvdel af forrige århundrede vokset til at blive en vigtig del i forståelsen af opførslen af partikelsystemer under forskellige forhold [12]. Den basale tanke består i at placere en mængde af partikler i en kasse  $V \subset \mathbb{R}^3$ , hvor partiklerne vil have forskellige startbetingelser og måder at interagere med hinanden på. De enkelte partikler vil være beskrevet ved i alt 6 koordinater bestående af 3 konfigurationelle koordinater, som beskriver den enkelte partikels placering og 3 koordinater, som beskriver den enkelte partikels impuls. Når partiklerne bevæger sig rundt, vil de blive påvirket af hinanden afhængigt af deres indbyrdes afstande, hvilket udtrykkes ved en potentiel energi  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ . Gradienten af de enkelte potentialer, partiklerne imellem, angiver den kraft, som partiklerne påvirker hinanden med, almindeligvis defineret ved  $-\nabla U_{ij} \equiv F_{ij} = -F_{ji}$ . Disse kræfter giver anledning til en ændring i partiklernes impuls og dermed den kinetiske energi  $E_k(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ . Udregningen af disse ændringer findes ved at opstille Newtons anden lov for kræfterne på hver af disse partikler, hvormed man opnår en række differentilligninger, som løses numerisk ved diskretisering af tiden. Dette giver mulighed for at se, hvordan partiklernes dynamiske og konfigurationelle tilstande ændrer sig som funktion af tiden. Herfra kan mange termodynamiske fænomener indfanges som f.eks. diffusion, faseovergange, glastilstande o.l.

I forbindelse med simuleringer arbejdes der med statistisk mekanik, som udtrykkes ved brug af forskellige ensembler [14]. Et ensemble er i fysisk forstand, at man tillader en række mikrotilstande for sit system med kravet om, at hver enkelt mikrotilstand skal opfylde den samme makrotilstand. Det klassiske ensemble i forbindelse med simuleringer er  $NVE$ -ensemblet, også kendt som  $NVE$ -dynamik eller det mikrokanoniske ensemble, hvor  $N$  repræsenterer antallet af partikler,  $V$  repræsenterer volumenet, som partiklerne befinder sig i, og  $E =$

$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) + E_k(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$  repræsenterer den totale energi af systemet. Alle tre kræves konstante i dette ensemble og definerer tilsammen en makrotilstand, som kun tillader visse mikrotilstande.  $NVE$ -ensemblet svarer til et system i en adiabatisk process, hvilket betyder, at der ikke udveksles energi med omgivelserne. Et andet meget anvendt ensemble er  $NVT$ -ensemblet, som i stedet for at fastholde den samlede energi, fastholder temperaturen i systemet. For dette system vil der dermed være interaktioner med omgivelserne i form af energiudveksling. Både  $NVE$  og  $NVT$  ensemblet kan anvendes til at indfange og undersøge forskellige fysiske fænomener. En vigtig egenskab for et godt ensemble er, at man i en simulering vil gennemløbe en række mikrotilstande, som er repræsentative for systemet. Dette kommer til udtryk i den ergodiske hypotese, som siger at

$$\langle G \rangle_{ens} = \langle G \rangle_{tid} \quad (1.1)$$

$\langle G \rangle_{ens}$  er her den gennemsnitlige værdi for en størrelse  $G$  i det pågældende ensemble, som findes ved at integrere over samtlige tilstande repræsenteret ved deres Boltzmannfaktorer [13]. Denne vil som regel være meget besværlig at bestemme analytisk. I praksis vil den repræsentere en makroskopisk størrelse for systemet, som man ville kunne måle i et laboratorium. Dette kunne eksempelvis være temperaturen, som kan ændre sig mikroskopisk, men hvis gennemsnit svarer til, hvad man måler med et termometer. Tilsvarende er  $\langle G \rangle_{tid}$  givet som

$$\langle G \rangle_{tid} = \frac{1}{T} \sum_{i=1}^T G_T(\vec{r}_{1T}, \dots, \vec{r}_{NT}, \vec{p}_{1T}, \dots, \vec{p}_{NT}) \quad (1.2)$$

og repræsenterer den gennemsnitlige værdi af samtlige målinger for  $G$ , der findes til hvert af de  $i$  alt  $T$  tidsskridt. Basalt set betyder den ergodiske hypotese følgende; ved at lade en simulering løbe vilkårligt lang tid, vil enhver mikrotilstand være lige sandsynlig. Dette betyder videre, at to forskellige simuleringer over den samme makrotilstand skal få de samme gennemsnitsværdier. Noget tilsvarende til denne hypotese vil spille ind i det senere modelleringsforløb i rapporten.

I en artikelserie bestående af to artikler, [7] og [8], gennemgås et alternativ til de kendte ensembler. Dette kaldes  $NVU$ -ensemblet og kommer i første omgang af at lave en geometrisk fortolkning fra strukturen af et materiale. For en given tilstand  $Q$  i det pågældende system noteres den gennemsnitlige potentielle energi som  $\langle U \rangle_Q$ . Det kan vises, under de rigtige omstændigheder, at niveaufladen

$$\mathcal{L} = \{ (r_1, \dots, r_N) \in \mathbb{R}^{3N} \mid U(r_1, \dots, r_N) = \langle U \rangle_Q \} \quad (1.3)$$

er en mangfoldighed i  $\mathbb{R}^{3N}$ , hvor et hvilket som helst punkt på fladen vil have en konstant potentiel energi lig  $\langle U \rangle_Q$ . Mangfoldigheden bliver opbygget af koordinaterne for de rent fysiske koordinater for hver enkelt partikel således, at  $\mathcal{L} \subset \mathbb{R}^{3N}$ , da der er  $N$  partikler. Dermed er der altså tale om en Riemannsk mangfoldighed udstyret med en almindelig euklidisk metrik. Bevæger vi os fra et punkt til et andet på denne mangfoldighed, vil vi til ethvert tidspunkt have bevaret den

potentielle energi. Således afhænger fladen kun af de konfigurationelle tilstande i systemet og er dermed uafhængigt af den enkelte partikels impuls.

En algoritme til at bevæge sig rundt på en sådan mangfoldighed i  $NVU$ -ensemblet er beskrevet i [7]. Algoritmen er udledt ved at begrænse bevægelsen til kun at være på geodæter. Det betyder rent fysisk, at kræften på systemet i ethvert punkt er vinkelret på fladen og udfører dermed ikke noget arbejde, således at den kinetiske energi er bevaret. Således vil den kinetiske og potentielle energi hver især være bevaret for samtlige mikrotilstande. Computersimuleringer foretaget med geodæt-algoritmen på mangfoldigheder med konstant potentiel energi viser, at  $NVU$ -simuleringer er en fuldgod metode til at foretage MD-simuleringer.

En interessant opførsel i MD-simuleringer kommer, når man ser på opførslen af de enkelte partikler i et system i ligevægt. Her vil man se, at partiklerne i lang tid vil ligge og vibrere omkring faste konfigurationer. Efter et stykke tid vil man pludselig se, at der kommer en omløjring af partiklerne i systemet, hvorefter partiklerne igen vil ligge og vibrere i næsten samme position i lang tid. Dette skyldes en energibarriere, hvor to partikler efter et stykke tid får stor nok energi til at bytte plads. På mangfoldigheden  $\mathcal{L}$  kommer dette til udtryk ved, at man i lang tid bevæger sig i en omegn af et punkt  $\bar{x}_1 \in \mathcal{L}$  for så hurtigt at bevæge sig til et nyt punkt  $\bar{x}_2 \in \mathcal{L}$ , hvor man så igen vil ligge og bevæge sig i et stykke tid, inden en ny omløjring finder sted. Dette er et interessant fænomen, som endnu ikke er fuldstændigt forstået. Især er det interessant at se på, hvorledes strukturen af  $\mathcal{L}$  kan spille ind i den forbindelse.

Mangfoldigheden  $\mathcal{L}$  vil i almindelighed kunne defineres for en hvilken som helst væske i en given tilstand  $Q$ . Idet tilstanden ændres, f.eks. ved en ændring i tryk eller temperatur, vil fladen i almindelighed ændre form. Dog er der en særlig simpel gruppe af væsker, hvor denne mangfoldighed vil være invariant på såkaldte isomorfe kurver i fasediagrammet, dvs. et tryk-temperatur diagram. Teorien om isomorfer er præsenteret i en artikelserie på i alt fem artikler ([1], [2], [16], [6], [17]). Meget simpelt vil der kunne findes isomorfe kurver i fasediagrammet for en væske, hvor der er en linearitet mellem ændringer i den potentielle energi og de ændringer, der kommer i trykket som følge af en ændring i den potentielle energi. For de væsker som opfylder dette, kan tryk og temperatur justeres på bestemte kurver, således at konfigurationen, som definerer  $\mathcal{L}$ , og dynamikken ikke ændres. På isomorfe kurver vil en lang række fysiske egenskaber være invariante. Et eksempel på dette er  $S_{excess}$ , som er bidraget til entropien, der kommer fra partikelinteraktioner og altså afhænger af strukturen og distributionsfunktionen, som anvendes til at bestemme, hvilken fase ens system befinder sig i. En af begrundelserne for interessen i at se på  $NVU$ -dynamik er, at forstå om den konstant potentielle energi mangfoldighed  $\mathcal{L}$  alene kontrollerer disse invarianser, og altså om et præcis kendskab til  $\mathcal{L}$  vil kunne redegøre for alle invariante størrelser [7].

På trods af at man kan bevæge sig rundt på den konstante potentielle energiflade  $\mathcal{L}$ , er det stadig ikke klart, hvordan dennes geometriske udformninger præcist spiller ind på de resultater, man får i simuleringer. I denne rapport ønsker vi at skabe en mangfoldighed, hvorpå vi kan bevæge os ved hjælp af

geodæt-algoritmen fra [7]. Vi ønsker at undersøge, hvordan vi geometrisk kan udforme vores mangfoldighed, således at vi i lang tid vil bevæge os i en omegn af et punkt, der repræsenterer en sandsynlig partikelkonfiguration, for så hurtigt at gå til en omegn af et andet punkt. I næste afsnit vil vi introducere og argumentere for, hvordan vi tænker at opbygge vores mangfoldighed. Samtidig vil vi argumentere for en simpel hypotese, som kunne tænkes at indfange visse dele af den opførsel, der ses i fysikken.

## 1.2 Formål og hypotese

Efter en kort gennemgang af den nødvendige fysik, som har skabt udgangspunktet for de idéer, der arbejdes med, vil vi i dette afsnit præsentere den konkrete problemstilling, vi ønsker at undersøge i denne rapport.

Som nævnt kan et partikelsystem definere en mangfoldighed  $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^N$ , hvorpå det gælder, at den potentielle energi er konstant. Da partiklerne i almindelighed er begrænset til at bevæge sig i en lukket kasse  $V \subset \mathbb{R}^3$ , vil  $\mathcal{M}$  også være begrænset. På  $\mathcal{M}$  vil man se, at man i lang tid vil bevæge sig rundt i omegnen af et punkt for så pludseligt og hurtigt bevæge sig videre til et nyt punkt, hvor man så igen vil ligge og bevæge sig rundt længe. Med udgangspunkt i denne viden ønsker vi at konstruere en mangfoldighed, som har en struktur, på hvilken geodæter besidder ovenstående dynamik. Foruden denne fysiske inspiration ønsker vi ikke at arbejde yderligere med den indgående fysik. På den måde kan mangfoldigheden, sammen med algoritmen fra [7], tænkes som værende en karikaturmodel for væskedynamik. Med betegnelsen karikaturmodel menes der her en model, som indfanger de mest basale egenskaber, der ses på geometriske fortolkninger af partikelsystemer, men som kan forstås rent matematisk og ikke nødvendigvis har nogen videre reel sammenhæng med den fysiske verden. Således kan en sådan model tænkes som et forsøg på at opnå kendskab til, hvordan et partikelsystem kunne tænkes beskrevet rent matematisk.

I den forbindelse vil vi nu komme med en simpel hypotese, som kan tænkes at indfange de krævede karakteristika. I første omgang forestiller vi os, at vores mangfoldighed  $\mathcal{M}$  vil være enkeltssammenhængende, altså uden huller, og værende indeholdt i den lukkede  $N$ -dimensionelle enhedskugle  $\overline{B}^N$ , således at  $\mathcal{M} \subset \overline{B}^N$ . Desuden kræves det, at  $\mathcal{M} \cap \partial B^N = \Omega$  består af et endeligt antal punkter  $\omega_i$ , i hvilke  $\mathcal{M}$  vil have normen 1. For arealet  $A_r$  af en vilkårlig kugleskal indeholdt i  $\overline{B}^N$  med radius  $0 < r \leq 1$  vil der gælde, at  $A_r \propto r^N$ . Idet  $N$  antager en høj værdi, vil en værdi af  $r$ , som afviger bare en smule fra 1, give et meget lille areal for den pågældende kugleskal i forhold til  $A_{r=1}$ . Man kunne derfor forestille sig, at  $\mathcal{M}$  vil have en større del af sit areal placeret omkring punkterne  $\omega_i$ , når  $N$  stiger. Hvis dette er sandt, må det gælde, at en geodæt i længere tid vil befinde sig i nærheden af et punkt  $\omega_i$  for så hurtigt at bevæge sig igennem en dal, hvor arealet er meget småt, og derfra bevæge sig hen i en omegn af et andet punkt  $\omega_j$ . Hvis hypotesen er sand, vil det for vores mangfoldighed naturligt følge, at jo flere dimensioner den udbredes i, desto længere tid vil en

geodæt befinde sig i nærheden af et punkt  $\omega_i$ . Kan vi videre overføre denne hypotese til fysikken, vil der altså ikke være noget, som udelukker muligheden for, at et partikelsystem kan repræsenteres af en 'pæn' og simpel mangfoldighed. Skal hypotesen gælde, kræver det dog, at vi har et ergodisk princip i stil med, hvad der kræves for fysiske ensembler, således at vi ved bevægelse på geodæter er sikre på, at ethvert område af mangfoldigheden er lige sandsynligt. Derved vil vi være sikre på at vandre på hele mangfoldigheden, og hvis hypotesen, om at størstedelen af arealet befinder sig tæt ved punkterne  $\omega_i \in \Omega$ , holder stik, vil vi være her i længere tid end ved punkter, der ikke er tæt på et punkt  $\omega_i$ .

Der findes to oplagte måder at angribe problemstillingen omhandlende geodætbevægelse på højdimensionelle flader på. Den ene mulighed er at gå ind og lave en ren matematisk analytisk undersøgelse af den og på den måde lade det være en generel undersøgelse af dynamikken på højdimensionelle mangfoldigheder, som stadig er et varmt emne inde for matematisk grundforskning. Den anden mulighed, som vi har valgt at benytte i dette projekt, er at tage udgangspunkt i en anden eksisterende problemstilling, hvor vi i dette tilfælde har ladet os inspirere af en problemstilling fra fysikken. Ud fra denne er det muligt at benytte modelleringsperspektivet til at belyse den højdimensionelle differentialgeometri. Helt konkret ønsker vi at arbejde med *NVU*-algoritmen, som den præsenteres i [7], at benytte denne til at simulere geodæter på  $\mathcal{M}$  og belyse differentialgeometrien ud fra denne vinkel.

Mangfoldigheden, vi ønsker arbejde med, vil blive konstrueret som urbilledet til en funktion,  $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ , som kan tænkes at repræsentere et partikelsystems potentielle energi, dog uden at have en egentlig sammenhæng med et fysisk potentiale. Mangfoldigheden  $\mathcal{M}$  skal være mulig at beskrive i et vilkårligt antal dimensioner  $N$ , være kompakt i  $\overline{B}^N$  og være diskret på  $\partial B^N$ . For at benytte *NVU*-algoritmen kræver det, at vi laver et program, der gør det muligt for os at simulere geodætbevægelserne. Så på trods af at inspirationen kommer fra fysikken, bliver arbejdet en ren matematisk og numerisk undersøgelse af mangfoldigheden  $\mathcal{M}$ . Som udgangspunkt har vi valgt at arbejde med en mangfoldighed  $\mathcal{M}$  på formen

$$\mathcal{M} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N \mid \Phi(\bar{x}) = 0\} \quad (1.4)$$

hvor

$$\Phi(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N \left( x_i^2 - \frac{1}{N} \right)^2 - 1 \quad (1.5)$$

med  $\epsilon > 0$  og  $N > 1$ , da denne skal vise sig senere at have særligt interessante egenskaber, når den analyseres og simuleres.

### 1.3 Problemformulering

Med udgangspunkt i en karikaturmodel for væskedynamik ønsker vi at undersøge en  $N - 1$  dimensionel, glat, kompakt, Riemannsk mangfoldighed  $\mathcal{M}$ , indlejret i

den  $N$ -dimensionelle enhedskugle,  $\overline{B}^N$ , hvor  $\Omega = \mathcal{M} \cap \partial B^N$  består af et endeligt antal punkter  $\omega_i \in \Omega$ . Særligt ønsker vi at benytte mangfoldigheden

$$\mathcal{M} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N \mid \Phi(\bar{x}) = 0\} \quad (1.6)$$

hvor vi har valgt  $\Phi(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N (x_i^2 - \frac{1}{N})^2 - 1$  til at undersøge gyldigheden af hypotesen; at vi ved geodætbevægelse på denne mangfoldighed i højdimensionelle tilfælde vil befinde os væsentligt længere i områder nær punkter i  $\Omega$  fremfor i områder, der ikke er tæt på et punkt i  $\Omega$ .

Desuden ønsker vi at undersøge ved computersimuleringer og rene matematiske analyser, hvilke betingelser der skal opfyldes, for at  $\mathcal{M}$  med algoritmen fra [7] egner sig bedst som en karikaturmodel for omlejringer i partikelsystemer, som det opleves i glasforskningen.

## 1.4 Målgruppe

Projektet er et forsøg på at fremstille en karikaturmodel, der indfanger visse aspekter af væskedynamisk opførsel. På trods af det fysiske udgangspunkt er det en matematisk undersøgelse af geodæter på højdimensionelle mangfoldigheder, så det vil interessere læseren, der beskæftiger sig med og interesserer sig for højdimensionel differentialgeometri.

For at læse projektet er det en nødvendighed at være bekendt med matematisk notation, argumentation og bevisførelse svarende til, hvad der kan opnås ved en bachelor i matematik.

Projektet er rent matematisk, på trods af at inspirationen kommer fra fysiske fænomener, som i skrivende stund bliver undersøgt på grundforskningscenteret "Glas og Tid" under NSM på Roskilde Universitet. Derfor er det ikke nødvendigt at have kendskab til den underliggende fysik, når projektet læses. Hvis den fysikkyndige interesserede læser ønsker en dybere redegørelse for problemstillingen, henvises vedkommende til artiklen [7], hvor den fysiske baggrund gennemgås.

## 1.5 Metode

Første del af projektet vil for os gå med at tilegne os en tilstrækkelig matematisk viden, for at kunne konstruere en mangfoldighed og undersøge den med henblik på geodætbevægelse. For at dette er muligt, bliver vi nødt til, gennem rent litteraturstudie af matematiske lærebøger, at blive fortrolige med den nødvendige differentialgeometri og ergodeteori.

Det er desuden nødvendigt at forstå den bagomliggende fysik, for at vi kan inkludere enkelte vigtige fysiske betingelser, når mangfoldigheden skal konstrueres. Den bagomliggende fysik vil ikke få sit eget teoriafsnit, men den fysiske inspiration til og idéerne bag projektet er præsenteret i indledningen.

Når fysikken og differentialgeometrien er på plads, er det muligt at analysere mangfoldigheden  $\mathcal{M}$ , der er beskrevet nærmere i afsnit 2.1. Undersøgelser og simuleringer af denne mangfoldighed, bliver de bærende dele af projektet, da det er dem, der skal ligge til grund for den karikaturmodel, vi ønsker at opstille.



Til undersøgelsen af mangfoldigheden er det nødvendigt at have kendskab til algoritmen beskrevet i [7]. I den sammenhæng vil vi verificere den og undersøge den for usikkerheder, for dernæst at være i stand til at kunne benytte den i forbindelse med  $\mathcal{M}$ . Sammen med algoritmen skal der laves et program, der gør det muligt for os at bestemme geodæter på den dertil konstruerede mangfoldighed, så vi kan efterprøve vores hypotese om geodætbevægelser fra en omegn af ét toppunkt til et andet. Når vi er i stand til at undersøge det, vil der blive arbejdet med variationer af de indgående parametre i mangfoldigheden, så vi kan undersøge geodætbevægelsen i særlige tilfælde.

## 1.6 Opbygning af rapporten

Til at starte med ønsker vi at klargøre kravene til valget af mangfoldighed samt at præsentere den konstruktion, som vi slutteligt valgte at benytte. I samme afsnit præsenteres en matematisk undersøgelse af mangfoldigheden med fokus på variationer af relationer mellem den indgående faktor  $\epsilon$  og antallet af dimensioner  $N$ . Efterfølgende præsenteres algoritmen, som giver os mulighed for at undersøge geodætbevægelse langs en hyperflade. Afsnittet indeholder desuden en beskrivelse af vores programmeringsarbejde samt en undersøgelse af usikkerhederne i dette. Dernæst præsenteres vores simuleringsresultater sammen med en vurdering af modellens muligheder for at beskrive de i indledningen omtalte fysiske fænomener. Slutteligt diskuteres og konkluderes på det udførte arbejde, før der perspektiveres over dette.



## 2 Præsentation og undersøgelse af $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$

Dette afsnit indeholder en præsentation og undersøgelse af kravene til og egenskaberne ved vores punktmængde, herfra betegnet  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvor der blandt andet redegøres for ved hvilke værdier af  $\epsilon \in \mathbb{R}_+$  og  $N \in \mathbb{N}$ , at den besidder de nødvendige egenskaber for at være en mangfoldighed. Derudover foretages en matematisk analyse for at undersøge særligt interessante egenskaber og begrænsninger, den eventuelt måtte besidde. Arbejdet med  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , i dette afsnit, vil danne det teoretiske grundlag for at kunne undersøge vores hypotese, som vi vender tilbage til i afsnit 3.

### 2.1 Præsentation af $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$

Vi ønsker at konstruere en mangfoldighed  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , således at  $\mathcal{M} \subset \overline{B}^N$  og  $\Omega = \mathcal{M}_{\epsilon,N} \cap \partial B^N$  består af et endeligt antal punkter, for hvilke der gælder, at afstanden til et nabopunkt i  $\Omega$  er den samme for alle punkter i  $\Omega$ . Dette medfører, at mangfoldigheden skal indeholde en høj grad af symmetri omkring akserne. Med udgangspunkt i algoritmen beskrevet i [7] ønsker vi at definere funktionen  $\Phi_{\epsilon,N}$ , som har  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  som sin nulpunktsmængde,

$$\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N \left( x_i^2 - \frac{1}{N} \right)^2 - 1 \quad (2.1)$$

$$\mathcal{M}_{\epsilon,N} = \{ \bar{x} \in \mathbb{R}^N \mid \Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = 0 \} \quad (2.2)$$

Vi vil i første omgang beskrive nogle karakteristika for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  og senere vise, hvornår den er en glat mangfoldighed.

Ved at definere  $\Phi_{\epsilon,N}$  således genereres en punktmængde, der er interessant at arbejde med, og som opfylder begge de tidligere beskrevne krav; at antallet af elementer i  $\Omega$ , skulle være endeligt, og den skulle være indeholdt i  $\overline{B}^N$ . For  $\bar{x} \in \mathcal{M}_{\epsilon,N} \cap \partial B^N$  ved vi, at  $\sum_{i=1}^N x_i^2 = 1$  og  $\Phi_{\epsilon,N} = 0$ , hvoraf der følger, at

$$\sum_{i=1}^N \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)^2 = 0 \quad (2.3)$$

hvilket giver  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  toppunkter i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N} \cap \delta B^N = (\pm 1/\sqrt{N}, \dots, \pm 1/\sqrt{N})$ . Vi ser altså, at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N} \neq \emptyset$  og besidder i alt  $2^N$  toppunkter i  $(\bar{x}) = (\pm 1/\sqrt{N}, \dots, \pm 1/\sqrt{N}) \in \Omega$ . For et givent  $N$  vil normen i de lokale minima blive funktioner af størrelsen  $\frac{1}{\epsilon}$ . Da begge sumled nødvendigvis må være ikke-negative, vil det ikke være muligt at opnå en norm  $\sqrt{\sum_{i=q}^N x_i^2} > 1$ , så længe  $\Phi_{\epsilon,N} = 0$ . Derfor må  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  nødvendigvis være indeholdt i enhedskuglen. Vi vil nu vise, hvilke steder der kan findes ekstremer for normen på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ .

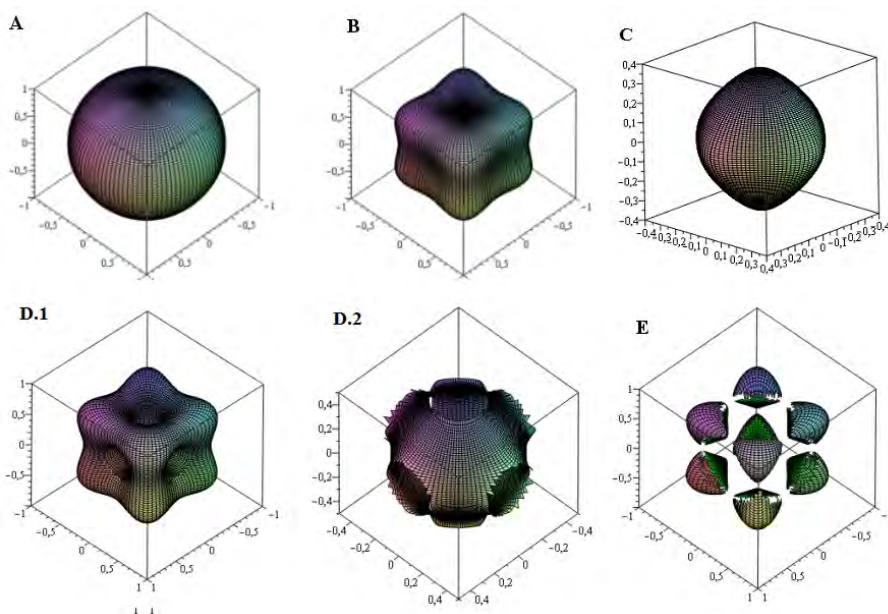
## 2.2 Betydningen af $\epsilon$

Vi har i arbejdet med mangfoldigheden undersøgt mange forskellige forhold mellem  $N$  og  $\epsilon$ , da små variationer i disse har stor indflydelse på, hvordan mangfoldigheden udformer sig. På figur 2.1 ses seks illustrationer af varianter af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  ved stigende værdier af  $\epsilon$  for  $N = 3$ . Ved at lave denne type plot gik det op for os, at vores manifoldighed ændrede struktur, når  $\epsilon$  nåede op over en bestemt grænse. Dels observerede vi en ny indre løsningsmængde, der voksede frem inden i den anden, når  $\epsilon$  blev tilpas stor, og derudover opstod en række ”øer” omkring toppunkterne  $(\pm 1/\sqrt{N}, \dots, \pm 1/\sqrt{N})$ , som var forbundet med hver tre ”broer”, der førte hen til tre nabotoppunkter. Derudover så vi, at den indre og ydre punktmængde tilsyneladende var disjunkte. Dette var en uventet opdagelse, og ved yderligere arbejde blev det klart for os, at de huller, der opstod, begyndte dér, hvor afstanden til origo var mindst; ved skæring mellem  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  og akserne. Ved gradvis forøgelse af  $\epsilon$  blev hullerne større og større, indtil broerne kun var sammenhængende i et enkelt punkt. Øgedes  $\epsilon$  over dette punkt, blev forbindelsen mellem øerne brudt. Dette førte til yderlige idéer til undersøgelser; dels hvornår den indre punktmængde opstod, dels ved hvilke værdier af  $N$  og  $\epsilon$  der begynder at komme huller i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , og dels hvornår det bliver en umulighed at gå fra et toppunkt til et andet, det vil sige, når  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  bliver usammenhængende.

### Ekstremer for normen på $\mathcal{M}$

De første huller i figuren opstår dér, hvor den mindste norm observeres. Derudover lader det til, at normen af et punkt  $\bar{x}$  er afgørende for, ved hvor høj en værdi for  $\epsilon$  punktet stadig er en del af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Dette gav os lyst til at undersøge ekstremer for normen i overensstemmelse for, hvad der ses, når  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  plottes.

I første omgang vil vi bestemme toppunkter og bundpunkter for  $\mathcal{M}$  ved hjælp af variationsregning baseret på [5]. Her vil vi finde ekstremer for normen, som har det velkendte udtryk  $\|\bar{x}\|^2 = \sum_i x_i^2$ . Dette ønskes gjort med kravet, som definerer  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , nemlig at  $\Phi = 0$ . Således er funktionen for vores kvadrerede



Figur 2.1: Figuren viser  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  plottet i tre dimensioner med fem forskellige  $\epsilon$ -værdier. Billederne A og B er plottet ved henholdsvis  $\epsilon = 0, 1$  og  $\epsilon = 2$ . På figur C er  $\epsilon = 3,3$  og der vises den indre løsningsmængde. På figurerne D.1 og D.2 ses den indre og den ydre løsningsmængde, for  $\epsilon = 4$ . E viser  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  adskilt i 8 indre og 8 ydre punktmængder, ved  $\epsilon = 5$ .

norm

$$f(\bar{x}) = \sum_i^N x_i^2 \quad (2.4)$$

samt

$$\Phi(\bar{x}) = \sum_i^N x_i^2 + \sum_i^N \left( x_i^2 - \frac{1}{N} \right)^2 - 1 \quad (2.5)$$

Vi indfører nu en lagrangemultiplikator  $\lambda$  og opskriver funktionen

$$\Lambda(\lambda, x_1, \dots, x_N) = f(x_1, \dots, x_N) + \lambda \Phi(x_1, \dots, x_N) \quad (2.6)$$

Derefter løses ligningssystemet

$$\nabla_{\lambda, x_1, \dots, x_N} \Lambda(\lambda, x_1, \dots, x_N) = 0 \quad (2.7)$$

som består af ialt  $N + 1$  ligninger. Da der er tale om en god del symmetri for ligningerne, vil man få følgende generelle udtryk for den  $x_k$ 'te afledte som funktion af  $\lambda$

$$\frac{\partial \Lambda(\lambda, x_1, \dots, x_N)}{\partial x_k} = 0 \Leftrightarrow x_k = 0 \vee \pm \frac{1}{2} \frac{\sqrt{-2\lambda\epsilon N(-N + \lambda N - 2\lambda\epsilon)}}{\lambda\epsilon N} \quad (2.8)$$

Således finder man, at et toppunkt findes der, hvor den absolutte værdi af alle  $x_k$  er ens og er givet ved værdien  $\pm\sqrt{1/N}$  som forventet. Tilsvarende får man, at det mindste bidrag til normen, når en variabel antager værdien 0, er uafhængigt af de andre variable.

Opdagelsen af dette, sammen med at det kunne ses, at den indre løsning opstod i punktet  $(0, 0, \dots, 0)$  og voksede derfra, gjorde, at vi overvejede, om der fandtes et  $\epsilon$  således, at origo kunne være en løsning til  $\Phi$ . Dette opnås, når  $\epsilon = N$ , og en undersøgelse af  $\epsilon$ -værdier omkring denne viste, at det netop var her, den indre løsning opstod.

Ser man på figur 2.1, som viser den 3-dimensionelle udgave af vores mangfoldighed, vil man se, at mangfoldigheden begynder at have huller i sig, kort efter at  $\epsilon$  er blevet større end  $N$ . Lader man  $\epsilon$  stige yderligere, vil man på et tidspunkt se, at mangfoldigheden bliver usammenhængende. Man kan videre overbevise sig om, at den i grænsen  $\epsilon \rightarrow \infty$  kun vil bestå af de  $2^N$  toppunkter, som opfylder  $\Phi_{\epsilon, N} = 0$ . Vi vil nu se på, hvornår der generelt opstår huller, og tilsvarende hvornår mangfoldigheden bliver usammenhængende.

Vi ved, at det mindste bidrag til normen kommer, når en variabel  $x_k$  antager værdien 0. Dermed sætter vi alle variable på nær én til 0 og finder værdien af den sidste, så denne opfylder kravet fra  $\Phi$ . Gør man dette, finder man, at den højeste værdi for  $\epsilon$ , hvor  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  er enkeltssammenhængende, er givet ved

$$\epsilon = \pm \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right) \quad (2.9)$$

Da  $\epsilon > 0$ , ses der bort fra det negative resultat. Således forventes der huller når

$$\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right) \quad (2.10)$$

For at finde den værdi af  $\epsilon$ , hvor fladen bliver usammenhængende, skal det sidste punkt, som forbinder de forskellige fladestykker, findes. For at gå fra et toppunkt til et andet vil en af koordinaterne skifte fortegn, og således vil man passere igennem et punkt, hvor denne har værdien 0. For mængden af punkter på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , hvor en koordinat  $x_k = 0$ , vil man ved brug af variationsregning få, at den maksimale norm findes, når alle andre koordinater er ens. Man finder i dette tilfælde, at lagrangemultiplikatoren er givet som

$$\lambda = \pm \frac{\sqrt{(N^3 - N^2 + 4N\epsilon - 4\epsilon^2)(N-1)N}}{N^3 - N^2 + 4N\epsilon - 4\epsilon^2} \quad (2.11)$$

Ved at se på kvadratroden kan vi finde den maksimale værdi af  $\epsilon$  som funktion af  $N$ , for hvilket der stadig findes en reel værdi af  $\lambda$ . Gør man dette, finder man at

$$\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right) \quad (2.12)$$

laver usammenhængende fladestykker. Igen ses der bort fra negative værdier af  $\epsilon$ .

Det er muligt at lave et hurtigt tjek for, om de to ligninger 2.10 og 2.12 stemmer overens. De to må nemlig forventes at være ens når  $N = 2$ , idet at opståelsen af et hul samtidig betyder, at fladestykkerne bliver usammenhængende, når vi befinder os i to dimensioner. Sætter man de to ligninger lig hinanden, får man at

$$\frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right) = \frac{1}{2} (\sqrt{N^3} + N) \Rightarrow N = \{0, 2\} \quad (2.13)$$

Således stemmer de to ligninger overens ved  $N = 2$  som forventet.

### Plot i 2- og 3-dimensioner

Da det er muligt at plotte vores mangfoldighed for  $N = 2$  og  $N = 3$ , kan vi plotte forskellige værdier af  $\epsilon$  ud fra de to ligninger 2.10 og 2.12. De viste plots bliver lavet ved transformationen  $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow \Phi(r, \theta, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N-2})$ , hvor det almindeligvis gælder, at  $(r, \theta, \phi_1, \dots, \phi_{N-2}) \in [\mathbb{R}_+ \cup \{0\}] \times [0, 2\pi) \times [0, \pi) \times \dots \times [0, \pi)$ .

For  $N = 2$  fås således, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  er defineret ved de punkter, der opfylder at

$$0 = \Phi(r, \theta) = -1 + r^2 + \epsilon \left( \left( (r \sin(\theta))^2 - 1/2 \right)^2 + \left( (r \cos(\theta))^2 - 1/2 \right)^2 \right) \quad (2.14)$$

Isolerer  $r$ , kan denne plottes som funktion af  $\theta$ . Gør man dette, får man fire løsninger, som parvist har modsat fortegn, således at der er to løsninger, som er interessante at se på. På figur 2.2 ses  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  plottet, og som forventet brækker figuren i flere stykker, når  $\epsilon > 2.414$  som forudsagt af ligningerne 2.10 og 2.12. For værdier af  $\epsilon > N$  er den ene af de to løsninger for  $r$  imaginær og derfor uinteressant for os. For de højere værdier af  $\epsilon$  er der ingen imaginære løsninger, og som man kan se, 'lukker' de to løsninger sig sammen til små adskilte flader.

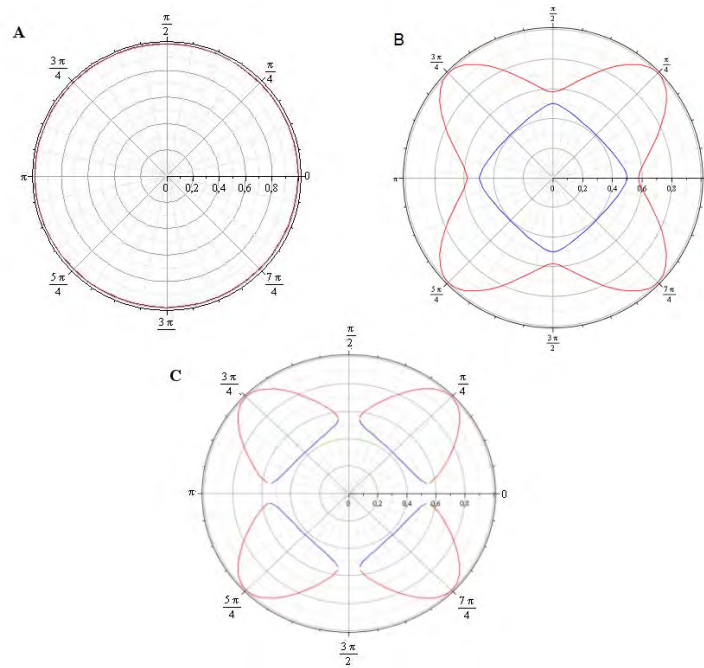
Går man en dimension op til  $N = 3$  og benytter samme fremgangsmåde som for  $N = 2$ , får man, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  er defineret for de punkter, som opfylder ligningen

$$0 = \Phi(r, \theta, \phi_1) = -1 + r^2 + \epsilon \left( \left( (r \cos(\theta) \sin(\phi_1))^2 - 1/3 \right)^2 + \left( (r \sin(\theta) \sin(\phi_1))^2 - 1/3 \right)^2 + \left( (r \cos(\phi_1))^2 - 1/3 \right)^2 \right) \quad (2.15)$$

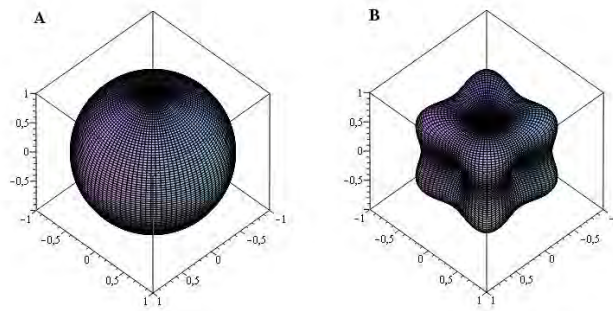
Fra ligning 2.10 forventes der for  $\epsilon > 3.337$  at opstå huller i  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Tilsvarende kan vi fra ligning 2.12 forvente, at man for  $\epsilon > 4.098$  vil se, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  brækker over i flere stykker.

I figurerne 2.3-2.5 ses plot af  $\mathcal{M}$  i hver af de tre forskellige områder for  $\epsilon$ . Som man kan se, stemmer de viste plot fuldt overens med, hvad der forventes.

Disse resultater indikerer, at ligning (2.10) og (2.12) stemmer overens med forudsigelsen om, hvornår  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  får huller og bliver usammenhængende. Dermed

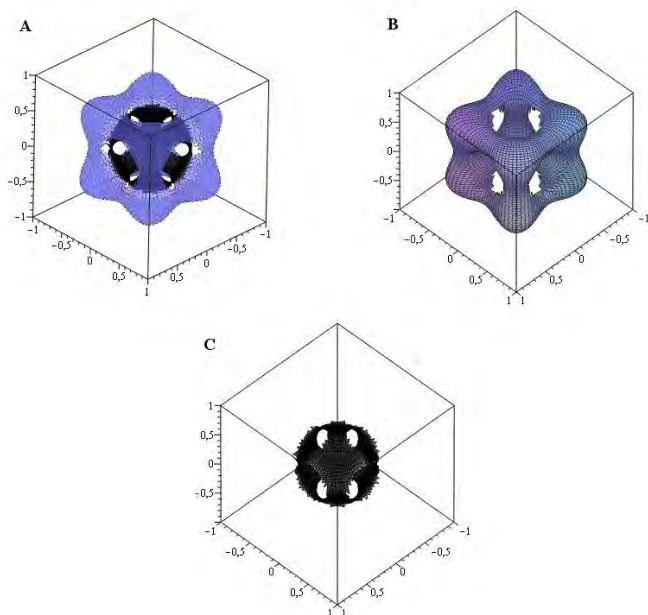


Figur 2.2: Figuren viser plots for  $\epsilon = 0$ ,  $2.4$  og  $2.44$  på hhv. figur A, B og C. Som man kan se, fås en kugle når  $\epsilon = 0$ . For  $\epsilon = 2.4$  fås to sammenhængende flader som forventet; en ydre og en indre. For  $\epsilon = 2.44$  fås usammenhængende fladestykker bestående af en indre og en ydre punktmængde.

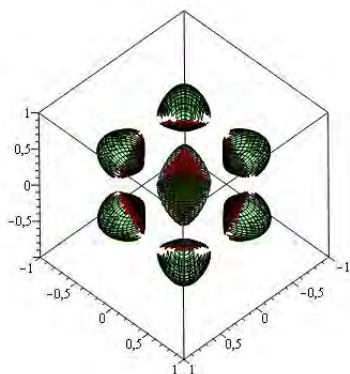


Figur 2.3: Figuren viser plots for A:  $\epsilon = 0$  og B:  $\epsilon = 3.337$ . Ved meget lave værdier af  $\epsilon$  er  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  tilnærmelsesvis givet ved en kugle. For højere værdier af  $\epsilon$  begynder kuglen at deformere i et mere bakket landskab. Som forventet kommer der ingen huller i figuren for disse værdier af  $\epsilon$ .





Figur 2.4: Figuren viser plots for  $\epsilon = 3.7$ . Det ses her, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  har tydelige huller. Dertil ses det, at der er to løsningsmængder, som opfylder at  $\Phi = 0$ . På A ses de to løsningsmængder sammen. På B og C ses de to hver for sig.



Figur 2.5: Figuren viser plots for  $\epsilon = 4.3$ . Her er  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  blevet usammenhængende, og igen ser de to løsningsmængder ud til at give små lukkede flader.

kan disse bruges til at justere  $\epsilon$  i forhold til den værdi af  $N$ , der ønskes at simuleres ved. I hver enkelt simulering vil det være muligt at eftervise, om de valgte værdier af  $\epsilon$  stemmer over med, hvad man ville forvente. Således må det være naturligt at tro, at tiden, som det tager at gå fra et toppunkt til et andet, vokser i takt med, at hullerne i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  vokser. Det er i den sammenhæng interessant at undersøge, hvor meget længere tid det tager at gå fra et toppunkt til et andet, når  $\epsilon$  stiger. For høje værdier af  $\epsilon$  forventes det videre at være umuligt at komme fra et toppunkt til et andet, da der ganske simpelt ikke er nogen vej, der forbinder dem.

### 2.3 Kritiske punkter

Punktmængden  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er praktisk at arbejde med i flere henseender, men for at det overhovedet er muligt at tale om geodætbevægelse, må det vises for hvilke værdier af  $\epsilon$  og  $N$ , at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er en mangfoldighed. Som vi tidligere har set, er der tydeligvis topologiske ændringer i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  for visse værdier af  $\epsilon$  og  $N$ , hvilket indikerer tilstedeværelsen af kritiske punkter [11]. Derfor undersøges det, hvornår 0 er en kritisk værdi for  $\Phi_{\epsilon,N}$ .

De kritiske punkter på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  eksisterer, hvis

$$\exists \bar{x} \in \mathcal{M}_{\epsilon,N} | \nabla_{\bar{x}} \Phi_{\epsilon,N} = \sum_i^N 2x_i \left(1 + 2\epsilon \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)\right) \hat{x}_i = 0 \quad (2.16)$$

hvor  $\hat{x}_i$  indikerer enhedsvektoren for den  $i$ 'te komponent. Da hullerne opstår på akserne, vil det være naturligt at undersøge netop punkter på akserne, givet ved  $\bar{x} = (0, \dots, 0, x_i, 0, \dots, 0)$ , for kritiske punkter. Da  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er symmetrisk omkring alle hyperplaner, kan vi nøjes med at lede efter et kritisk punkt på en enkelt akse,  $\bar{x}_1 = (x, 0, \dots, 0)$ .  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}_1)$  er givet ved

$$\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}_1) = x^2 + \epsilon \left( x^4 + \frac{1}{N} - \frac{2x^2}{N} \right) - 1 \quad (2.17)$$

Løser vi  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}_1) = 0$  med hensyn til  $x$  for  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$  finder vi løsningerne

$$x = \pm \frac{\sqrt[4]{N}}{\sqrt[4]{N-1} \sqrt{\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N}} \quad (2.18)$$

Indsættes disse i ligning (2.16), finder vi for  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$

$$\nabla \Phi(\bar{x}_1) = 0 \quad (2.19)$$

Vi ser da, at punktmængden  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  ikke er regulær for  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$ , da  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  her indeholder  $2N$  kritiske punkter givet ved

$$\bar{x} = \left( 0, \dots, \pm \frac{\sqrt[4]{N}}{\sqrt[4]{N-1} \sqrt{\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N}}, \dots, 0 \right), \quad i \in \{1, 2, \dots, N\} \quad (2.20)$$

Dette resultat medfører, som nævnt, en ændring af topologien af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvilket ses ved, at der opstår huller omkring akserne i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  for  $\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$ .

På tilsvarende måde undersøger vi nu tilfældet  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right)$  for kritiske punkter, da  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  bliver usammenhængende for  $\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right)$ . Dette gør vi i punktet  $(0, x, x, \dots, x)$ , da dette er det eneste punkt, hvor punktmængden  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er sammenhængende for  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right)$ . Igen er det kun nødvendigt at undersøge dette enkelte punkt, da  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er symmetrisk omkring samtlige hyperplaner.  $\Phi_{\epsilon,N}$  er da givet som

$$\Phi_{\epsilon,N} = (N-1) \left( x^2 + \epsilon \left( x^4 - \frac{2x^2}{N} \right) \right) - 1 + \frac{\epsilon}{N} \quad (2.21)$$

Løses dette for  $\Phi_{\epsilon,N} = 0$  med hensyn til  $x$ , finder vi

$$x = \pm \sqrt{\frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N^3} + N}} \quad (2.22)$$

Disse  $x$  indsættes nu i gradienten til punktet  $(0, x, x, \dots, x)$

$$\nabla_{\bar{x}} \Phi_{\epsilon,N} = 2(N-1)x \left( 1 + 2\epsilon \left( x^2 - \frac{1}{N} \right) \right), \quad \epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right) \quad (2.23)$$

og vi ser at

$$\nabla_{\bar{x}} \Phi_{\epsilon,N} = 0 \quad (2.24)$$

Punktmængden  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er dermed ikke regulær for  $\epsilon = \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right)$ . Antallet af kritiske punkter  $E$  kan her findes ved formelen at anvende formelen for antallet af  $m$ -dimensionelle elementer der ligger på randen af en  $N$ -dimensionel hyperkub, givet ved

$$E_{N,m} = 2^{N-m} \frac{N!}{m!(N-m)!} \quad (2.25)$$

Derfor indeholder  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  i dette tilfælde  $2^N \frac{N}{2}$  kritiske punkter

$$\bar{x} = (x, x, \dots, 0, \dots, x, x), \quad x = \pm \sqrt{\frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N^3} + N}} \quad (2.26)$$

De kritiske punkter medfører en topologiændring for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , der bryder  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  op i  $2^{N+1}$  mindre flader  $m_i \subset \mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvor  $\bigcup m_i = \mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , når  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ .

Ud over de to ovennævnte punkter er 0 også en kritisk værdi for  $\Phi$  på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , når  $\epsilon = N$ . Dette skyldes, at punktet  $(0, 0, \dots, 0)$  er en del af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  i dette tilfælde, og dette punkt giver som nævnt en gradient der er 0. Den topologiske ændring af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er i dette tilfælde, at den indre løsning begynder at vokse op inden i den ydre løsning. Vi vil dog i den følgende analyse se bort fra dette kritiske punkt, da der ikke er nogen forbindelse mellem de to løsningsmængder før  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ . Derfor er der heller ikke nogen geodætovergang mellem de to løsningsmængder eller nogen effekt på algoritmen.

## 2.4 $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ som mangfoldighed

På grund af de kritiske punkter er det for  $\epsilon$ -værdierne  $\epsilon = 1/2(\sqrt{N^3/N-1} + N)$  og  $\epsilon = 1/2(\sqrt{N^3} + N)$  ikke muligt at benytte  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  i vores arbejde, da den her ikke er en mangfoldighed. Man kunne indvende det samme mod punktmængden for  $\epsilon = N$ , men da det kritiske punkt på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  her er fuldstændigt afskåret fra resten af punktmængden, har vi valgt at antage, at vi kan se bort fra dette. Det burde ikke påvirke de lokale egenskaber ved  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , som er dem, vi senere udnytter i algoritmen til at danne geodæter.

Det ønskes nu vist, ved hjælp af et teorem om originalmængder, at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er en mangfoldighed for de værdier af  $\epsilon$  og  $N$ , hvor  $\Phi_{\epsilon,N}$  ikke har en kritisk værdi.

Fra [18] har vi følgende teorem: Lad  $F : X \subset \mathbb{R}^{k+n} \rightarrow \mathbb{R}^n$  være en glat funktion på en åben mængde  $X$  i  $\mathbb{R}^{k+n}$ . Hvis  $y$  er en regulær værdi af  $F$ , da er mængden

$$F^{-1}(y) = \{x : F(x) = y\} \quad (2.27)$$

en  $k$ -dimensionel mangfoldighed i  $\mathbb{R}^{k+n}$ .

F svarer i vores tilfælde til funktionen  $\Phi_{\epsilon,N}$ . Da der gælder for denne, at  $\Phi_{\epsilon,N} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ , vælger vi  $k$  til at være  $N - 1$ ,  $n$  til at være 1 og  $y$  til at være 0, således at  $x$  svarer til alle punkter,  $\bar{x}$ , for hvilke der gælder, at  $\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = 0$ . Da vil vores punktmængde være en  $N - 1$ -dimensionel mangfoldighed, så længe sammensætningen af  $\epsilon$  og  $N$  ikke resulterer i kritiske punkter.

Vi går nu videre til at undersøge, hvilke egenskaber  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  indeholder, når der varieres på  $N$  og  $\epsilon$ .

## 2.5 Sammenhæng mellem løsningsmængder

Da vi har to løsningsmængder for  $\Phi_{\epsilon,N} = 0$ , kunne det være interessant at se, om disse løsningsmængder er sammenhængende for  $\epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + 1)$ .

For at undersøge om der findes steder, hvor løsningerne hænger sammen, anvendes en funktion  $x_{j,l}$ , som giver et koordinat givet de resterende  $N - 1$  koordinater.  $x_{j,l}$  fremkommer ved at isolere koordinat  $x_j$  i udtrykket for  $\Phi(\bar{x}) = 0$  således:

$$\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = \sum_{i=1}^N (x_i)^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)^2 - 1 = 0 \quad (2.28)$$

$$x_j^2 + \sum_{i \neq j}^N x_i^2 + \epsilon \left(x_j^2 - \frac{1}{N}\right)^2 + \epsilon \sum_{i \neq j}^N \left(x_i^2 - \frac{1}{N}\right)^2 - 1 = 0 \quad (2.29)$$

$$x_j^2 \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}\right) + x_j^4 + \frac{1}{N} + \sum_{i \neq j}^N \left[x_i^4 + x_i^2 \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}\right)\right] - \frac{1}{\epsilon} = 0 \quad (2.30)$$

$x_j^2$  løses her som en 2.gradsligning

$$x_j^2 = \frac{1}{N} - \frac{1}{2\epsilon} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right)^2 - \frac{1}{N} + \frac{1}{\epsilon} - \sum_{i \neq j}^N \left[x_i^4 + x_i^2 \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}\right)\right]} \quad (2.31)$$

$$x_{j,l} = \pm \sqrt{\frac{1}{N} - \frac{1}{2\epsilon} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right)^2 - \frac{1}{N} + \frac{1}{\epsilon} - \sum_{i \neq j}^N \left[x_i^4 + x_i^2 \left(\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}\right)\right]}} \quad (2.32)$$

hvor  $l = 1, 2, 3, 4$  svarende til hver af de 4 løsninger til  $x_j$ . Dette er ikke et generelt kort for mangfoldigheden, da vi ved, at der er singulariteter for de værdier af  $\epsilon$ , der giver kritiske punkter.

For at de to løsningsmængder skal være sammenhængende, skal der gælde, at den indre kvadratrod i ligning (2.32) skal give 0, da der i dette tilfælde, kun vil være to løsninger til  $x_{j,l}$ . Dette er opfyldt når

$$\sum_{i \neq j}^N x_i^2 = \frac{\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right)^2 - \frac{1}{N} + \frac{1}{\epsilon} - \sum_{i \neq j}^N x_i^4}{\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}} \quad (2.33)$$

Det skal så undersøges, om dette giver en løsning til  $\Phi_{\epsilon,N} = 0$ . Vi ved fra ligning (2.29), at  $\Phi_{\epsilon,N}$  kan skrives som

$$\Phi_{\epsilon,N} = x_{j,l}^2 + \sum_{i \neq j}^N x_i^2 + \epsilon x_{j,l}^4 + \epsilon \sum_{i \neq j}^N x_i^4 - \frac{2\epsilon}{N} (x_{j,l}^2 + \sum_{i \neq j}^N x_i^2) - \frac{\epsilon}{N} - 1 \quad (2.34)$$

Da den indre kvadratrod i  $x_{j,l}$  i dette tilfælde er 0 fås for  $\Phi_{\epsilon,N}$

$$\begin{aligned} \Phi_{\epsilon,N} &= \frac{1}{N} - \frac{1}{2\epsilon} + \frac{\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right)^2 - \frac{1}{N} + \frac{1}{\epsilon} - \sum_{i \neq j}^N x_i^4}{\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}} + \epsilon \left(\frac{1}{N} - \frac{1}{2\epsilon}\right)^2 + \\ &\epsilon \sum_{i \neq j}^N x_i^4 - \frac{2\epsilon}{N} \left(\frac{1}{N} - \frac{1}{2\epsilon} + \frac{\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right)^2 - \frac{1}{N} + \frac{1}{\epsilon} - \sum_{i \neq j}^N x_i^4}{\frac{1}{\epsilon} - \frac{2}{N}}\right) - 1 \end{aligned} \quad (2.35)$$

hvilket reducerer til

$$\Phi_{\epsilon,N} = \frac{-\epsilon}{N} \quad (2.36)$$

Altså findes der kun løsninger når  $\epsilon = 0$ .

Langt vigtigere er det, om  $\Phi_{\epsilon,N}$  kan have uendeligt mange kritiske punkter. Dette kan dog nemt afvises, da vi ved fra ligning (2.16), at gradienten kun er nul, når

$$x_i = 0 \vee x_i = \pm\left(\frac{1}{2\epsilon} - \frac{1}{N}\right) \quad (2.37)$$

for  $i \in \{1, \dots, N\}$ , hvilket kun giver  $3^N$  mulige løsninger for  $x_i$ , og det er ikke sikkert, at disse løsninger er med i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Af dette konkluderer vi, at de to løsningsmængder er disjunkte, når ikke  $\Phi_{\epsilon,N}$  har et kritisk punkt, og at de er åbne.

Det er nu blevet vist, at der er tre topologisk forskellige mangfoldigheder  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  for forskellige valg af  $\epsilon$  til et givent  $N$ . Derudover har vi vist, at den indre og den ydre løsningsmængde er disjunkte, når 0 ikke er en kritisk værdi for  $\Phi_{\epsilon,N}$ . Vi vil senere undersøge, dels opførslen af geodæterne på hver af de tre forskellige typer mangfoldigheder, og dels hvad der sker med geodæterne omkring områderne mellem de to løsninger. Vi vil nu introducere algoritmen fra [7] samt vores implementering af denne.

## 3 Implementering af modellen

Dette afsnit indeholder det arbejde, der ligger op til kørslen af vores simuleringer. Først vises en udledning af  $NVU$ -algoritmen, da vi, før vi kan arbejde med den, må være sikre på, at den rent faktisk laver geodæter på mangfoldigheder. Efterfølgende kommer et afsnit, der bringer en beskrivelse af al den programmering, der er foretaget i projektet, og til slut vil vi med diverse testkørsler vise, at programmet virker, samt undersøge hvor store usikkerheder der er forbundet med simuleringerne.

### 3.1 Udledning af $NVU$ -algoritmen

Da vi nu ved, at vores valgte  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  opfylder de kriterier, vi har opsat for vores mangfoldighed, kan vi nu begynde at se nærmere på den algoritme, der skal benyttes i modellen for geodæter på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Vi starter derfor med at udlede og gennemgå  $NVU$ -algoritmen fra [7]. Udledningen følger i store skridt gennemgangen i artiklen, men med uddybninger af de enkelte skridt undervejs. De få forskelle, der ligger i gennemgangen, ses primært ved, at der i den originale artikel arbejdes med tanke på konstant potentiel energi og fysiske kræfter i systemet, hvor modellen kan udledes uden tanke på disse fysiske begreber, og kan forstås ud fra rene matematiske objekter

Selve algoritmen udledes ved at diskretisere vores geodætkurve og ende ud med, at en position  $\bar{x}_{j+1}$  på en geodæt på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er givet ved de to foregående skridt  $\bar{x}_j$  og  $\bar{x}_{j-1}$ .

Vi ser på en kurve  $\alpha(t) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^N$ .  $\alpha(t)$  kan fra et fysisk synspunkt forestilles at være parametriseret i forhold til tiden, men da det er længden af  $\alpha(t)$ , som er interessant, er parametrisering ikke vigtig, idet længden er uafhængig af parametrisering. For  $\alpha(t)$  kan vi finde dens længde mellem to punkter  $t_0, t \in [a, b]$  ved at benytte den første fundamental form

$$s(t) = \int_{t_0}^t \sqrt{I_{\alpha(r)}(\alpha'(r), \alpha'(r))} dr = \int_{t_0}^t \frac{ds}{dr} dr = \int_{t_0}^t ds \quad (3.1)$$

hvor  $ds$  betegner linjeelementet [10]. Således er  $s(t) : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$  et funktional.

Ved brug af variationsregning kan  $s(t)$  minimeres. Dette gøres ved at kræve, at  $\Phi(\alpha(t)) = 0$ , hvilket definerer  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Således bliver  $\alpha(t) : [a, b] \rightarrow \mathcal{M}_{\epsilon,N}$ .

Samtidigt skrives udtrykket for  $s(t)$  med kravet fra  $\Phi$  som

$$s(t)_\Phi = \int_{t_0}^t ds + \int_{t_0}^t \lambda \Phi(\alpha(r)) dr \quad (3.2)$$

hvor  $\lambda \in R$  er lagrangemultiplikatoren.  $s(t)$  vil dermed give længden af  $\alpha$  på  $\mathcal{M}$ . Vi kan nu minimere  $s(t)_\Phi$  ved at kræve at

$$\partial s(t)_\Phi = \partial \left( \int_{t_0}^t ds + \int_{t_0}^t \lambda \Phi(\alpha(r)) dr \right) = 0 \quad (3.3)$$

$\partial s(t)_\Phi$  vil minimere vores kurvelængde til den kortest mulige afstand mellem de to punkter, hvilket på en Riemannsk mangfoldighed betyder, at vi har en geodæt, som er, hvad vi gerne vil have. Laver vi integration ved substitution i det sidste led, kan vi skrive

$$\partial \left( \int_{t_0}^t ds + \int_{\alpha(t_0)}^{\alpha(t)} \lambda \Phi(\bar{x}) d\bar{x} \right) = 0 \quad (3.4)$$

Ligning 3.4 diskretiseres nu, så vi i stedet for et integrale over linieelementet får en sum over de enkelte linjestykker, der udgør vores geodæt.

$$\partial \left( \sum_j |\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1}| + \sum_j \lambda_j \Phi(\bar{x}_j) \right) = 0 \quad (3.5)$$

hvor  $|\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1}| = \sqrt{(\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1})^2}$ .

Hvis ligning 3.5 skal være opfyldt, må det nødvendigvis gælde, at udtrykket ikke ændres som funktion af vores position  $\bar{x}_i$ , hvilket vil sige, at den afledte med hensyn til  $\bar{x}_i$  er 0. Laver man denne differentiation med hensyn til  $\bar{x}_i$ , vil man se, at alle led i den første sum, bortset fra de to der indeholder  $\bar{x}_i$ , vil være 0. Således får man

$$\frac{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}{|\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}|} - \frac{\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i}{|\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_i|} + \lambda_i \nabla_{\bar{x}_i} \Phi = 0 \quad (3.6)$$

Idet vi på en geodæt bevæger os med konstant hastighed, og hvert skridt kan forstås som et tidsskridt, antages det nu, at vi i vores diskretisering har konstant skridtlængde

$$|\bar{x}_j - \bar{x}_{j-1}| \equiv l_0 > 0 \quad \forall j \quad (3.7)$$

Med denne antagelse er det nu muligt at omskrive ligning 3.6 til

$$(\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) + (\bar{x}_i - \bar{x}_{i+1}) + l_0 \lambda_i \nabla_{\bar{x}_i} \Phi = 0 \quad (3.8)$$



Nu sættes  $\vec{a}_i = (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})$  og  $\vec{b}_i = (\bar{x}_i - \bar{x}_{i+1})$ . Da vi har konstant skridtlængde, vil  $0 = \vec{a}_i^2 - \vec{b}_i^2 = (\vec{a}_i + \vec{b}_i) \cdot (\vec{a}_i - \vec{b}_i)$ . Da skalarproduktet er 0, betyder det, at  $(\vec{a}_i + \vec{b}_i)$  er ortogonal med  $(\vec{a}_i - \vec{b}_i)$ . Fra ligning 3.8 ved vi, at  $(\vec{a}_i + \vec{b}_i)$  og  $\nabla_{\bar{x}_i} \Phi$  er parallelle, da de summeres til 0. Det betyder dermed, at  $(\vec{a}_i - \vec{b}_i)$  er ortogonal på  $\nabla_{\bar{x}_i} \Phi$ , hvilket medfører, at

$$\begin{aligned} \nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_{i+1} - \bar{x}_{i-1}) &= 0 \Rightarrow \\ \nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot \bar{x}_{i+1} &= \nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot \bar{x}_{i-1} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Tager vi nu fat i ligning 3.8 og tager skalarproduktet med  $\nabla_{\bar{x}_i} \Phi$  og samtidig udnytter resultatet fra 3.9, kan man få et udtryk for  $l_0 \lambda_i$

$$\begin{aligned} \nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) + \nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i+1}) + \lambda_i l_0 (\nabla_{\bar{x}_i} \Phi)^2 &= 0 \Rightarrow \\ l_0 \lambda_i &= -2 \frac{\nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})}{(\nabla_{\bar{x}_i} \Phi)^2} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dette resultat kan substitueres ind i ligning 3.8

$$(\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) + (\bar{x}_i - \bar{x}_{i+1}) + \left( -2 \frac{\nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})}{(\nabla_{\bar{x}_i} \Phi)^2} \right) \nabla_{\bar{x}_i} \Phi = 0 \quad (3.11)$$

Isolerer  $\bar{x}_{i+1}$ , vil man se, at den udelukkende afhænger af de to foregående skridt  $\bar{x}_i$  og  $\bar{x}_{i-1}$ . Således får man

$$\bar{x}_{i+1} = 2\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1} - 2 \frac{[\nabla_{\bar{x}_i} \Phi \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})] \nabla_{\bar{x}_i} \Phi}{(\nabla_{\bar{x}_i} \Phi)^2} \quad (3.12)$$

Dermed kan en hvilken som helst simulering af geodæter på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  startes ved at udvælge punkter  $\bar{x}_0, \bar{x}_{-1} \in \mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , som repræsenterer vores startpunkt, og der hvor vi kom fra med afstanden  $|\bar{x}_1 - \bar{x}_0| = l_0$ . I det næste afsnit vil vi kontrollere, om  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  med denne algoritme er ergodisk, da dette vil lette arbejdet i undersøgelsen af hypotesen.

## 3.2 Ergodisitet af algoritmen

Vi vil i det følgende forsøge at vise om Birkhoffs sætning gælder for vores mangfoldighed sammen med  $NVU$ -algoritmen, se eventuelt appendiks A. Birkhoffs sætning siger, at hvis et sandsynlighedsrum med en transformation er ergodisk, vil det rummelige gennemsnit være det samme som det tidslige gennemsnit. Dette ville medføre, at hvis vi vælger arealet som mål, vil sandsynligheden for at være i en delmængde  $A \subset \mathcal{M}_{\epsilon, N}$  til en given tid være forholdet mellem arealet af  $A$  og arealet af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Dette er naturligvis ikke gældende for  $\epsilon > \frac{1}{2} (\sqrt{N^3} + N)$ , da ingen geodæter nogensinde vil nå andre punkter end dem, der ligger i samme "kvadrant", som geodætens startpunkt.

Vi definerer sandsynlighedsrummet  $X = \{(\bar{x}, \vec{v}_{\bar{x}}) | \bar{x} \in \mathcal{M}_{\epsilon, N} \text{ og } \vec{v} \in T_{\bar{x}}\mathcal{M}_{\epsilon, N}\}$ , hvor vi kun tillader tilpas små vektorer  $\vec{v}_i$ , med tilpas små vektorer menes her vektorer for hvilke geodæten frembragt ved eksponentiealafbildningen er unikke [10].

Borelmængden  $\beta$  på  $X$  er således alle disse elementer samt alle deres foreningsmængder, fællesmængder og relative komplemente af disse. Vi vælger vores  $\mu$  til at være det sædvanlige hyper-areal mål divideret med det totale areal. Vi vælger vores transformation  $S$  til at være ækvivalent med den i projektet tidligere beskrevet algoritme, hvor vi i stedet for vores punkt  $x_{i-1}$  vælger en vektor  $\vec{v}_i = \bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}$ , så vi bevæger os på samme geodæt

$$S(\bar{x}_i, \vec{v}_i) = \left( \bar{x}_i + \vec{v}_i - \frac{2\nabla_{\bar{x}_i}\Phi \cdot \vec{v}_i}{|\nabla_{\bar{x}_i}\Phi|^2} \nabla_{\bar{x}_i}\Phi, \vec{v}_i - \frac{2\nabla_{\bar{x}_i}\Phi \cdot \vec{v}_i}{|\nabla_{\bar{x}_i}\Phi|^2} \nabla_{\bar{x}_i}\Phi \right) \quad (3.13)$$

Denne definition skaber dog nogle problemer, da samme punkt godt kan optræde flere gange i  $X$  blot med forskellige vektorer. Af dette følger, at transformationen ikke er målbevarende. Eksempelvis kan man vælge et toppunkt  $\omega_i$  på vores mangfoldighed med mængden  $V_{\omega_i}$  af alle tilladte vektorer for dette punkt. Den har mål 0, men vores transformation vil transformere punktet til forskellige punkter, der alle er sammenhængende og derfor har et areal, der er større end 0, altså er  $\mu(S(\omega_i, V_{\omega_i})) > 0$ .

Dette betyder desværre, at vores mangfoldighed med denne transformation ikke er ergodisk i forhold til arealmål, hvilket vi ellers havde håbet på. Dette skyldes, at vores transformation ikke er entydigt bestemt ud fra et enkelt punkt men kræver både et punkt og en vektor. Hvis vi skulle have håb om at vores mangfoldigheden skulle være ergodisk, burde vektoren sandsynligvis indvolvers i målet på en eller måde. Dette betyder ikke nødvendigvis, at det rumlige gennemsnit er forskelligt fra det tidslige, og da almindeligvis er en forudsætning for fysiske systemer, går vi ud fra, at det gælder som en aproksimation for vores system for  $\epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ .

### 3.3 Programmet

Programmet, vi anvender til simulering, er skrevet i MatLab, da udregningerne der foretages ikke er særligt "tunge", og MatLab lader os arbejde med data på en meget ligefrem måde.

Programmet er bygget op om  $NVU$ -algoritmen, som blev gennemgået i forrige afsnit. Som inputparametre er valgt  $N$ ,  $\epsilon$  og antal skridt, samt eventuelle ekstra parametre til brug for dannelsen af startbetingelserne. I programmet konstrueres først to startpunkter,  $\bar{x}_0$  og  $\bar{x}_{-1}$ , da der i  $NVU$ -algoritmen benyttes to punkter, det nuværende og det tidligere, til at danne det næste punkt. Valget af det første er meget frit, mens valget af det andet styrer både retning og skridtlængde for den af algoritmen frembragte geodæt. Dannelsen af disse startpunkter har været en af vores helt store overvejelser, og vi har brugt forskellige fremgangsmåder i forskellige tilfælde.

Den måde, vi benyttede mest var en fremgangsmåde, der genererede et punkt tæt på punktet  $(1/\sqrt{N}, 1/\sqrt{N}, \dots, 1/\sqrt{N})$  og derefter et punkt tæt på det første genererede punkt. Det bør her bemærkes, at det af symmetri Grunde er tilstrækkeligt at benytte startpunkter med ikke negative koordinater, da der er en ækvivalens mellem mangfoldigheden i hver kvadrant.

Denne fremgangsmåde har den fordel, at den finder tilfældige punkter på mangfoldigheden og derved også forskellige retninger, men samtidig sørger den for, at de valgte geodæter kommer til at passere tæt forbi et toppunkt. Hvis hypotesen skal holde, burde det i princippet være ligegyldigt, hvor på mangfoldigheden startpunktet lå, da enhver geodæt, der begynder omkring et toppunkt, vil blive fanget ved det toppunkt i nogen tid, og enhver geodæt der starter i et bundpunkt, hurtigt ville bevæge sig mod et toppunkt for at blive fanget. Grunden til at vi valgte denne fremgangsmåde var, at vi ville være sikre på at komme i nærheden af et toppunkt, selv hvis hypotesen ikke holdt stik.

Ud over denne fremgangsmåde benyttede vi andre til at tjekke nogle bestemte egenskaber ved mangfoldigheden. Disse vil blive forklaret, hvor det er nødvendigt.

Når punkterne er dannet, sendes disse ind i et underprogram, der anvender algoritmen til at danne et nyt punkt, som igen benyttes til at danne endnu et punkt osv. indtil det ønskede antal skridt er nået. Undervejs i dette forløb anvendes en del underprogrammer, der hver har sin funktion. Blandt andet skal man i algoritmen benytte gradienten til  $\Phi$  for at finde det næste punkt. Da  $\Phi$  var så overordentlig simpel at regne på, blev dette gjort analytisk, således at det pågældende underprogram blot har en  $N$ -dimensionel vektor som input og returnerer gradienten til  $\Phi$  i det punkt, som denne vektor udpeger. Gradienten til  $\Phi$  blev, som tidligere nævnt, fundet til

$$\nabla\Phi = \sum_{i=1}^N 2x_i \left( 1 + 2\epsilon \left( x_i^2 - \frac{1}{N} \right) \right) \hat{x}_i \quad (3.14)$$

Når programmet har kørt det ønskede antal skridt, giver det som output normen af den  $N$ -dimensionelle vektor  $\bar{x}_i$ , der angiver positionen på mangfoldigheden i tidsskridtet  $i$ , og et fastsat antal koordinater i denne vektor, samt værdien af  $\Phi$  i punktet  $\bar{x}_i$  og skridtlængden regnet som  $|\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}|$ . De to første stykker data, er de egentlige resultater. Det er disse, der gør det muligt for os at se, hvordan geodætbevægelsen forløber på mangfoldigheden. Den første giver os en afstand fra origo, og den anden plotter systemet som  $N/2$  partikler i et 2-dimensionelt system, ved at betragte to på hinanden følgende koordinater som 1. og 2. koordinat for en partikel eller som en tidslig udvikling i de enkelte koordinater. De to sidste stykker data er snarere en kontrol af programmet.  $\Phi$  burde i princippet have værdien 0 overalt på vores mangfoldighed, og hvis man tager højde for de numeriske usikkerheder, kan værdien bruges til at kontrollere, at de punkter der bliver valgt, ligger tilstrækkeligt tæt på mangfoldigheden. Vi tillod i vores arbejde ikke afvigelse større end  $|\Phi| = 10^{-3}$ . Skridtlængden burde, som en konsekvens af den valgte algoritme, være konstant, hvilket er en anden måde at sikre, at algoritmen er blevet implementeret korrekt. Da vi

ønsker at lave lange simuleringer, udregnes alle disse ting for hvert 5. skridt, da vi regner dette for tilstrækkeligt ofte til at sikre en fornuftig mængde data, uden at hukommelsen bliver optaget af data.

### Forbedring af algoritmen

Ovenfor er implementeringen af den grundlæggende algoritme, der beskrives i [7], skitseret. Vi har dog valgt at implementere en af de forbedringer til algoritmen, der ligeledes er beskrevet i artiklen. Denne forbedring har til formål at minimere variationen i  $\Phi$ -værdien ved længere simuleringer. Ændringen består i at tilføje en funktion i udregningen af det næste skridt, som giver 0, når punkterne befinder sig på mangfoldigheden og ellers giver en værdi, der korrigerer det næste skridt. Dette gøres ved at ændre den tidligere beskrevne algoritme

$$\bar{x}_{i+1} = 2\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1} + \left( \frac{-2\nabla\Phi_{\bar{x}_i} \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1})}{|\nabla\Phi_{\bar{x}_i}|^2} \right) \nabla\Phi_{\bar{x}_{i-1}} \quad (3.15)$$

til

$$\bar{x}_{i+1} = 2\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1} + \left( \frac{-2\nabla\Phi_{\bar{x}_i} \cdot (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) + \Phi(\bar{x}_{i-1})}{|\nabla\Phi_{\bar{x}_i}|^2} \right) \nabla\Phi_{\bar{x}_{i-1}} \quad (3.16)$$

Som ved den tidligere algoritme er det blevet vist i [7], at dette giver det ønskede resultat.

## 3.4 Kontrolsimuleringer

Inden vi kørte simuleringer for at producere data, kørte vi en del simuleringer med det formål at tjekke både vores implementering af *NVU*-algoritmen og de resultater, der blev udledt i afsnit 2.2. Resultaterne for testsimuleringerne præsenteres og kommenteres i dette afsnit.

### Kontrol af implementering

Der vil unægtelig være en usikkerhed i vores simulering grundet afrundingsfejl. Idet modellen diskretiserer, vil der komme numeriske usikkerheder, som kommer til udtryk ved, at ethvert skridt mellem to punkter vil være en ret linje. Det betyder i praksis, at man kan risikere at bevæge sig væk fra mangfoldigheden. Dertil kommer, at skridtlængden antages at være konstant, hvilket heller ikke på forhånd er sikkert. Dog er begge problemer mulige at kontrollere i simuleringen.

Den første måde, hvorpå man kan undersøge implementeringen, er ved at se på de kontrolværdier, som simuleringen producerer. I tabel 3.1 ses data for en kørsel med  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$  kørt i 4000 skridt. Tabellen viser den maksimale og minimale norm af  $\bar{x}$  samt den numerisk største værdi af  $\Phi$ , der er blevet udregnet gennem simuleringen. Derudover viser den forskellen på den maksimale og minimale skridtlængde. Det ses, at normen holder sig under 1 og

Tabel 3.1: Tabellen viser udvalgt data for en kørsel med  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$  kørt i 4000 skridt.

Max $ \bar{x} $	1,00
Min $ \bar{x} $	0,44
Max( $ \Phi(\bar{x}) $ )	$1,46 \times 10^{-7}$
(Maximal - minimal) skridtlængde	$1,21 \times 10^{-8}$

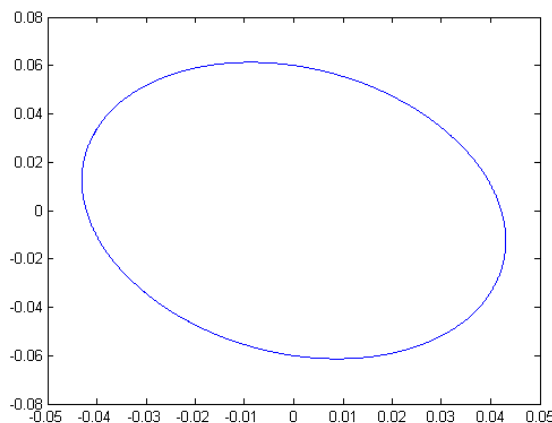
er positiv overalt. Derudover ses det, at både  $\Phi$  og forskellen i skridtlængde er meget små. Alt dette er tegn på, at vores implementering er i orden.

En anden måde at kontrollere vores implementering på er at undersøge, om de baner der konstrueres, rent faktisk er geodæter. En nem måde at gøre dette på, er at anvende  $\epsilon = 0$ , da dette gør, at vores mangfoldighed bliver til enhedskuglen

$$\mathcal{M} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N | \bar{x}^2 - 1 = 0\} \quad (3.17)$$

Dette var dog ikke helt muligt i vores implementering, da der flere gange i programmet indgår størrelsen  $1/\epsilon$ . For at opnå samme effekt kørte vi istedet simuleringer med  $\epsilon = 10^{-10}$ . Simuleringen blev kørt med  $N = 1000$ , og startpunkterne blev valgt som i det originale program med to punkter tæt på  $(1/\sqrt{N}, 1/\sqrt{N}, \dots, 1/\sqrt{N})$ .

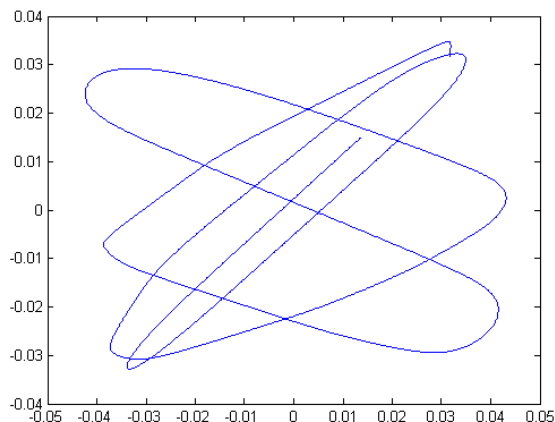
Den forventede data fra denne simulering er, at geodæterne bevæger sig på store cirkler. Som det ses på figur 3.1 er dette tilfældet. Figuren viser et



Figur 3.1: Figuren viser et todimensionelt plot af  $(x_1, x_2)$  til forskellige tider, når  $N = 1000$  og  $\epsilon = 10^{-10}$ . Det ses, at de baner der gennemløbes tilnærmelsesvis ligger oven på hinanden.

todimensionelt plot af  $(x_1, x_2)$  til forskellige tider. I alt er der data fra  $2 \times 10^4$

skridt. Det ses, at banerne tilnærmelsesvis ligger oven på hinanden som man ville forvente for storcirkler. Til sammenligning kan ses figure 3.2, der viser tilsvarende data for  $\epsilon = 500$ . Det ses tydeligt, at der her er meget stor variation



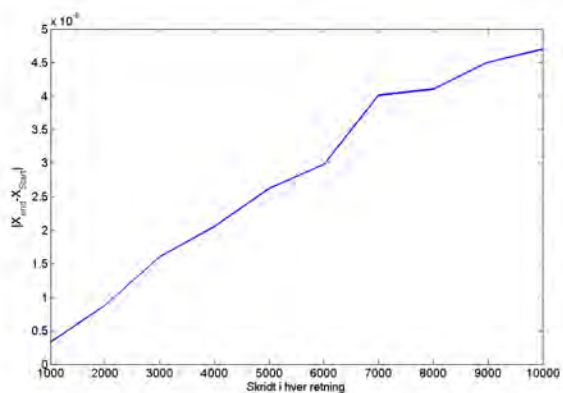
Figur 3.2: Figuren viser et todimensionelt plot af  $(x_1, x_2)$  til forskellige tider, når  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$ . Det ses, at de baner der gennemløbes ikke falder oven på hinanden, altså at geodæten ændrer retning i den todimensionelle projektion.

i de baner, der opstår.

For at få en idé om hvor stor usikkerheden er på dannelsen af geodæter, har vi kørt en simulering, hvor der halvvejs igennem programmet byttes om på koordinaterne for det forrige skridt og det nuværende. Dette burde føre til en geodæt, der lå fuldstændig ovenpå den allerede gennemkørte geodæt men i modsat retning. Dermed kan vi se, hvor stor usikkerhed der er ved at sammenligne koordinaterne for startpunktet og slutpunktet, der gerne skulle være det samme punkt. Denne type simulering kørte vi med forskellige antal skridt, og på figur 3.3 er afbilledet afstanden mellem start- og slutpositionen som funktion af det samlede antal skridt for en kørsel med  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$ . På figuren ses det, at der er en meget lille forskel mellem start- og slutpunktet  $\sim 10^{-8}$  i forhold til skridtlængden i simuleringen  $\sim 10^{-4}$ , hvilket betyder, at de afrundingsfejl, der kommer i beregning af positionen, negligeres i det videre arbejde.

### Minimumsnorm

Som vist tidligere har mangfoldigheden et minimumspunkt i punktet  $(0, \dots, 0, x_i, 0, \dots, 0)$  for ethvert  $i$ . For at eftertjekke dette resultat, kørte vi en simulering, der som input havde antallet af dimensioner, størrelsen på  $\epsilon$ , et gæt på afstanden til origo samt antallet af skridt. Algoritmen finder så et startpunkt  $(x, y, 0, \dots, 0)$ ,



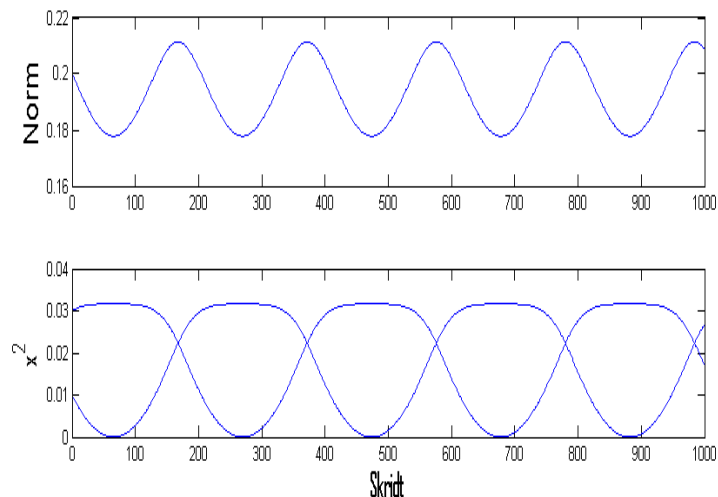
Figur 3.3: Figuren viser afstanden mellem start- og slutpositionen som funktion antallet af skridt i hver retning for en simulering, der starter med at bevæge sig et antal skridt i én retning og derefter et tilsvarende antal skridt i den modsatte retning. Simuleringen er kørt med  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$ .

hvor mangfoldigheden har den givne norm. Det næste punkt er  $(x', y', 0, \dots, 0)$  og findes ved at gøre normen en smule større. Den bruger så *NVU*-algoritmen til at bevæge sig rundt på mangfoldigheden med de fundne punkter som startbetingelser. Dette betyder at vi bevæger os rundt på en mængde  $M \subset \mathcal{M}_{\epsilon, N}$  hvor  $M$  selv er en 1-dimensionel mangfoldighed. Således bevæger algoritmen sig rundt på en linje, og er derfor nødsaget til at bevæge sig igennem de punkter der har den mindste norm. Det er klart, at det ikke er muligt at bruge alle værdier mellem 0 og 1 som startnorm. Desuden er det som nævnt heller ikke muligt at anvende enhver  $\epsilon$ -værdi, men tilladte værdier af både norm og  $\epsilon$  kan udledes af det teoretiske arbejde med mangfoldigheden. Vi fandt i disse simuleringer, at geodæten forblev i  $x_1, x_2$ -planet, hvilket gjorde det nemmere for os at behandle dataen.

På figur 3.4 kan ses data for en sådan simulering med  $N = 1000$  og  $\epsilon = 500$ . Som det ses, er normen mindst de steder, hvor enten  $x_1^2$  eller  $x_2^2$  er meget tæt på 0.

### 3.5 Testsimulering på adskilte fladestykker

I afsnit 2.2 er det vist, at når  $\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} \right)$  vil  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  begynde at have huller og samtidig bestå af to disjunkte åbne mængder. Ser man på de plottede figurer i 2 og 3 dimensioner, ligger disse mængder tæt opad hinanden. Der er dog ikke nogen nærmere viden om, præcis hvor stor afstanden er i mellem de to løsningsmængder. Derfor var det interessant at undersøge, hvorledes algoritmen registrerer denne adskildelse. Hvis afstanden mellem de to fladestykker er tilpas



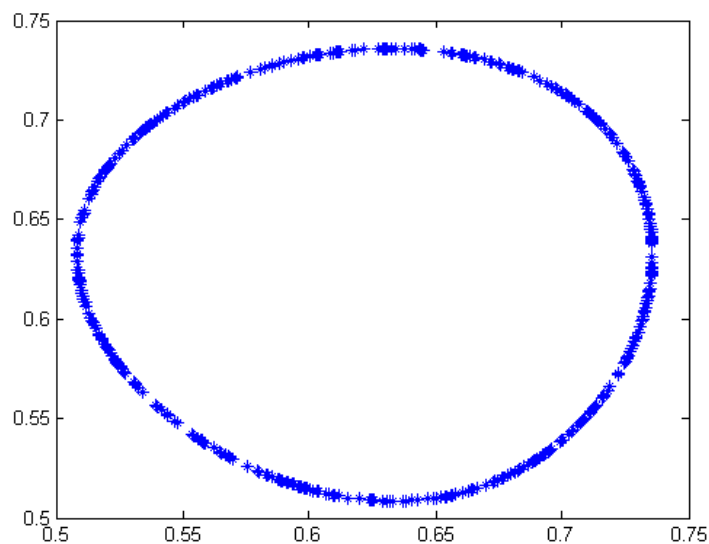
Figur 3.4: Figuren viser den tidlige udvikling i normen af  $\bar{x}$  samt  $x_1^2$  og  $x_2^2$  for en simulering, der kun tillod geodætbevægelse i  $x_1, x_2$ -planet.

lille, vil det være sandsynligt at tro, at geodætalgoritmen går fra den ene mængde til den anden, uden at det skaber nogen videre problemer. Tilsvarende kunne man forestille sig, at geodæten ender midt i ingenting, og derfra kører helt væk fra  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , hvis afstanden er for stor, hvilket ville give ubrugelige data.

Dette undersøgte vi gennem en række simuleringer. I første omgang kørte vi simuleringen i to dimensioner, hvor  $\epsilon$  blev justeret således, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  blev adskilt i små enkelte fladestykker, som det ses på figur 2.2. Her startede geodæten ved punktet  $(1/\sqrt{N}, 1/\sqrt{N})$ , og i to dimensioner må den nødvendigvis bevæge sig mod enden af løsningsmængden. Positionen blev noteret for samtlige tidsskridt, som ses på figur 3.5. Som man kan se, giver simuleringen en lukket flade bestående af den indre og den ydre løsningsmængde. Således går algoritmen fra den ene flade til den anden, på trods af at disse ikke er sammenhængende. Dette blev gjort gentagende gange, og i samtlige simuleringer var billedet det samme. For hver simulering blev også værdien af  $\Phi_{\epsilon, N}$  testet, og heller ikke her blev der registreret nogen væsentlige udsving.

Tilsvarende blev der kørt simuleringer i højere dimensioner for at se på opførslen i disse tilfælde. Her så vi på tilfældet, hvor både den indre og den ydre løsningsmængde til  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  adskilte sig i små fladestykker. Simuleringen blev igen foretaget i den positive kvadrant. Ser man på fladestykkerne i den 3-dimensionelle udgave, som kan ses på figur 2.4, vil vi på den ene løsningsmængde have en gradient med udelukkende positive komponenter, og tilsvarende med negative på den anden løsningsmængde, idet gradienten er normal på fladerne. Ved samtlige simuleringer blev der observeret, at samtlige komponenter gik fra at være positive til at være negative. Dette indikerer altså, at vi, som i det





Figur 3.5: Figuren viser en kørsel i to dimensioner. Positionen af den ene partikel, der findes i dette system, er her aftegnet. Fra billedet kunne det tyde, at geodæten er begrænset til overfladen af en sammenhængende mængde. Dette er dog ikke tilfældet, da det der ses, er geodætens bevægelse på de to løsningsmængder.

2-dimensionelle tilfælde, bevæger os mellem de to løsningsmængder. Dette har betydet, at vi i simuleringerne og de dertilhørende resultater har antaget de to fladestykker for sammenhængende, på trods af at dette ikke gælder analytisk.

Vi har nu vist, at vi er i stand til at benytte programmet til at simulere geodætbevægelse på mangfoldigheder, samt at de usikkerheder, der forekommer i vores simuleringer, er tilpas små til, at vi kan retfærdiggøre at negligere dem. Vi går derfor videre til at præsentere de resultater, som vi har opnået i simuleringsdelen af projektet.



## 4 Simulering og databehandling

Følgende afsnit består af en præsentation og analyse af den opnåede data.

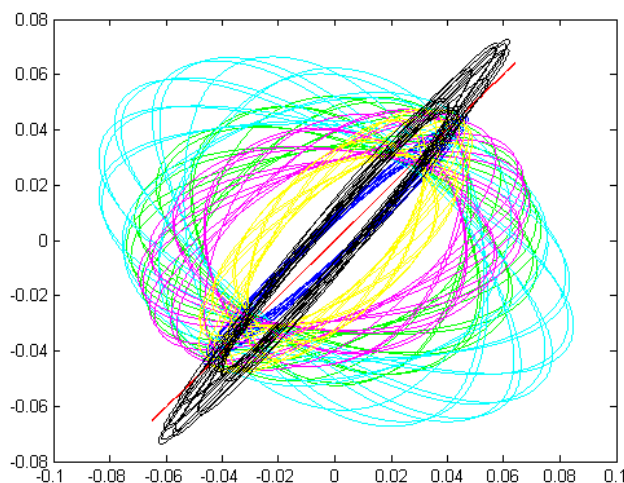
Fra analysen af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  er der tre områder, hvorimellem vi oplever strukturændringer. De tre områder er  $0 < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ ,  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  og  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ . Alle tre områder er interessante at simulere i, for at undersøge om der er overensstemmelse mellem vores analytiske gennemgang af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  i de tre områder, og de resultater vi opnår. I første omgang vil det naturligvis være området, der giver en enkeltsammenhængende flade, som er mest interessant, da det er i dette område, vi kan afprøve vores hypotese.

Vi vil i følgende afsnit anvende termen ”partikler”. Med partikler menes koordinatsæt  $p_i = (x_m, x_n)$ , fra et punkt  $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m, \dots, x_n, \dots, x_N)$  på mangfoldigheden  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Det er med andre ord vigtigt at skelne mellem ”partikler”,  $p \in \mathbb{R}^2$  og punkter,  $\bar{x} \in \mathcal{M}_{\epsilon, N} \subset R^N$ . Simuleringsresultaterne præsenteres på 3 forskellige måder, alt efter hvad der er mest hensigtsmæssigt i den givne situation. Den mest anvendte fremvisning består af en afbildning af de første 14 koordinater sætvis ned i to dimensioner, så det, vi ser i praksis, bliver 7 ”partikler”, der bevæger sig i  $\mathbb{R}^2$ . Ideen med denne fremvisning er at give et 2-dimensionelt billede af, hvorledes en geodæt opfører sig på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Vi har valgt 7 partikler, idet vi ønsker at vise flere partikelbaner på samme tid og samtidig ikke ønsker at gøre billederne uoverskuelige for læseren ved at vise for mange partikelbaner på samme figur. Dette giver selvfølgelig ikke det præcise billede af, hvordan geodæterne på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  opfører sig, men det er væsentligt nemmere at behandle. En anden fremvisning af simuleringsresultaterne består af et enkelt koordinat, der afbildes som funktion af tiden, en simulering har kørt. Denne fremvisningsmetode benyttes til at vise, hvornår en geodæt, med sikkerhed, har bevæget sig fra et toppunkt til et andet. Den sidste fremvisningsmåde vil være at plote normen som funktion af antal tidsskridt. Her vil en norm tæt på 1 indikere, at vi er nær et punkt  $\omega_i \in \Omega$ , og vi kan bruge plottet til at se, hvornår vi går til et nyt toppunkt.

### 4.1 Analyse af den enkeltsammenhængende flade

Der er blevet kørt flere simuleringer med værdier for  $\epsilon$  begrænset til intervallet  $0 < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ . Dette blev gjort ved forskellige værdier af  $N$ . Ved  $\epsilon$ -værdier tæt på 0 er bevægelsen på faste baner, når denne plottes som en

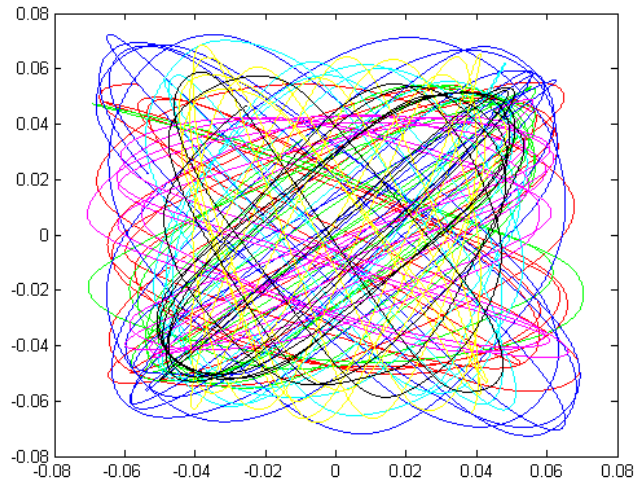
partikel. Dette indikerer, at geodæten er en "storcirkel" på hypersfæren, hvilket også forventes. Et eksempel på dette kan ses på figur 4.1, hvor  $\epsilon = 1$  og  $N = 500$ . Det ses samtidig, at partiklerne bevæger sig 'frit' rundt, hvilket er forventeligt på en sfære uanset værdien af  $N$ .



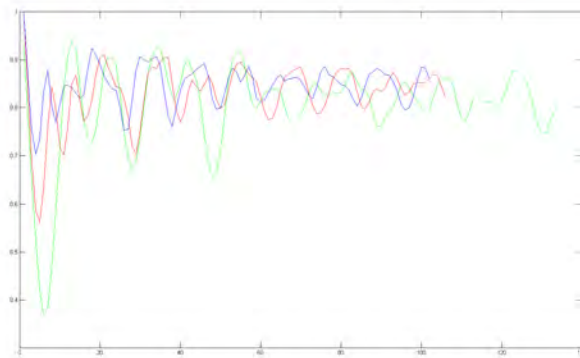
Figur 4.1: Figuren viser partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 1$  og  $N = 500$  i  $10^6$  tidsskridt. Partiklerne synes at have ellipseformede baner.

Idet vi deformerer  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  ved at lade  $\epsilon$  stige, skulle muligheden for at bevæge sig ved toppe og 'dale' være til stede og dermed muligheden for at eftervise hypotesen. Partiklernes enkelte koordinater synes, når  $\epsilon \rightarrow \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ , at bevæge sig mere eller mindre tilfældigt rundt på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . De enkelte partikler synes i dette tilfælde at bevæge sig rundt på en tilnærmelsesvist kvadratisk struktur, se figur 4.2. Denne struktur minder om strukturen af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , som den ses, når  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  er plottet i  $\mathbb{R}^3$ , se figur 2.1. Ved analyse af de forskellige partiklers baner i denne situation ser vi ikke nogen tendens til, at en partikel befinder sig længe ved et toppunkt, før den pludselig springer til et nyt toppunkt. Tilsvarende billede ses uanset værdien af  $N$ . I figur 4.3 ses normen som funktion af antal tidsskridt. For alle tre kurver er  $\epsilon = \frac{N}{2}$  og  $N$  er hhv. 160, 1280 og 5120. I stedet ses en udglatning af normen med tiden. Dette tyder på, at geodæterne i de tre tilfælde bevæger sig i områderne, der ligger imellem top- og bundpunkter. Samme billede gør sig gældende på figur 4.4, hvor vi ser at en enkelt koordinat ofte skifter fortegn, hvilket betyder at geodæten nærmer sig et nyt toppunkt. Dette er igen uafhængigt af antallet af dimensioner.

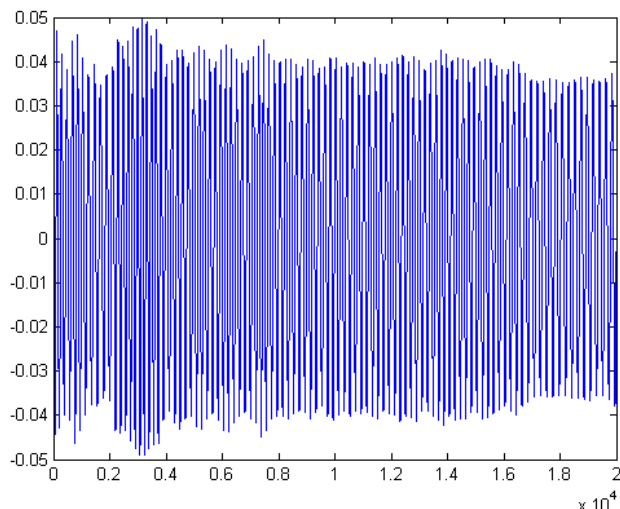
Det tætteste vi kommer på vores hypotese er, at vi i nogle simuleringer ser, at enkelte partikler har svært ved skifte placering fra en kvadrant til en anden. Dette ses f.eks. på figur 4.5. Dog ligger dette stadig langt fra forventningen om,



Figur 4.2: Figuren viser partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 300$  og  $N = 500$  i  $10^6$  tidsskridt. Partiklernes baner synes at være mere tilfældig end ved tilfældet på figur 4.1.



Figur 4.3: Figuren viser normen som funktion af tiden for i alt tre målinger. I hver af de tre er  $\epsilon = \frac{N}{2}$  og  $N$  er hhv. 160, 1280 og 5120. Det ses, at der ingen tendens er til, at geodæterne lokaliserer sig omkring toppunkterne.



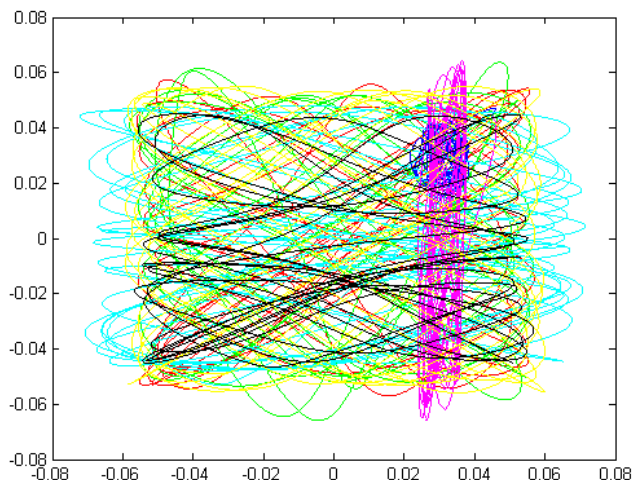
Figur 4.4: Figuren viser et enkelt koordinat for positionen af en geodæt på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , hvor  $N = 1280$  og  $\epsilon = 640$  i  $10^5$  tidsskridt. Det ses, at koordinatet frit kan skifte fortegn.

hvad vi skulle opleve.

Det vi ser ved simulering af modellen i intervallet  $0 < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ , er altså, at der tilsyneladende ikke er større sandsynlighed for, at en geodæt befinder sig nær et toppunkt, i forhold til sandsynligheden for at den befinder sig nær et bundpunkt, hvilket er i modstrid med vores hypotese. Idet man tror på, at  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  er repræsentativ for vores hypotese, ses der altså ikke nogen videre grund til at tro, at denne er korrekt. Vi vil nu gå videre og se på de resultater, der forekommer, når der er huller i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ .

## 4.2 Analyse af $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ med huller

I intervallet hvor  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  begynder vi at opleve en anden opførsel for partiklernes færden på  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . I takt med at  $\epsilon$  stiger, bliver det tilsvarende sværere for partiklerne at bevæge sig fra en kvadrant til en anden. Dette skyldes formentlig, at de opståede huller i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  begynder at vokse, således at det bliver sværere for partiklerne at indfinde sig på de geodæter, der går fra en omegn af et toppunkt til omegnen af et andet. Der er argumenteret for i afsnit 2.2, at hullernes størrelse stiger som en funktion af  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ , indtil den kritiske værdi  $\epsilon = \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ , hvor der kun er et enkelt punkt, der binder toppunkterne i  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  sammen. På figur 4.6 er et enkelt koordinat for en geodæt afbildet som funktion af tiden. I dette tilfælde

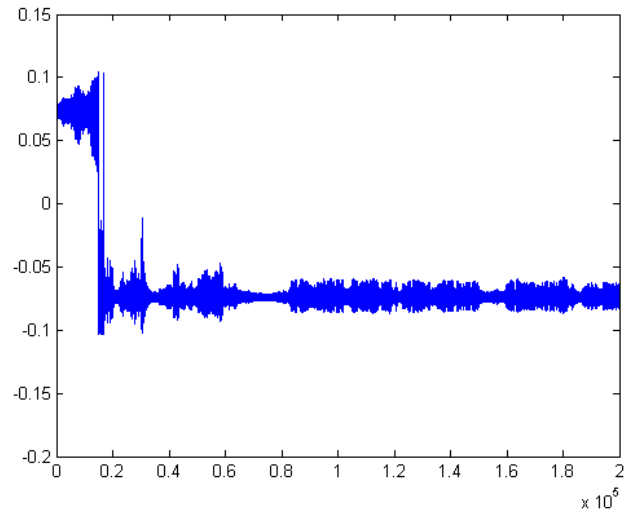


Figur 4.5: Figuren viser partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 500$  og  $N = 500$  i  $10^6$  tidsskridt. Vi ser, at den ”mørkeblå” partikel er fanget i 1. kvadrant over mange tidsskridt.

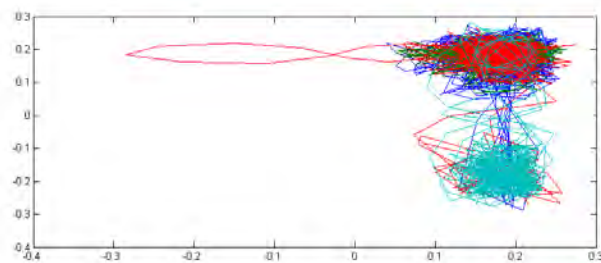
er  $N = 160$  og  $\epsilon = 640$ , og vi ser, at koordinatet kun skifter kvadrant 3 gange over  $2 \cdot 10^5$  tidsskridt. Tilsvarende kan man på figur 4.7 se den opførelse, vi er på udkig efter. Således vil partiklerne i lang tid ligge og vibrere om det samme punkt, for så at gå til et nyt toppunkt, som de så vil køre rundt ved.

For  $\epsilon \approx \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  har det ved simulering ikke været muligt at observere en geodæt gå fra et toppunkt på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  til et andet, hvilket ikke skaber den store undren, da der næsten ikke er noget, der forbinder toppunkterne i  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , se figur 4.8. Når  $\epsilon$  bliver tilstrækkeligt stor, således at partiklerne har svært ved at forlade en kvadrant, ses det ved simulering, at partiklerne begynder at bevæge sig rundt på noget, der ligner en afsluttet mangfoldighed, som fremkommer der, hvor  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  har sine toppunkter. Bemærk at dette er en observation fra simuleringerne, og at der ikke er tale om en partitionering af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , førend  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ .

Ved simulering af modellen i intervallet  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  begynder der altså at ske noget spændende i forhold til vores hypotese. Vi oplever i ovennævnte interval, at sandsynligheden for at en geodæt skifter position fra en kvadrant til en anden, mindskes betydeligt, når  $\epsilon$  stiger. Dette var til dels, hvad vi ønskede at se udfra vores hypotese, men vi opnår resultaterne på et lidt anderledes grundlag. Som vist i afsnit 2.2 har  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  nu ændret struktur, og for at en geodæt skal kunne gå fra en omegn af et toppunkt til omegnen af et andet, skal geodæten indfinde sig på nogle broer, der bliver tyndere og tyndere, som  $\epsilon$  stiger. Dette gør det mere usandsynligt, at en geodæt passerer en bro og

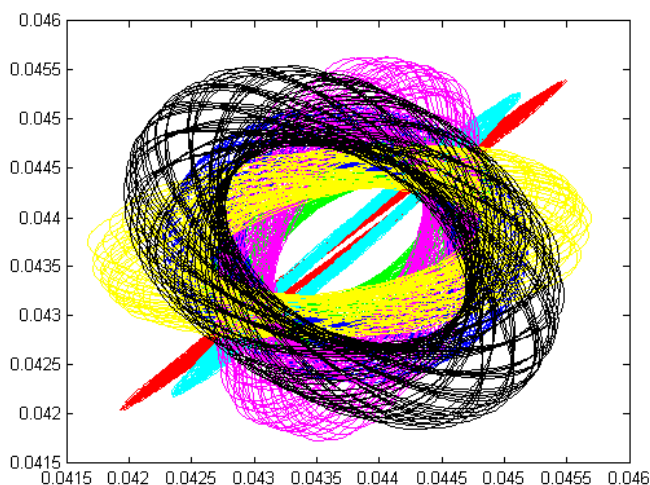


Figur 4.6: Figuren viser et enkelt koordinat for positionen af en geodæt på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , hvor  $N = 160$  og  $\epsilon = 640$ . Vi ser, at den over  $2 \cdot 10^5$  tidsskridt kun skifter kvadrant 3 gange. Dette er et generelt billede for samtlige koordinater, når  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$



Figur 4.7: Figuren viser partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 35$  og  $N = 20$  i  $10^4$  tidsskridt. Som man kan se, vil partiklerne i lang tid ligge og vibrere omkring samme punkt for så efter et stykke tid bevæge sig til et nyt toppunkt. Dette minder i høj grad om den opførsel, vi leder efter.





Figur 4.8: Figuren viser partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 5840$  og  $N = 500$  i  $10^5$  tidsskridt. I dette tilfælde er det tilnærmelsesvist opfyldt, at  $\epsilon = \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ . Ingen af de 7 udvalgte partikler forlader kvadranten, de starter i, og synes at bevæge sig rundt på en ny afsluttet mangfoldighed. Vi begynder igen at observere ellipseformede baner.

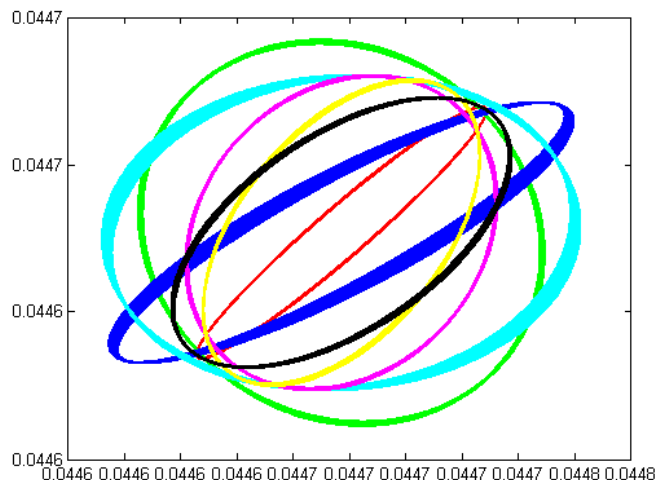
derved kommer til et nyt toppunkt.

### 4.3 Analyse af den usammenhængende flade

Når  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  er  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  blevet partitioneret i  $2^{N+1}$  nye mangfoldigheder  $m_i \subset \mathcal{M}_{\epsilon,N}$ ,  $i \in \{1, 2, \dots, 2^N\}$ , hvor  $\bigcup m_i = \mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Da  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  ikke længere er sammenhængende, er det ikke overraskende, at vi, i simuleringerne, ikke ser positionen af geodæten skifte kvadrant. Partikelbanerne begynder igen at antage form som ellipser, og denne tendens forstærkes, i takt med at  $\epsilon$  stiger, se figur 4.9. Dette antyder, at de nye delmangfoldigheder antager en mere og mere sfærisk form, i takt med at  $\epsilon$  stiger. Geodæterne bevæger sig frit rundt mellem den indre og ydre løsning, hvilket er, hvad vi ville forvente jævnfør afsnit 2.2.

### 4.4 Sammenfatning

Vi har analytisk fundet frem til, at der er 3 områder i forholdet mellem  $\epsilon$  og  $N$ , som vi har undersøgt, og det er især spændende at se nærmere på de to af dem, når vi simulerer vores model. Det viser sig, at de 3 forhold giver os 3 forskellige strukturer for  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ . Strukturforskelle som der fremstår tydeligt, når vi simulerer modellen. I intervallet  $0 < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$  oplever vi ikke, at



Figur 4.9: Partikelbanerne for 7 partikler ved  $\epsilon = 126108$  og  $N = 500$  i  $10^6$  tidsskridt. Banerne har nu antaget tydelig elliptisk form, hvilket antyder sfærisk struktur i partitioneringen af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$

geodæter på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  har større sandsynlighed for at befinde sig nær et toppunkt end for at befinde sig andetsteds på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ .

På trods af at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  opfylder kriterierne for den mangfoldighed, vi ønskede at undersøge, ser vi altså ikke de tendenser, vi havde regnet med ud fra vores hypotese. Bevæger vi os over i intervallet  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ , ser vi noget, der minder om, hvad vi havde forestillet os ud fra hypotesen men af andre årsager. Dette sker formentlig, fordi der begynder at opstå huller omkring akserne, der vokser med  $\epsilon$ , således at toppunkterne i  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  kun er forbundet af nogle tynde broer. I intervallet  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  er  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  ikke længere sammenhængende, og det er ved simulering ikke længere muligt for en geodæt at forlade den "kvadrant", den startede i. I det  $\epsilon \rightarrow \infty$  ser vi i simuleringer, at de nye delmangfoldigheder  $m_i \subset \mathcal{M}_{\epsilon, N}$  antager sfærisk struktur.

## 5 Diskussion

I følgende afsnit vil resultaterne fra vores simuleringer og teoretiske arbejde blive diskuteret. Selv om det ikke er lykkedes os at eftervise den oprindelige hypotese, er der stadig en del vigtige resultater, der er interessante at diskutere. Først ønsker vi at redegøre for den type af modellering, der har fundet sted i dette projekt for at vurdere brugen af karikaturmodeller i fysikken. Med henblik på at vurdere hvorvidt vores hypotese er gældende eller ej, vil vi dernæst diskutere, om vores eksempel viser noget generelt, eller om der eksisterer særlige tilfælde, hvor hypotesen muligvis er gyldig. I forlængelse af dette forsøger vi at vurdere, hvad der adskiller den originale hypotese fra det, vi oplever i området  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < 1/2(\sqrt{N^3} + N)$ . Slutteligt vil vi diskutere, hvorvidt modellen med  $\epsilon$ -værdier i dette interval udgør en særligt spændende model for væskedynamik.

En ting der bør overvejes er, hvilken type projekt dette kan siges at være. Vi har tidligere tilkendegivet, at vi ønskede at lave et modelprojekt, men på mange måder adskiller dette projekt sig fra den traditionelle modelleringsvariant. For det første er der i høj grad tale om en karikaturmodel snarere end en egentlig model for et fysisk fænomen. Vi har ingen grund til at antage, at der findes et fysisk system, som direkte kan modelleres som en geodætbevægelse på netop vores mangfoldighed. Vi kunne have valgt at se specifikt på et kendt fysisk system og forsøgt at skabe en mangfoldighed, der kunne siges at modellere dette system for på den måde at lave forudsigelser om, hvordan dette system ville opføre sig. Dette ville være en typisk måde at gribe modelleringen an på. En sådan tilgang ville formodentlig kunne sige en masse om det pågældende system, men vi har i vores tilgang valgt at undersøge selve den indgående matematik, for at se om der er egenskaber ved denne, der kunne være interessante i forhold til modelleringen af fysiske systemer. Idéen med denne fremgangsmåde er, til forskel fra den anden, at den belyser det mere generelle tilfælde. Fremgangsmåden har dog også det store problem, som også illustreres i vores projekt, at det nemt kan blive en søgen i blinde. Vi havde som udgangspunkt en hypotese, der gav os en retning at søge i, men da denne hypotese viste sig ikke at være så generel, som vi havde håbet, var det svært at afgøre, i hvilken retning man så burde søge.

Det kan så diskuteres, hvorvidt vores arbejde i dette projekt er nok til at kunne forkaste hypotesen fuldstændigt. Vi ønskede at se geodæter, der befandt sig længe nær et toppunkt, før de bevægede sig videre gennem en

dal, og blev længe nær det næste toppunkt, men vi ser absolut ikke den ønskede opførsel i intervallet hvor  $\epsilon < \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$ , på trods af at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  overholder kravene til hypotesen. Det er dog svært at sige, om det er nok til at kunne afvise hypotesen helt. Den er tilsyneladende ikke gældende i alle tilfælde, der opfylder de opstillede krav, så det er tydeligvis ikke en generel sammenhæng, hvis den eksisterer. Selv hvis bundpunkter havde en afstand til origo på  $r_{min} = 0,9$ , havde vi regnet med at se den ønskede opførsel, da størrelsen på et arealudsnit forventedes at være proportionalt med  $0,9^N$ . Ved høje dimensioner ville områder med lave radier altså næsten nærme sig 0, men selv når  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  endnu er enkeltssammenhængende, findes der områder med  $r_{min} < 0,7$ , hvor opførslen stadig ikke finder sted, så det tyder ikke på, at forklaringen er at finde dér. Desuden kan man også argumentere for, at vores valgte mangfoldighed opførte sig relativt pænt i intervallet  $\epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  og dermed bør repræsentere hensigten med hypotesen tilfredsstillende. Vi kunne have valgt at arbejde med langt "grimmere" mangfoldigheder, der havde langt mere specielle egenskaber end  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Eksempelvis blev det overvejet at arbejde med mangfoldigheder, der havde minimumspunkter meget tæt ved origo, og som besad abrupt stigende normer i områderne nær toppunkterne, som der desuden eksisterede langt flere af. Dette ville ligne en lille kugle centreret i origo med pigge pegende ud til alle sider. Dermed må man sige, at vores valg af mangfoldighed, samt undersøgelsen af denne, har ydet hypotesen den fortjente retfærdighed.

Det er naturligvis interessant at diskutere, hvorfor vi ikke ser den opførsel, vi forventede. Grunden hertil kunne være, at det ikke giver mening at opstille en mangfoldighed på den måde, vi gør. Det bør i første omgang overvejes, hvilke krav der skal stilles til det fysiske system og funktionen  $\Phi$ , hvis mængden  $\Phi^{-1}(c)$  skal være begrænset for regulære værdier af  $c \in \mathbb{R}$ . Det kan være, at det ikke giver mening at betragte systemet som indlejret i enhedssfæren, men vi valgte denne fremgangsmåde, da vi gerne ville begrænse udstrækningen af vores flade og skabe et kompakt system. Derudover vælger vi, at antallet af elementer i  $\Omega$ ,  $|\mathcal{M}_{\epsilon, N} \cap \partial B|$ , er endeligt, men det bør muligvis overvejes, om der ligger fysiske argumenter til baggrund for dette, eller om det kun er for simplicitetens skyld. Hvorvidt dette valg er af stor betydning for geodæternes bevægelse er ikke sikkert, men da de systemer i fysikken, vi laver en karikaturmodel af, køres med periodiske randbetingelser, virker det sandsynligt, at enhver stabil konfiguration kan flyttes til et hvilket som helst sted i systemet og stadig være stabil, hvilket gør, at man ikke kan tale om en endelig mængde stabile konfigurationer. Det ovenstående er naturligvis ikke oplagt til vores model, da det ville svare til bånd af områder, hvor mangfoldigheden skærer  $\partial B$ .

Vi havde i vores hypotese antaget, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  skulle være enkeltssammenhængende. Det var dog ikke her, vi så den mest interessante opførsel, men snarere i det tilfælde hvor der kom huller i mangfoldigheden. Grunden til at vi ikke forkastede disse som ufysiske er, at der også vil være huller i den mangfoldighed, som fremkommer i fysiske systemer. Når man laver oversættelsen fra partikler i  $\mathbb{R}^3$  til en geodætbevægelse i  $\mathbb{R}^{3N}$ , vil der være nogle retninger, som den

$3N$ -dimensionale vektor ikke kan pege i. Hvis koordinaterne  $x_4, x_5$  og  $x_6$  er en gentagelse af værdierne af koordinaterne  $x_1, x_2$  og  $x_3$ , repræsenterer dette, at to partikler eksisterer i præcist samme punkt, hvilket jo ikke giver fysisk mening. Derfor kan man argumentere for, at mangfoldigheden burde indeholde en mængde huller, der svarede til fysisk umulige tilstande. Dette kunne sagtens være grunden til, at vi ikke ser den ønskede opførsel. Hypotesen var i sig selv et forsøg på at give en matematisk forklaring på et fysisk fænomen, men man kunne forestille sig, at der fandtes en anden forklaring, og at geodætbevægelsen på den hullede mangfoldighed passer bedre overens med det, der ses i fysikken.

Man kunne desuden have overvejet, om der skulle tillægges større betydning i de kritiske punkter, vi fandt for  $\epsilon = \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$  og  $\epsilon = \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ . Der er sandsynligvis mange interessante matematiske overvejelser, som man kunne gøre sig om netop disse områder, men da vi ikke mente, at de kunne tillægges nogen særlig fysisk betydning, valgte vi at se bort fra dem i dette projekt.

Vi fandt i den teoretiske analyse af  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$ , at når  $\epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$ , vil  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  blive brudt op i et antal disjunkte mængder  $m_i \subset \mathcal{M}_{\epsilon, N}$ ,  $i \in \{1, 2, 3, \dots, 2^{N+1}\}$  hvor  $\bigcup m_i = \mathcal{M}_{\epsilon, N}$ . Vi ser i vores simuleringer, at en geodæt er i stand til at bevæge sig mellem sådanne to delmængder, så længe de befinder sig i samme kvadrant, på trods af at de er disjunkte. Vi formoder, at dette skyldes, at afstanden mellem disse mængder er relativt lille, sammenlignet med modellens skridtlængde. Geodæter på  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  bevæger sig, som nævnt, i diskrete skridt, fra et punkt  $\bar{x}_i$  til et punkt  $\bar{x}_{i+1}$ , og hvis en geodæt i en delmængde  $m_k$  befinder sig tilstrækkeligt tæt på en delmængde i samme kvadrant  $m_j$ , vil programmet ikke have noget problem med at vælge et  $\bar{x}_{i+1} \in m_j$  som sit næste skridt, så længe det er indenfor den definerede skridtlængde. Da dette kun er en formodning, kunne det være interessant at undersøge, hvor stor afstanden egentlig er mellem 2 delmængder, der befinder sig i samme kvadrant. Er det eksempelvis kun en linie af punkter, der adskiller de to mængder, og hvis en geodæt ramte præcis et punkt i dette bælte, ville det så betyde noget for modellens algoritme? Desværre har det været udenfor projektets omfang at undersøge dette aspekt.

Desuden antog vi også ergodisitet, hvilket det har vist sig, at  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  med vores algoritme ikke besidder. Det betyder, at vi ikke kan være helt sikre på, at grunden til, at vi for sjældent befinder os nær et toppunkt, skyldes, at arealet tæt omkring toppunkterne ikke er så stort, som vi havde forventet, i forhold til det totale areal. Ud fra vores simuleringer har vi dog ikke set nogle grund til at afvise, at vores system opfylder de egenskaber, vi ønskede at bevise med Birkhoffs sætning, og derfor antager vi, at systemet er tilnærmelsesvist ergodisk. Derfor kan vi ikke benytte arealbetrægtninger til at modbevise vores hypotese.

I forlængelse af dette kunne det også være spændende at diskutere, hvad der adskiller den oprindelige hypotese fra den opførsel, vi så for  $\frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N) > \epsilon > \frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N)$ . Den opførsel var netop den, vi ønskede at se ud fra den oprindelige hypotese, men grunden var tydeligvis en helt anden. Ifølge den oprindelige hypotese burde den observerede opførsel være en effekt af en

proportionalitet mellem det lokale arealmål og afstanden til origo for et givent punkt på mangfoldigheden. Dette, sammen med ergodiske egenskaber ved vores geodætiske bevægelser, burde have forårsaget en geodætbevægelse, der i længere tid ville være langt fra origo end tæt på. Grunden til at vi så denne opførsel var snarere, at der opstod huller i vores mangfoldighed, der gjorde det svært at konstruere geodætbaner, der ikke lå i netop de områder, hvor vi ønskede at se dem.

I området  $\frac{1}{2}(\sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N) < \epsilon < \frac{1}{2}(\sqrt{N^3} + N)$  finder vi som nævnt den type geodætbevægelse, som vi oprindeligt var på udkig efter. Man kan dog diskutere, om denne geodætbevægelse, kan bruges som en model for væskedynamik. Der er, som vist, en sammenhæng mellem forholdet mellem  $N$  og  $\epsilon$  og sandsynligheden for, at geodæten bliver fanget i et af toppunkterne. Hvis man tænker på disse toppunkter som lokalt stabile punkter for systemet og geodætbevægelse mellem disse som en omlejring af systemet, vil der altså være en sammenhæng mellem, hvor ofte systemet omlejrer sig og forholdet mellem  $N$  og  $\epsilon$ . Dette er en af de karakteristika, man ville ønske at se i en model for et potentielt energilandskab, og det er derfor ikke urealistisk at forestille sig, at vores mangfoldighed  $\mathcal{M}_{\epsilon, N}$  sammen med algoritmen fra [7], vil kunne fungere som en model. Det bør nævnes her, at idéen om at forbinde de sandsynlige områder via tynde broer absolut ikke er en ny måde at anskue partikelomlejringer på. allerede i 1986 anså [3] det fysiske energilandskab, som bestående af adskilte lommer, som var forbundet af små broer, der fungerede som en slags entropibarrierer. Opfattelsen af dette deles af [4], som udtaler, at deres søgen har skiftet fra stationære punkter på potentiel-energilandskabet,

”to finding and characterizing the accessible pathways through the landscape. Within this perspective pathways would be slow, not because they have to climb over high barriers, but because they have to take a long and tortuous route to avoid such barriers. . .”

Denne beskrivelse indfanger utroligt godt den opførsel, som vi selv oplever med en række ”tilstandslommer” omkring hvert toppunkt, der forbindes med tynde broer. Størrelsen af disse broer, og dermed sandsynligheden for at komme til at passere en af dem, vil i vores model have en tæt relation til de førnævnte entropibarrierer, der er nødvendige at passere, før en partikelomlejring i systemet er mulig. Alt tyder tilsyneladende på, at denne relativt tilfældige karikaturmodel, som vi er nået frem til i dette projektarbejde, indfanger en række karakteristika, som mange andre forskere inden for området har forsøgt at tillægge en sådan fremstilling af et potentiel-energi-landskab i mange år. Så noget tyder på, at vi med vores rent serendipitivt opnåede karikaturmodel, har indfanget særlige karakteristika for partikelomlejringer på en konstant potentiel-energi-flade på en måde, der har været omdiskuteret af mange forskere inden for feltet, men som vi ingen kendskab havde til, da vi kastede os ud i dette projekt.

En yderligere gennemgang af geodætbevægelse på vores mangfoldighed som model for væskedynamik kan findes i perspektiveringen, som et udkast til videre arbejde.

## 6 Konklusion

Det er lykkedes os igennem dette projektarbejde, at få et program til simulering af geodætbevægelser på højdimensionelle flader til at fungere. Programmet er undersøgt på adskillige måder, der alle viser, at vi bliver ved med at befinde os på geodæter under kørsler af simuleringerne.

Når vi undersøger geodætbevægelse på mangfoldigheden  $\mathcal{M}$

$$\mathcal{M}_{\epsilon,N} = \{\bar{x} \in \mathbb{R}^N \mid \Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = 0\} \quad (6.1)$$

hvor  $\Phi_{\epsilon,N} = \sum_{i=1}^N x_i^2 + \epsilon \sum_{i=1}^N (x_i^2 - \frac{1}{N})^2 - 1$  oplever vi, at hypotesen ikke er gældende, på trods af at de antagede betingelser er fuldstændigt opfyldt. Dermed kan vi altså konkludere, at hypotesen ikke gælder generelt for enhver højdimensionel glat mangfoldighed indlejret i enhedskuglen med et endeligt antal toppunkter. Det er muligt, at hypotesen kan indskrænkes til at gælde på visse mangfoldigheder under særlige betingelser, men en undersøgelse af dette har ligget uden for rammerne af dette projekt.

Vores konstruktion af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  har vist sig forholdsvis tilfældigt at indeholde en række af de karakteristika, som vi regnede med, at vores hypotese ville bringe os. På trods af at forklaringen ligger i de komplekse løsninger, der opnås i systemet, når  $\frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right) < \epsilon < 1/2(\sqrt{N^3} + N)$ , hvor der opstår store huller i mangfoldigheden, opnår vi de ønskede egenskaber; at geodæterne befinder sig særligt længe omkring et toppunkt, inden de bevæger sig mod et nyt, hvor de opholder sig længe. Dette gør vores mangfoldighed  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  sammen med algoritmen til en glimrende model for den opførsel, som vi oprindeligt ville have modelleret med et helt andet udgangspunkt. Med denne model er det muligt for os at justere på de indgående parametre, så vi, uanset antallet af dimensioner, kan simulere et system, der indeholder de ønskede fysiske karakteristika. Dette kan gøres, så længe vi har kendskab til de to sammensætninger af  $\epsilon$  og  $N$ ; området hvor de første huller opstår,  $\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{\frac{N^3}{N-1}} + N \right)$ , og området hvor systemet holder op med at være sammenhængende,  $\epsilon > \frac{1}{2} \left( \sqrt{N^3} + N \right)$ .

Det er meget muligt, at modellen vi har konstrueret med  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  sammen med algoritmen er for simpel en model, der ikke er i stand til at indfange tilstrækkelige karakteristika for den underliggende fysik, men i kraft af at formålet med dette modelleringsarbejde har været at genskabe enkelte væsentlige fysiske karakteristika gennem en karikaturmodel, er målet med arbejdet opnået.





## 7 Perspektivering

I dette afsnit vil vi reflektere over andre muligheder i modellering af fænomenet, med udgangspunkt i oplagte idéer til et eventuelt videre arbejde inden for emnet. Vi vil præsentere vores overvejelse både inden for matematikken og for de fysiske argumenter for opstillingen af en anden mangfoldighed, end den der er benyttet gennem dette projekt.

Vi har i dette projekt kunnet konkludere, at vores starthypotese ikke er gældende for en hvilken som helst mangfoldighed. Det har ihvertfald ikke været muligt at eftervise for  $\mathcal{M}$ , at geodætbevægelse i meget høje dimensioner på en enkeltssammenhængende flade med en endelig mængde toppunkter,  $\omega_i \in \Omega$ , vil befinde sig meget længere tid nær et punkt i  $\Omega$ , fremfor i et bundpunkt på grund af en sammenhæng mellem lokale arealer og  $r^N$ . Det er ikke umuligt, at det er gældende for særlige mangfoldigheder, så det er stadig en hypotese, der muligvis kan være gældende under særlige omstændigheder.

Der er oplagte steder, hvor der kunne laves rettelser i modellen. Det kunne muligvis have været interessant at forsøge at opstille en mangfoldighed defineret udfra sfæriske koordinater fremfor kartesiske. Vi forsøgte i dette arbejde at opstille en sådanne fra start af, men det viste sig, at det tog alt for meget regnekraft at udregne gradienter på sådan udformede  $\Phi$ -funktioner. Ved en sfærisk defineret mangfoldighed ville det alstå være en nødvendighed at bruge programmer med væsentligt tungere regnekraft end Matlab. Da det lykkedes os at opnå resultater, som vi anså for værende tilstrækkeligt interessante i kartesiske koordinater, fravalgte vi undersøgelser af sfærisk definerede mangfoldigheder. Det smarte ved at opstille mangfoldigheden i hypersfæriske koordinater ville være, at det ofte giver en nemmere visualisering af fladen i højere dimensioner.

Da den mangfoldighed, der er blevet benyttet og undersøgt i dette projekt, ikke har nogen fysisk oprindelse, men blot er en matematisk konstruktion, der udviser en række ønskede egenskaber, er der flere forskellige veje at gå, hvis man ønsker at undersøge andre mangfoldigheder. Hvis man ønsker at bibeholde de egenskaber ved  $\Phi_{\epsilon,N}$ , der gør den simpel at arbejde med, kan det ses, at  $\Phi_{\epsilon,N}$  kan skrives som

$$\Phi_{\epsilon,N}(\bar{x}) = -1 + \sum_i^N x_i^2 + \epsilon \sum_i^N (f(x_i) - k)^2 \quad (7.1)$$

hvor der om  $f(x_i)$  gælder, at den skal være lige, differentiabel og antage værdien

$f(1/\sqrt{N}) = k$ . En sådan funktion vil ændre, hvordan  $\mathcal{M}$  deformeres, når  $\epsilon$  ændres, men stadig have de egenskaber, som gør vores  $\mathcal{M}$  til en nem mangfoldighed at arbejde med.

I analysen af geodætbevægelsen, er der muligvis andre matematiske tilgange til problemet, som vi kunne have valgt at benytte. Det kunne have været interessant at beregne det  $N - 1$  dimensionelle areal til sammenligning af arealer i en omegn af et toppunkt med arealer i omegne omkring bundpunkter. Denne metode viste sig dog at tage for meget arbejde, da vi ved simuleringer af geodæterne på mangfoldigheden, alligevel opnåede tilstrækkeligt med resultater til, at arealberegningerne ikke var nødvendige. Foruden dette havde vi i starten en formodning om, at krumningen i punkter på mangfoldigheden, havde stor indflydelse på, hvordan geodætbevægelsen ville komme til at foregå. Da det viste sig, at vi ikke var i stand til at eftervise hypotesen, var det ikke længere en nødvendighed at gå i denne retning, men det udelukker ikke, at disse to kan være nyttige redskaber i undersøgelser af andre mulige mangfoldigheder.

Et oplagt sted at lede efter andre former for mangfoldigheder er at undersøge muligheden for at konstruere en  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  ud fra en mere fysisk baggrund. Vi mener her, at det kunne være interessant, at se på muligheden for at lave en mangfoldighed ved at undersøge eksisterende fysiske modeller for væskedynamik som for eksempel standard Lennard-Jones potentialet eller simple variationer af dette. Vi har forsøgt at pege på, hvorfor hypotesen ikke gælder, men en undersøgelse af en mangfoldighed baseret på fysikken ville muligvis kunne belyse, hvad det er, der styrer den opførsel, der ses i simuleringen af væskedynamik. Der er muligvis ikke behov for at lave en mangfoldighed fuldstændig ud fra et fysisk potentiale, blot man holder fast i nogle af de væsentlige aspekter. Det er dog absolut ikke sikkert, at en mangfoldighed konstrueret på denne måde vil komme til at besidde de samme egenskaber, som gjorde den i denne rapport benyttede  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  sammen med algoritmen fra [7] god som en karikaturmodel. Succeskriteriet for en sådan mangfoldighed ville være den samme opdeling i ”øer” omkring toppunkterne, som vi oplevede ved en gradvist stigende  $\epsilon$ .

En væsentlig ting, som ville være oplagt at inddrage i sin model, ville være som nævnt tidligere, at tage højde for, at det ikke er en mulighed for to partikler at ekistere i samme punkt. Som nævnt i diskussionen kunne det muligvis være denne forskel fra  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  der gør, at vi ikke ser at hypotesen bliver opfyldt, for den enkeltsammenhængende mangfoldighed. Rent fysisk burde der tages højde for, at det for eksempel ikke er muligt at befinde sig direkte i et toppunkt, da det svarer til, at alle partiklerne eksisterer i præcist samme punkt i et tre-dimensionelt system. Dette kunne dog nemt løses med en ikke direkte oversættelse af koordinaterne fra  $\mathbb{R}^3$  til  $\mathbb{R}^{3N}$ , men uanset hvordan man laver sine koordinater, vil man ikke kunne komme uden om, at der vil findes ufysiske punkter. Derfor bør en mere virkelighedsnær mangfoldighed indeholde en mængde huller svarende til fysisk umulige tilstande.

Hvis der skulle arbejdes videre med geodætbevægelse på den  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$ , der anvendes i dette projekt, som en model for glasovergange, ville det være interessant at gå dybere ind i relationerne mellem  $N$  og  $\epsilon$ , med henblik på at undersøge eksempelvis hvilke forhold mellem dem der bedst efterligner visse stadier af

en glasovergang i form af karakteristiske relaksationstider, og sandsynligheden for partikelomlejring. Der er tydeligvis en sammenhæng mellem forholdet mellem  $N$  og  $\epsilon$ , og tværsnitsarealtet af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  med de hyperplaner, hvor det ene koordinat er 0. Disse tværsnitsarealer relaterer sig igen til sandsynligheden for, at en geodæt bevæger sig fra et toppunkt til et andet, hvilket i fysiske termer kan fortolkes som den energibarriere systemet skal overkomme, for at opnå en omlejring. At kunne kontrollere størrelsen på denne energibarriere ville være en ting, der gjorde modellen anvendelig som en fysisk model.

En anden måde at arbejde videre med denne model kunne være, at lade  $\epsilon$  være en stigende funktion af tiden, så det derved var muligt at undersøge geodætbevægelser på en tidsafhængig flade. Dette kunne muligvis fungere som en mere spændende model for systemet, da den ville indeholde flere af de karakteristiske fysiske egenskaber. Ved simuleringer af  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  med en stigende tidsafhængig  $\epsilon$ -værdi er det altså muligt at give et billede af et partikelsystem, der ligger og fluktuerer omkring forskellige toppunkter, inden den bliver ”fanget” nær et toppunkt når  $\mathcal{M}_{\epsilon,N}$  bliver usammenhængende ved  $\epsilon > \frac{1}{2}(N + \sqrt{N^3})$ , hvilket ville svare til et billede af selve glasovergangen. Dermed kunne det tænkes, at funktionen  $\epsilon(t)$  havde en form for ubestemt relation med viskositeten af et system, hvilket kunne være interessant at undersøge nærmere.

En opgradering af modelarbejdet, ud fra disse fysiske aspekter, ville bringe den væsentligt længere væk fra en karikaturmodel og tættere på en mere teoribaseret og konkret model, hvilket på det lange sigt er en af målene med denne type arbejde. Det er absolut ikke sikkert, at den type model, som vi har beskrevet her, er den mest hensigtsmæssige måde, at modellere udviklingen i et fysisk system på, men det er et oplagt bud, som har vist sig at indeholde en stor del af de karakteristika, som vi ønsker at en god model for fænomenet skal indeholde.



# Litteratur

- [1] Nicholas P. Bailey, Ulf R. Pedersen, Nicoletta Gnan, Thomas B. Schröder, and Jeppe C. Dyre. Pressure-energy correlations in liquids. i. results from computer simulations. *Journal of Chemical Physics*, 129:13, 2008.
- [2] Nicholas P. Bailey, Ulf R. Pedersen, Nicoletta Gnan, Thomas B. Schröder, and Jeppe C. Dyre. Pressure-energy correlations in liquids. ii. analysis and consequences. *Journal of Chemical Physics*, 129:20, 2008.
- [3] R. M. J. Cotterill and J. U. Madsen. Localized fluidity modes and the topology of the constant-potential-energy hypersurfaces of lennard-jones matter. *Phys. Rev. B*, 127:10, 1986.
- [4] C.Wang and R.M. Stratt. Global perspectives on the energy landscapes of liquids, supercooled liquids, and glassy systems: The potential energy landscape ensemble. *J. Chem. Phys*, 127:10, 2007.
- [5] Karl J. Smith Gerald L. Bradley. *Calculus*. Prentice Hall International Editions, 1995.
- [6] Nicoletta Gnan, Thomas B. Schröder, Ulf R. Pedersen, Nicholas P. Bailey, and Jeppe C. Dyre. Pressure-energy correlations in liquids. iv. 'isomorphs' in liquid phase diagrams. *Journal of Chemical Physics*, 131:18, 2009.
- [7] Trond S. Ingebrigtsen, Søren Toxvaerd, Ole J. Heilmann, Thomas B. Schröder, and Jeppe C. Dyre. NVU dynamics. I. geodesic motion on the constant-potential-energy hypersurface. *Journal of Chemical Physics*, 135:9, 2011.
- [8] Trond S. Ingebrigtsen, Søren Toxvaerd, Thomas B. Schröder, , and Jeppe C. Dyre. NVU dynamics. II. comparing to four other dynamics. *Journal of Chemical Physics*, 135:7, 2011.
- [9] Yitzhak Katznelson and Benjamin Weiss. A simple proof of some ergodic theorems. *Israel Journal of Mathematics*, 42(4):291–296, 1982.
- [10] John McCleary. *Geometry from a differentiable viewpoint*. Cambridge University Press, 1994.
- [11] J. Milnor. *Morse Theory*. Princeton University Press, 1963.

- [12] Jorge M. Seminario Perla B. Balbuena. *Molecular Dynamics - From Classical to Quantum Methods*. Elsevier Science B. V., 1999.
- [13] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2004.
- [14] Richard J. Sadus. *Molecular Simulation of Fluids - Theory, Algorithms and Object-Oriented*. Elsevier, 1999.
- [15] Omri Sarig. Lecture notes on ergodic theory. Lecture notes, 2009.
- [16] Thomas B. Schröder, Nicholas P. Bailey, Ulf R. Pedersen, Nicoletta Gnan, and Jeppe C. Dyre. Pressure-energy correlations in liquids. iii. statistical mechanics and thermodynamics of liquids with hidden scale invariance. *Journal of Chemical Physics*, 131:17, 2009.
- [17] Thomas B. Schröder, Nicoletta Gnan, Ulf R. Pedersen, Nicholas P. Bailey, and Jeppe C. Dyre. Pressure-energy correlations in liquids. v. isomorphs in generalized lennard-jones systems. *Journal of Chemical Physics*, 134:11, 2011.
- [18] William J. Terrell. *Stability and Stabilization: An Introduction*. Princeton University Press, 2009.

# A Ergode teori

Formålet med dette afsnit er at præcisere nogle af de definitioner, vi anvender i vores arbejde med ergodisitet af mangfoldigheden sammen med vores algoritme. Afsnittet er skrevet ud fra [15].

**Definition A.0.1.** Et målrum er en triple  $(X, \beta, \mu)$ , hvor  $X$  er en mængde og  $\beta$  er en  $\sigma$ -algebra på  $X$ , altså en samling af underrum af  $X$ , der indholder den tomme mængde, er lukket under tællelige forening samt under komplement dannelse. Et element i  $\beta$  kaldes en målbar mængde.  $\mu : \beta \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup 0$  kaldes et mål og er en  $\sigma$ -additiv funktion, det vil sige en funktion sådan, at hvis  $E_1, E_2, E_3 \dots \in \beta$  er parvist disjunkte, da er  $\mu(\bigcup_i E_i) = \sum_i (\mu(E_i))$ . Hvis  $\mu(X) = 1$  kaldes målrummet for et sandsynlighedsrum.

**Definition A.0.2.** En målbevarende transformation er en quadruple  $(X, \beta, \mu, S)$ , hvor  $(X, \beta, \mu)$  er et målrum,  $S$  er en målbar transformation på  $\beta$ , altså  $E \in \beta \Rightarrow S^{-1}E \in \beta$  og  $\mu$  er  $S$  invariant, altså  $\mu(S^{-1}E) = \mu(E)$ . En målbar mængde  $E$  kaldes invariant hvis  $S^{-1}E = E$ .

**Definition A.0.3.** En målbevarende transformation kaldes ergodisk, hvis der for enhver invariant mængde  $E$  gælder, at  $\mu(E) = 0$  eller  $\mu(X/E) = 0$ .

Hvis  $X$  er et sandsynligheds rum,  $S$  en ergodisk målbevarende transformation og  $f$  en funktion på  $X$ , da siger Birkhoffs sætning:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f \circ S^i(\bar{x}) \rightarrow \int_X f dm \text{ for } n \rightarrow \infty \quad (\text{A.1})$$

Eller sagt mere simpelt: Når tiden går mod uendeligt, vil det tidslige gennemsnit af en funktion på  $X$  gå mod det rummelige gennemsnit [9].





## B Kildekoden

Dette afsnit indeholder kildekoden til de programmer, vi har skrevet i vores implementering af algoritmen.

Første program er hovedprogrammet. Dette er programmet, man kalder fra Matlab.

```
1 function [ph,n,d,stlen,grad, shift]=main(dim,ep,steps)
2
3 %% Init
4 X_now=ones(1,dim)*1/sqrt(dim);
5 X_now=init(X_now,dim,ep);
6
7 X_pre=init(X_now,dim,ep);
8 n=norm(X_now-X_pre)
9 p=phi(X_now,dim,ep)
10
11 %% Run
12 j='start'
13 d=zeros(200*steps,dim);
14 n=zeros(1,200*steps);
15 ph=zeros(1,200*steps);
16 stlen=zeros(1,200*steps);
17 grad=zeros(200*steps,dim);
18 shift=0;
19 for j=1:1:steps
20     [data,p,nor, st,X_now X_pre,g,s]=run(X_now,X_pre,ep,dim);
21     %for k=1:1:1000
22     % if phi(data(
23     n(200*j-199:200*j)=nor;
24     ph(200*j-199:200*j)=p;
25     d(200*j-199:200*j,:)=data;
26     stlen(200*j-199:200*j)=st;
27     grad(200*j-199:200*j,:)=g;
28     shift=shift+s;
29     j
30 end
```

Det næste program er det der kører simuleringen. Disse programmer arbejder sammen ved, det følgende program sender data ud til det forgående for hver 1000 skridt. Vi har fundet, at dette gør det muligt for os at arbejde med større systemer.

```

1 function [data,p,nor,stlen,X_new, X_pre,grad,shift] = run(X_now,X_pre,ep,dim)
2
3 steps=1000;
4 %d=min(20,dim);
5 d=dim;
6 data=zeros(floor(steps/5),d);
7 shift=0;
8 nor=zeros(1,steps/5);
9 p=zeros(1,steps/5);
10 grad=zeros(steps/5,dim);
11 stlen=zeros(1,steps/5);
12 for i=1:1:steps
13     X_new=move(X_now,X_pre,ep,dim);
14     if mod(i,5)==0
15         grad(i/5,:)=gradient(X_now,ep,dim);
16         data(i/5,1:d)=X_new(1:d);
17         k=i/5-1;
18         if k==0
19             k=steps/5;
20         end
21         s=(data(i/5,:).*data(k,:));
22         s=(s<0);
23         shift=shift+sum(s);
24         nor(i/5)=norm(X_new);
25         p(i/5)=phi(X_new,dim,ep);
26         stlen(i/5)=norm(X_now-X_pre);
27     end
28     X_pre=X_now;
29     X_now=X_new;
30
31 end

```

Følgende program anvendes til at danne de første to punkter til algoritmen samt et underpunkt til dette program.

```

1 function X=init(X_in,dim,ep)
2
3 X=X_in+makeRand(dim);
4
5 z=i;
6 atempt=0;
7 while z==i
8
9     x=X(1:end-1);
10    s=sum(x.^4+(1/ep-2/dim)*x.^2);
11    a=(1/(2*ep)-1/dim)^2-1/dim+1/ep-s;
12
13    if a>0
14        b=1/dim-1/(2*ep);
15        if b+sqrt(a)>0
16            z=sqrt(b+sqrt(a));
17            break
18        elseif b-sqrt(a)>0
19            z=sqrt(b-sqrt(a));
20            break

```

```

21     end
22 end
23 if atempt==100
24     error('dårlig data')
25
26 end
27 X=X.in+makeRand(dim);
28 atempt=atempt+1;
29 end
30
31 X(end)=z;

```

```

1 function X=makeRand(dim)
2
3 r=rand(1,dim);
4 X=1/dim^(3/2)*(r*2-1);

```

Hernæst følger en række programmer, der hver har sin lille funktion. Det første udregner  $\Phi$  i et punkt, det næste gradienten til  $\Phi$  og dernæst et, der udfører selve algoritemen fra [7].

```

1 function p=phi(X,dim,ep)
2
3 s=sum(X.^4+(1/ep-2/dim)*X.^2);
4 p=ep*(s+1/dim-1/ep);

```

```

1 function g=gradient(x, ep,dim)
2
3 g=2*x.*(1+2*ep*(x.^2-1/dim));

```

```

1 function X.new=move(X.now,X.pre,ep,dim)
2
3 f=gradient(X.now,ep,dim);
4
5 X.new=2*X.now-X.pre-(2*(f*(X.now-X.pre)'+phi(X.pre,dim,ep))/norm(f)^2*f);

```