

## SF1544/BE3003 Laboration 2: Energin och metoder för Hamiltonska system

Denna laboration handlar först om att studera Keplerproblemet

$$\begin{aligned}\ddot{q}_1(t) &= - \frac{q_1(t)}{(q_1^2(t) + q_2^2(t))^{3/2}}, \\ \ddot{q}_2(t) &= - \frac{q_2(t)}{(q_1^2(t) + q_2^2(t))^{3/2}},\end{aligned}\tag{1}$$

och jämföra olika numeriska metoders approximation över långa tider. En viktig egenskap är att bevara systemets energi. Laborationen belyser kvalitativa likheter med vågekvationen, Schrödingerekvationen, molekylodynamik och planetsystem. T.ex. illustreras vågors reflektion i en Matlab-film. Frågorna nedan, som inte alltid precist formulerade, ska ses som en vägledning för att skriva en laborationsrapport.

Kepler upptäckte med hjälp av noggranna mätningar att planeterna i solsystemet rör sig i elliptiska banor med solen i en brännpunkt (Keplers första lag, 1609). Newton förklarade (1687) denna rörelse med gravitationskraft (proportionell mot  $1/r^2$  där  $r$  är avståndet) och relationen mellan krafter och acceleration (Newtons andra lag). Detta visade vägen för att studera himlavalvets mekanik med hjälp av differentialekvationer. Nu används Newtons mekanik också för att studera molekylodynamik och mycket annat. Syftet med denna laboration är att se att totala energin bevaras för sådana differentialekvationer (inklusive vågekvationen) och studera hur olika numeriska metoder hanterar energin och approximation över lång tid.

Välj tidsteget och antal steg lagom stora så att beräkningen inte tar för lång tid och plottarna ser vettiga ut. (Kanske är steglängden 0.05 bra med 5000 steg för andra ordningens metoder och steglängden 0.0005 med 500000 steg för första ordningens metoder). Beteckningarna för en vektors komponenter är  $y = (y_1, y_2, \dots, y_d) \in \mathbb{R}^d$  och vektorns värde vid tidsteg  $n$  är  $y^n$ .

**1.** Jämför de fyra metoderna framåt Euler (explicit Euler), bakåt Euler (implicit Euler), mittpunktsmetoden och symplektiska Euler, som tar följande form för  $y' = f(y)$ ,  $\Delta t = h$ ,  $y^n \simeq y(nh)$

$$y^{n+1} = y^n + hf(y^n) \quad \text{framåt Euler}$$

$$y^{n+1} = y^n + hf(y^{n+1}) \quad \text{bakåt Euler}$$

$$y^{n+1} = y^n + hf\left(\frac{1}{2}(y^n + y^{n+1})\right) \quad \text{(implicita) mittpunktsmetoden.}$$

Ett Hamiltonskt system är ett dynamiskt system som kan skrivas på formen

$$\begin{aligned}\dot{q}(t) &= \nabla_p H(p(t), q(t)), \\ \dot{p}(t) &= -\nabla_q H(p(t), q(t)),\end{aligned}\tag{2}$$

där  $\nabla_p$  är gradienten med avseende på  $p$  (här är  $p = (p_1, p_2)$ ). För Hamiltonska system kan symplektiska Eulermetoden skrivas som

$$\begin{aligned}q^{n+1} &= q^n + h\nabla_p H(p^{n+1}, q^n), \\ p^{n+1} &= p^n - h\nabla_q H(p^{n+1}, q^n).\end{aligned}$$

a) Visa först att (1) är ett Hamiltonskt system med Hamiltonianen

$$H(p, q) = \frac{1}{2}|p|^2 - \frac{1}{|q|},$$

där  $|q| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$ ; det vill säga, visa att (1) kan skrivas på formen (2).

b) Visa att energin  $H(p(t), q(t))$  är konstant för den exakta lösningen (1).

c) Plotta banorna  $(q_1(t), q_2(t))$  i koordinatsystem i planet, för de olika metoderna med begynnelsedata

$$q_1(0) = 1 - a, \quad q_2(0) = 0, \quad p_1(0) = 0, \quad p_2(0) = \sqrt{\frac{1+a}{1-a}}$$

där  $0 \leq a < 1$  kallas excentriciteten. Ekvationen (1) är det s.k. två-kropps problemet, där två kroppar attraherar varandra med Newtons kraft och koordinaterna väljs så att ena kroppen är i origo. Newton visade matematiskt att banan blir en ellips med excentricitet  $a$ . Kepler såg sådana planetbanor tidigare. Välj t.ex.  $a = 0.5$ .

d) Vad händer med energin  $H(p(t), q(t))$  som funktion av  $t$  för metoderna?

2. Det enklaste Hamiltonska systemet är

$$y' = iy\tag{3}$$

där  $i$  är den imaginära enheten och  $y(t) \in \mathbb{C}$ . Vi ser att Hamiltonianen är  $|y|^2/2$  och att realdelen och imaginärdelen av  $y$  löser harmoniska oscillator-ekvationen  $\ddot{x} = -x$ . Ekvationen (3) lämpar sig för att med explicita kalkyler jämföra numeriska metoder analytiskt. Bevisa att energin, dvs  $H$  som funktion av  $t$ , är

växande för framåt Eulermetoden,  
avtagande för bakåt Eulermetoden,  
konstant för mittpunktsmetoden och exakta lösningen.

### 3a. Vågekvationen

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) &= c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad t > 0, \quad x \in (0, 1) \\ u(0, t) &= u(1, t) = 0,\end{aligned}\tag{4}$$

där  $c$  är konstant (ljud/ljus hastighet), kan approximeras i två steg: definiera vektorn  $\bar{u}(t) \in \mathbb{R}^{N+1}$ , där  $\bar{u}_j(t) \simeq u(j/N, t)$  för  $j = 0, 1, 2, \dots, N$  och låt  $N^2(\bar{u}_{j+1}(t) - 2\bar{u}_j(t) + \bar{u}_{j-1}(t)) \simeq \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(j/N, t)$  vara den vanliga approximationen av andraderivatan, då får vi följande system av differentialekvationer

$$\frac{d^2 \bar{u}_j(t)}{dt^2} = c^2 N^2 (\bar{u}_{j+1}(t) - 2\bar{u}_j(t) + \bar{u}_{j-1}(t)), \quad j = 1, \dots, N-1,\tag{5}$$

så att  $d^2 \hat{u}(t)/dt^2 = c^2 A \hat{u}(t)$  där  $\hat{u}(t) \in \mathbb{R}^{N-1}$  är vektorn med komponenterna  $\hat{u}_j(t) = \bar{u}_j(t)$ ,  $j = 1, \dots, N-1$  och  $A$  är  $(N-1) \times (N-1)$  matrisen med  $-2N^2$  i diagonalen och  $N^2$  i övre och undre diagonalen. Visa att energin  $|\dot{\hat{u}}(t)/dt|^2/2 - c^2 \hat{u}(t) \cdot A \hat{u}(t)/2$  är konstant för alla tider, där  $\cdot$  betyder skalärprodukt i  $\mathbb{R}^{N-1}$ . Föreslå en lämplig numerisk metod. Visa också att vågekvationen (5) är ett Hamiltonskt system.

### 3b. d'Alemberts lösningsformel

$$u(x, t) = \frac{1}{2} (u(x + ct, 0) + u(x - ct, 0)),\tag{6}$$

beskriver lösningen till vågekvationen i ett oändligt område

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}$$

med data  $\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0$ ; visa detta. Gör gärna filmer som visar lösning av (5) och (6). Här nedan är ett utkast till matlabkod som konstruerar en film. Vad händer om randvillkoren i (5) och (4) byts mot

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial u(1, t)}{\partial x} = 0 ?$$

```
N=200;           % antal interval
a=1.0;           % parameter i begynnelsedata
T=0.5;           % sluttid
dx=a/(N+1);      % steglängd i rummet
dt=dx/2.0;       % tidssteg, tänk på stabilitetsvillkoren
M=fix(T/dt);     % antal tidsteg
```

```

figure(1)
axis([0 1 -1 1])

                                % allokering av minne
u=zeros(N,M); % u(n,m) utböjning vid tid m*dt i position n*dx
p=zeros(N,M); % p=u'
A=zeros(N,N); % Au är differensapproximation av d^2 u/dx^2
X=zeros(N,1); % X(n) blir n*dx
v=zeros(N,M);

write_obj = VideoWriter('outw.avi');
write_obj.FrameRate = 10;
open(write_obj);

nframe=M; % kommando för film
mov(1:nframe)= struct('cdata',[],'colormap',[]);
set(gca,'nextplot','replacechildren')

for n=2:N-1 % slinga med rumssteg för att bilda begynnelsedata och A
    ...
end

                                % bilda A på randen

for m=1:M % tidstegning med symplektiska Euler
    ...
    plot(X,u(:,m), 'b', 'Linewidth', 1)

    mov(m)=getframe(gcf);
end

writeVideo(write_obj,mov);
close(write_obj);

writeVideo(write_obj,mov);
close(write_obj);

```

#### 4. När Schrödingerekvationen

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -iH\psi(t),$$

skall lösas numeriskt vill man att totala sannolikheten  $|\psi(t)|^2 = \sum_{i=1}^n \psi_i(t)\bar{\psi}_i(t)$  bevaras (d.v.s är konstant i tiden). Här är  $\bar{\psi}_i$  komplexkonjugatet av  $\psi_i$ , matrisen  $H$  är en konstant symmetrisk reell  $n \times n$  matris (rumsdiskretiseringen är redan gjord) och  $\psi(t) \in \mathbb{C}^n$  är vågfunktionen vid tiden  $t$ . Föreslå en lämplig numerisk metod. Visa att Schrödingerekvationen är ett Hamiltonskt system.

**5.** Lös Keplerproblemet med en metod som har formell hög noggrannhet, t.ex. `matlabs ode45`. Är `ode45` bättre än mittpunktsmetoden och symplektiska Euler också för lång tid? Vad är noggrannhetsordningen för dessa metoder?

**6.** Den dominerande metoden för standard molekylodynamik,  $\ddot{q} = -f(q)$ , med konstant antal partiklar, volym och energi, är Verlets metod (kallas Störmers metod i astronomi) som leder till

$$\frac{q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1}}{h^2} = -f(q^n).$$

Visa att detta också gäller för symplektiska Eulermetoden. Molekylodynamik används t.ex. i materialvetenskap för att bestämma materialegenskaper som diffusionskonstant, konduktivitet och viskositet från fundamentala principer och i biokemi för att studera proteiners rörelse. Då är  $q$  en vektor i  $\mathbb{R}^{3N}$  som anger läget av  $N$  atomer och  $f$  är krafterna som verkar på atomerna. I molekylodynamik är man intresserad av att approximera så kallade observabler  $\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T g(q(t))dt/T$  för givna funktioner  $g$ , t.ex. potentiella energin  $g(q) = V(q)$ , där  $V'(q) = f(q)$ .