

Laboration 3: Numeriska metoder för Hamiltonska system

Labben redovisas med en kortfattad skriftlig rapport, och efterföljande individuell muntlig redovisning. Se Canvas för information om vad rapporten ska innehålla och för bokning av redovisningstider. Rapporten ska laddas upp till Canvas tillsammans med all kod ni skrivit själva (se deadline på Canvas). Utnyttja gärna alla schemalagda handledningstillfällen för att ställa frågor.

Denna laboration handlar först om att studera Keplerproblemet,

$$\begin{aligned}\ddot{q}_1(t) &= - \frac{q_1(t)}{(q_1^2(t) + q_2^2(t))^{3/2}}, \quad t \geq 0, \\ \ddot{q}_2(t) &= - \frac{q_2(t)}{(q_1^2(t) + q_2^2(t))^{3/2}},\end{aligned}\tag{1}$$

med tillhörande begynnelsevillkor, och jämföra olika numeriska metoders approximation över långa tider. En viktig egenskap är att bevara systemets energi. Laborationen belyser sedan kvalitativa likheter mellan vågekvationen, molekylodynamik och planetsystem. Ni kommer dessutom illustrera vågors reflektion i en MATLAB-film.

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.

Om vi skriver om systemet (1) till ett första ordningens system kan framåt Euler (explicit Euler), bakåt Euler (implicit Euler) och mittpunktsmetoden appliceras på detta. Beteckningarna för en vektors komponenter är $y = (y_1, y_2, \dots, y_d) \in \mathbb{R}^d$. Med ett tidssteg $\Delta t = h$ betecknar vi tidpunkten $t_n = nh$ och approximationen vid denna tidpunkt ges av $y^n \simeq y(nh)$.

För en ekvation på formen $y' = f(y)$, $y(0) = \eta_0$, initierar vi $y^0 = \eta_0$, och beräknar för $n = 0, 1, \dots$ en approximativ lösning genom

$$\begin{aligned}y^{n+1} &= y^n + hf(y^n) \quad \text{för framåt Euler} \\ y^{n+1} &= y^n + hf(y^{n+1}) \quad \text{för bakåt Euler} \\ y^{n+1} &= y^n + hf\left(\frac{1}{2}(y^n + y^{n+1})\right) \quad \text{för (implicita) mittpunktsmetoden.}\end{aligned}$$

Symplektisk Euler är en numerisk metod för lösning av Hamiltonska system, vilka är dynamiska 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 ∇_p är gradienten med avseende på p (p är ofta en vektor med flera komponenter). Symplektiska Eulermetoden kan skrivas som

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

Uppgift 1. Vi vill nu jämföra de fyra metoderna framåt Euler (explicit Euler), bakåt Euler (implicit Euler), mittpunktsmetoden och symplektisk Euler tillämpade på system (1) i lämplig omskriven form.

- Skriv om (1) till ett första ordningens system. Kalla dina nya obekanta för p_1, p_2 , så att Lösningsvektorn är (q_1, q_2, p_1, p_2) .
- Visa 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) med $p = (p_1, p_2)$.
Tips: Beräkna gradienterna av den givna Hamiltonianen med avseende på p och q .

- Visa att energin $H(p(t), q(t))$ är konstant för den exakta lösningen till (1). *Notera:* Du behöver inte veta den exakta lösningen för att visa detta.
- Implementera de fyra tidsstegningsmetoderna i Matlab. För de implicita metoderna behövs en iterativ metod för att lösa ett icke linjärt system i varje tidssteg. Plotta banorna $(q_1(t), q_2(t))$ i koordinatsystem i planet för de olika numeriska 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-kroppars-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. $a = 0.5$.

För att beräkna fram till tiden $t = 100$ kan du t.ex. börja med att använda steglängden 0.05 med 2000 steg för andra ordningens metoder och steglängden 0.0005 med 20000 steg för första ordningens metoder. Ändra tidssteget och se hur stor effekt det har.

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

Uppgift 2. Det enklaste Hamiltonska systemet är

$$y' = iy, \quad (3)$$

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 den 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.

Tips: Om $y^{n+1} = Cy^n$ (n tidsindex) har vi $y^n = C^n y_0$.

Uppgift 3. För en symplektisk metod betyder inte nödvändigtvis bevarande av energi att noggrannheten är hög. Du kan hålla dig på rätt lösningsbana, men vara vid fel punkt på lösningsbanan vid en viss tid, och vi vill nu undersöka felet i lösningsvektorn (q_1, q_2, p_1, p_2) .

Lös Keplerproblemet (dvs det problem du löste i uppgift 1d) med MATLABs `ode45`. Från laboration 1 i kursen vet vi att detta är en adaptiv metod som bygger på högre ordningens Runge-Kutta metoder, för vilken du kan ange relativ och absolut feltolerans (`RelTol` och `AbsTol`).

Lös för lång tid, fram till tiden $t = 500$, och jämför `ode45` (med en strikt feltolerans) med symplektisk Euler och implicita mittpunktsmetoden för olika storlekar på tidssteget, både vad gäller bevarande av energi och vad gäller värdet av lösningsvektorn vid sluttiden. Vad är noggrannhetsordningen för symplektisk Euler och implicita mittpunktsmetoden? Givet att du vill uppnå en viss noggrannhet i lösningsvektorn, vilken av de tre metoderna är mest effektiv? Om du vill mäta tidsåtgång så kan du använda t.ex. `tic` och `toc`.

Uppgift 4. d'Alemberts lösningsformel

$$u(x, t) = \frac{1}{2}(g(x + ct) + g(x - ct)) \quad (4)$$

beskriver lösningen till vågekvationen i ett oändligt område

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (5)$$

där c är konstant (ljud/ljus-hastighet), med begynnelsedata

$$u(x, 0) = g(x), \quad (6)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0. \quad (7)$$

(Frivillig uppgift: Visa detta!)

På ett begränsat område finns ingen sådan lösningsformel, och vi måste bestämma en numerisk approximation. Vågekvationen

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t), \quad t > 0, \quad x \in (0, 1) \quad (8)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad (9)$$

med givna begynnelsedata, kan approximeras i två steg, genom att först diskretisera i rummet (x) och sedan i tiden (t).

För diskretisering i rummet, definiera vektorn $\bar{u}(t) \in \mathbb{R}^{N+1}$, där $\bar{u}_j(t) \simeq u(hj, t)$ för $j = 0, 1, 2, \dots, N$ med $h = 1/N$ och låt $(\bar{u}_{j+1}(t) - 2\bar{u}_j(t) + \bar{u}_{j-1}(t))/h^2 \simeq \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(hj, t)$ vara den vanliga approximationen av andraderivatan. Då får vi följande system av differentialekvationer

$$\frac{d^2 \bar{u}_j(t)}{dt^2} = c^2 (\bar{u}_{j+1}(t) - 2\bar{u}_j(t) + \bar{u}_{j-1}(t))/h^2, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (10)$$

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 $-2/h^2$ i diagonalen och $1/h^2$ i övre och undre diagonalen. Notera: Vektorn $\bar{u}(t) \in \mathbb{R}^{N+1}$ innehåller alla element i vektorn $\hat{u}(t) \in \mathbb{R}^{N-1}$, samt randvärdena som första och sista värde.

- Visa att energin $E = |d\hat{u}(t)/dt|^2/2 - c^2 \hat{u}(t) \cdot A \hat{u}(t)/2$ är konstant för alla tider, där \cdot betyder skalärprodukt i \mathbb{R}^{N-1} . Visa också att vågekvationen (10) är ett Hamiltonskt system med Hamiltonianen given av $H = E$.
- Föreslå en lämplig numerisk metod för diskretisering i tiden.
- Antag begynnelsevillkor enligt (6)-(7) med

$$g(x) = e^{-200(x-0.5)^2}. \quad (11)$$

Gör en film som visar den numeriska lösningen av (10) tillsammans med resultatet från lösningsformeln (4). Nedan följer ett utkast till MATLAB-kod som skapar en film. Ta med ett par ögonblicksbilder från filmen i er kortfattade rapport. Plotta även energin E (definierad i uppgift a)) som en funktion av tiden. Vad noterar du?

```
N=200;          % antal intervall
T=2;            % sluttid
dx=1/N;         % steglängd i rummet
dt=dx/2.0;      % tidssteg, tänk på stabilitetsvillkoren
M=round(T/dt); % antal tidssteg

                % allokering av minne
u=zeros(N-1,M+1); % u(n,m) lösningens värde vid tid (m-1)*dt i position n*dx
p=zeros(N-1,M+1); % p=u'
```

```

A=zeros(N-1,N-1); % Au är differensapproximation av d^2 u/dx^2
x = dx*(1:N-1)'; % x(n) är n*dx
E = zeros(1,M+1); % För att beräkna energin i varje tidssteg.

%Skapa matrisen A
...
%Sätt begynnelsedata för u och p.
...
%Räkna ut energin E vid tiden 0.
....

nframe=M+1; % kommando för film
mov(1:nframe)= struct('cdata',[],'colormap',[]);
figure;
plot(X,u(:,1), 'b', 'Linewidth', 1); %Plot vid tiden t=0.
axis([0 1 -1 1])
set(gca, 'nextplot', 'replacechildren')
drawnow
mov(1)=getframe(gcf); %Första frame i filmen.

for m=1:M % tidsstegning med symplektiska Euler
    ...
    X = [0;x;L]; U = [0;u(:,m);0];
    plot(X, U, 'b', 'Linewidth', 1)
    hold on;
    %Plotta även lösningen från d'Alemberts formel
    .....
    text(0.05,-0.8, sprintf('t=%.2f', t))
    set(gca, 'nextplot', 'replacechildren')
    drawnow
    mov(m+1)=getframe(gcf);
    %Räkna ut energin av den numeriska lösningen vid detta tidsstag
    .....
end

```

För att spela upp filmen används kommandot `movie`.

- d) Byt nu Dirichlet-randvillkoren i (9) mot Neumann-villkoren

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0. \quad (12)$$

Du behöver ändra matrisen A för lösning av (10) för att tillämpa dessa nya randvillkor. Randvillkoren kan diskretiseras som

$$\frac{\bar{u}_1(t) - \bar{u}_{-1}(t)}{2h} = \frac{\bar{u}_{N+1}(t) - \bar{u}_{N-1}(t)}{2h} = 0, \quad (13)$$

där punkterna $\bar{u}_{-1}(t)$ och $\bar{u}_{N+1}(t)$ har lagts till som s.k. spökpunkter (ghost points). Genom att använda ekvation (10) också för $j = 0$ och $j = N$ kan man i dessa ekvationer eliminera $\bar{u}_{-1}(t)$ respektive $\bar{u}_{N+1}(t)$ med hjälp av de diskretiserade randvillkoren i (13). Då får man ekvationer för alla komponenter i vektorn $\bar{u}(t) \in \mathbb{R}^{N+1}$, dvs man löser även för värdet av lösningen på ränderna. Matrisen A blir nu en $(N+1) \times (N+1)$ matris.

Lös problemet med samma begynnelsevillkor som i uppgiften ovan. Hur ändras reflektionerna och bevarandet av energin jämfört med fallet med Dirichlet-randvillkor? Inkludera plottar av lösningen vid olika tider som i uppgiften ovan, samt en plot av energin som funktion av tiden.

Uppgift 5. 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

$$\frac{q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1}}{h^2} = -f(q^n). \quad (14)$$

Visa att (14) också gäller för symplektiska Eulermetoden. *Tips:* Börja med att skriva om $\ddot{q} = -f(q)$ till ett första ordningens system och diskretisera detta.

Uppgift 6. (*Frivillig uppgift*) När Schrödingerekvationen,

$$\frac{d}{dt}\psi(t) = -i\hat{H}\psi(t),$$

skall lösas numeriskt vill man att den 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 ψ_i , matrisen \hat{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 . Visa att Schrödingerekvationen är ett Hamiltonskt system. Föreslå en lämplig numerisk metod.