9.12.14 (1)

שיטות נומריות מתקדמות - הרצאה ד

תזכורת: דינמיקה של מערכת מולקולרית באמצעות $H(q,p)$

$$(*)\begin{cases} H(q,p) \\ \dot{q} = \nabla_p H \\ \dot{p} = -\nabla_q H \end{cases}$$

אם $H = \frac{1}{2} p^T M^{-1} p + V(q)$

$$\begin{cases} \dot{q} = -M^{-1} p \\ \dot{p} = -\nabla_q V(q) \end{cases} \Rightarrow$$ משוואות ניוטון

אם $q,p \in \mathbb{R}^{3N}$ (N מס' אט') אז

$$J = \begin{pmatrix} 0_{3N} & I_{3N} \\ -I_{3N} & 0_{3N} \end{pmatrix}$$

$$z = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{6N}$$

ואז ניתן לרשום את מערכת (*) כ:

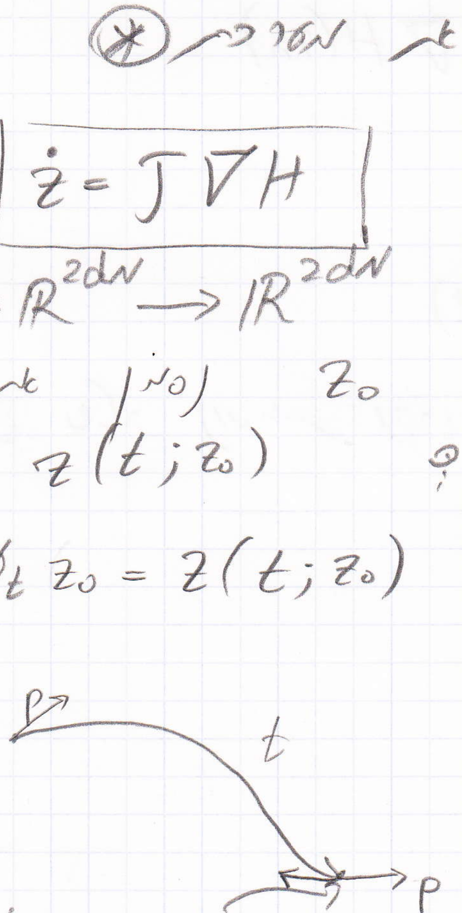
$$\boxed{\dot{z} = J \nabla H}$$

העתקת הזרימה: $\phi_t : \mathbb{R}^{2dN} \to \mathbb{R}^{2dN}$

בהינתן תנאי התחלה z_0 נסמן את הפתרון של $\dot{z} = J\nabla H$ כ: $z(t; z_0)$ ואז

$$\phi_t z_0 = z(t; z_0)$$

סימטריות בזמן



p_t נהפוך ונחזור אחורה בזמן t, נגיע לתנאי ההתחלה

בצורה פורמלית: נגדיר $\rho\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix}$

$$\boxed{\rho \phi_t \rho \phi_t z = z}$$

או בצורה

$$\rho \phi_t z = (\rho\phi_t)^{-1} z = \underbrace{\phi_t^{-1}}_{\phi_{-t}} \underbrace{\rho^{-1}}_{\rho} z$$

אם כך, מערכת נקראת סימטרית בזמן אם

$\rho\phi_t = \phi_{-t}\rho$ או $\rho\phi_t\rho\phi_t = id$.

- ראינו כי הדינמיקה ההמילטונית הפיכה בזמן.

(*) בהינתן שיטה נומרית (צעד 1 בגודל קבוע h)

נגדיר את העתקת הזרימה של השיטה ϕ_h.

<u>דוגמא:</u> F.E עבור $\dot{z} = J\nabla H$

אם כך נקבל: $z_{n+1} = z_n + hJ\nabla H(z_n)$

$$\begin{cases} z_{n+1} = \phi_h z_n \\ \phi_h(z) = z + hJ\nabla H(z) \end{cases}$$

<u>הגדרה:</u> שיטה נומרית נקראת סימטרית בזמן אם:

$$\rho \circ \phi_h = \phi_{-h} \circ \rho$$

$$\Leftrightarrow \rho\phi_h\rho\phi_h = id$$

9.12.14 | 2

F.E <u>דוגמא:</u>

$$\phi_h\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}+h\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nabla_q V(q)\\M^{-1}p\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}q+hM^{-1}p\\p-h\nabla_q V(q)\end{pmatrix}$$

$$\rho\phi_h\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q+hM^{-1}p\\-p+h\nabla_q V(q)\end{pmatrix}$$

$$\phi_h\rho\phi_h\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q+hM^{-1}p+hM^{-1}(-p+h\nabla_q V(q))\\-p+h\nabla_q V(q)-h\nabla_q V(q+hM^{-1}p)\end{pmatrix}$$

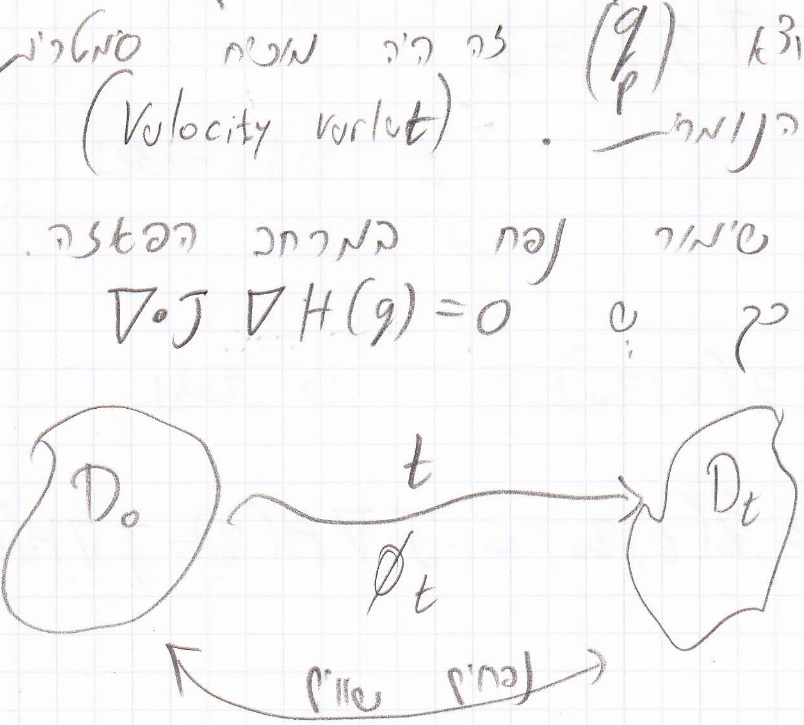
$$\rho\phi_h\rho\phi_h\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}q+\cancel{hM^{-1}p}+hM^{-1}(\cancel{-p}+h\nabla_q V(q))\\p-h\nabla_q V(q)+h\nabla_q V(q+hM^{-1}p)\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}h^2M^{-1}\nabla_q V(q)\\O(h^2)\end{pmatrix}$$

<u>תיקון לשיטה שגם</u> S.E לא סימטרית!!

* אם היה יוצא $\begin{pmatrix}q\\p\end{pmatrix}$ לשיטה הנומרית. זה היה מפתח סימטריות בזמן (Velocity verlet)

<u>משפט ליוביל:</u> שימור נפח במרחב הפאזה.
הסתמך על כך ש $\nabla\cdot J\nabla H(q)=0$



$V(t)=Vol(D_t)=Const$

שטף מרחבי בהופכה היא

$$V(s+t) = \int_{D_s} \left| \det \underbrace{\frac{\partial \phi_t}{\partial z}}_{\Phi_t} \right| dV$$

(הכללה)

<u>הגדרה:</u> העתקה ϕ_t נקראת סימפלקטית אם

$$\forall\, t,z \qquad (\Phi_t^T z) J (\Phi_t z) = J$$

העתקה סימפלקטית בהכרח משמרת נפח במרחב פאזה

שכן

$$\det \Phi_t z = \pm 1$$

<u>טענה:</u> הדינמיקה ההמילטונית היא סימפלקטית

<u>הוכחה:</u> נסמן

$$W_t = \Phi_t^T z J \Phi_t z$$

(בפרט זה מוכיח שמשפט ליוביל מתקיים)

צ"ל

$$\forall\, t,z \quad W_t = J$$

<u>עבור $t=0$:</u>

$$\phi_0 = I$$

$$\Phi_0 = \frac{\partial \phi_0}{\partial t} = I$$

I_{2n}

ולכן

$$\Phi_0^T z J \Phi_0 z = I J I = J$$

נגזור לפי t

$$\frac{d}{dt} W_t =$$

נזכר כי

$$\phi_t z_0 = z(t; z_0)$$

$$\frac{d\, \phi_t z_0}{dt} = \dot{z}(t; z_0) = J \nabla H(z) = J \nabla H(\phi_t z_0)$$

9.12.14 3

נגזיר לפי $\frac{\partial}{\partial z_0}$ וקטור

$$\frac{d}{dt}\Phi_t z_0 = J\nabla^2 H(z)\Phi_t z_0$$

$$-\frac{d}{dt}W_t = \left(\frac{d\Phi_t z}{dt}\right)^T J\Phi_t z + \Phi_t^T z J\left(\frac{d\Phi_t z}{dt}\right)$$

$$\Phi_t^T z(\nabla^2 H(z))^T \underbrace{J^T J}_{I}\Phi_t z + \Phi_t^T z \underbrace{J J}_{-I}\nabla^2 H(z_0)\Phi_t z$$

$$\Phi_t^T z(\nabla^2 H)^T\Phi_t z - \Phi_t^T z\nabla^2 H \Phi_t z = 0$$

כי ההסיאן מטריצה סימטרית

מ.ש.ל

משפט (הפוך): כל דינמיקה סימפלקטית היא המילטוניאנית.

(לא נוכיח)

עבור שיטות נומריות: בדיקת סימפלקטי עבור F.Euler

F.E

$$\phi_h\begin{pmatrix} q \\ p\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q + hM^{-1}p \\ p - h\nabla_q V(q)\end{pmatrix}$$

$$\Phi_h\begin{pmatrix} q \\ p\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & hM^{-1}\\ -h\nabla_q^2 V(q) & 1\end{pmatrix}$$

כעת נציב (במשפט)

$$\begin{pmatrix}1 & -h\nabla_q^2V(q)\\ hM^{-1} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&hM^{-1}\\-h\nabla_q^2V(q)&1\end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -h\nabla_q^2 V(q) \\ hM^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -h\nabla_q^2 V(q) & 1 \\ -1 & -hM^{-1} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 + h^2 \nabla_q^2 V(q) M^{-1} \\ -1 - h^2 M^{-1} \nabla_q^2 V(q) & 0 \end{pmatrix} = J + O(h^2)$$

לא סימפלקטי

אוילר S.E הוכחה לסימפלקטיות.

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hM^{-1} p_n \\ p_{n+1} = p_n - h\nabla_q V(q_{n+1}) = p_n - h\nabla_q V(q_n + hM^{-1} p_n) \end{cases}$$

$$\phi\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q + hM^{-1} p \\ p - h\nabla_q V(q + hM^{-1} p) \end{pmatrix}$$

$$\Phi_h \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & hM^{-1} \\ -h\nabla_q^2 V(q + hM^{-1} p) & 1 - h^2 \nabla_q^2 V(q + hM^{-1} p) M^{-1} \end{pmatrix}$$

$\tilde{q} = q + hM^{-1} p$

$$J \Phi_h z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & hM^{-1} \\ -h\nabla_q^2 V(\tilde{q}) & 1 - h^2 \nabla_q^2 V(\tilde{q}) M^{-1} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -h\nabla_q^2(\tilde{q}) & 1 - h^2 \nabla_q^2 V(\tilde{q}) M^{-1} \\ -1 & -hM^{-1} \end{pmatrix}$$

$$(\Phi_h z)^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 - \cancel{h^2 \nabla_q^2 V(\tilde{q}) M^{-1}} + \cancel{h^2 \nabla_q^2 V(\tilde{q}) M^{-1}} \\ \cancel{-h^2 M^{-1} \nabla_q^2 V(\tilde{q})} - 1 + \cancel{h^2 \nabla_q^2 V(\tilde{q}) M^{-1}} & 0 \end{pmatrix} = J$$

מתבטל

9.12.14 (4)

סימפלקטיות שומרת מבנה המילטוני, לא שהשיטה
הנומרית היא המילטונית, ז"א לדינמיקה ההמילטונית
מתקיים חוק שימור עבור המילטוניאן אחר H_h
כך ש: $|H_h - H| = O(h)$,

$$\left(\text{בשטורמר-Verlet יהיה } |H_h - H| = O(h^2) \right)$$

השיטה הנומרית עבור $\dot{z} = J\nabla H_h(z)$ תהיה
מדויקת (ללא שגיאה) והמד"ר הזו נקראת modified eqn.

הדרך/הגישה נקראת Back error analysis.

משוואות דיפרנציאליות חלקיות

שיטת הפרשים סופיים

נתחיל במימד 1 (ז"א מד"ר עם תנאי שפה) בתחום אין סופי.

$h \equiv \Delta x$

רשת $\left\{x_k = \Delta x \cdot k\right\}_{k=-\infty}^{\infty}$

$z = (\dots, z_{-1}, z_0, z_1, \dots)$ $\quad z \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}}$ מזהים עם פונ' מ $\mathbb{Z}$ ל $\mathbb{R}$ (דיסקרטיזציה)

אופרטורים מעל $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}}$:

• הזזה שמאלה $\mathcal{E}$ (Shift)

$$\mathcal{E} : \mathbb{R}^{\mathbb{Z}} \to \mathbb{R}^{\mathbb{Z}}$$

$$(\mathcal{E} z)_k = z_{k+1}$$

* זהות $Iz=z$

* הפרש קדמי $\Delta_+ = \mathcal{E} - I$

$$(\Delta_+ z)_k = z_{k+1} - z_k$$

* הפרש אחורי $\Delta_- = I - \mathcal{E}^{-1}$

$$(\Delta_- z)_k = z_k - z_{k-1}$$

* הפרש מרכזי $(\Delta_0 z)_k = z_{k+\frac{1}{2}} - z_{k-\frac{1}{2}}$

* ממוצע $(\Upsilon z)_k = \frac{1}{2}\left(z_{k+\frac{1}{2}} + z_{k-\frac{1}{2}}\right)$

$$(\Delta_0^2 z)_k = \Delta_0 (\underbrace{\Delta_0 z}_{y})_k = y_{k+\frac{1}{2}} - y_{k-\frac{1}{2}}$$

$$\begin{cases} y_{k+\frac{1}{2}} = \Delta_0 z_{k+\frac{1}{2}} = y_{k+1} - y_k \\ y_{k-\frac{1}{2}} = \Delta_0 z_{k-\frac{1}{2}} = y_k - y_{k-1} \end{cases}$$

ולכן ניתן לכתוב: (אין בעיה עם ה-$\frac{1}{2}$)

$\Downarrow$

$$(\Delta_0^2 z)_k = y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}$$

נתונה הפונק' $z(x)\in C^1$. נפעיל אותה על השריג $\{kh\}_{k=-\infty}^{\infty}$

$$z_k = z(x_k)$$

*נשים לב $\Delta_+, \Delta_-, \Delta_0$ (אפילו $O(h^2)$) רק $O(h)$ סדר למשל

$$(\Delta_+ z)_k = z_{k+1} - z_k = z(x_k+h) - z(x_k) =$$
$$= h z'(*) = O(h)$$

באופן פורמלי, נפתח אותו בטור

9.12.14 (5)

הגדרה: תהי $g(x)$ פונק' אנליטית סביב $x=0$.

$$g(x)=\sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j$$

יהי T אופרטור

$$T:\mathbb{R}^z\to\mathbb{R}^z$$

נגדיר פורמלית:

$$g(T)=\sum_{j=0}^{\infty} a_j T^j$$

דוגמא: ניתן להגדיר כעת $\mathcal{E}^{\frac{1}{2}}$ (הצגה בחצי שריג)

נשתמש בטור טיילור של $\sqrt{1+x}$

$$\sqrt{1+x}=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j(2j)!}{(1-2j)(j!)^2 4^j}x^j$$

$$\mathcal{E}=I+X \qquad X=\mathcal{E}-I=O(h)$$

לכן

$$\boxed{\mathcal{E}^{\frac{1}{2}}=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-1)^j(2j)!}{(1-2j)(j!)^2 4^j}(\mathcal{E}-I)^j}$$

כעת נוכל לכתוב:

$$\Delta_0=\mathcal{E}^{1/2}-\mathcal{E}^{-1/2}$$

$$Y=\frac{1}{2}\mathcal{E}^{1/2}+\frac{1}{2}\mathcal{E}^{-1/2}$$

$$\mathcal{E}z(x)=z(x+h)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}\underbrace{z^{(j)}(x)}_{D^j z}h^j$$

$$=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}(hD)^j z=e^{hD}z$$

$$\Rightarrow \quad \ln \mathcal{E} = hD$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{D = \frac{1}{h}\ln \mathcal{E}}$$

$$\mathcal{E} = I + \Delta_+$$ לכן

$$\Rightarrow D = \frac{1}{h}\ln(I+\Delta_+) = \frac{1}{h}\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^{j+1}\frac{\Delta_+^j}{j} = \frac{1}{h}\left(\Delta_+ - \frac{1}{2}\Delta_+^2 + \frac{1}{3}\Delta_+^3 + \dots\right)$$

קירוב מסדר h:

$$D = \frac{1}{h}\Delta_+$$

קירוב מסדר h^2:

$$D = \frac{1}{h}\left(\Delta_+ - \frac{1}{2}\Delta_+^2\right)$$

ניתן לקבל בנוסף:

$$D^s = \frac{1}{h^s}\left[\Delta_+^s - \frac{1}{2}s\Delta_+^{s+1} - \frac{1}{24}s(3s+5)\Delta_+^{s+2}\right] + O(h^3)$$

תרגיל: $$\mathcal{E} = \left(\frac{1}{2}\Delta_0^2 + \sqrt{I + \frac{1}{4}\Delta_0^2}\right)^2$$

(מגיע מפתרון משוואה ריבועית שנקבל עבור $\Delta_0 = \mathcal{E}^{1/2} - \mathcal{E}^{-\frac{1}{2}}$)

$$D^{2r} = \frac{1}{h^{2r}}\left[(\Delta_0^2)^r - \frac{1}{12}(\Delta_0^2)^{r+1} + \frac{1}{45}(\Delta_0^2)^{r+2}\right] + O(h^6)$$

$$D^{2r+1} = \frac{1}{h^{2r+1}}(Y\Delta_0)\left[(\Delta_0^2)^r - \frac{1}{12}(r+2)(\Delta_0^2)^{r+1} + \frac{1}{1440}(r+3)(5r+16)(\Delta_0^2)^{r+2}\right] + O(h^5)$$