שיטות נומריות מתקדמות - הרצאה 6

המשך מד"ר

N body problem

מכניקה קלאסית - יחסי כוחות בין כוכבים.
מודרנית - מכניקת מולקולות, אטומים, חלקיקים וכו'.

ישנם N חלקיקים ב $\mathbb{R}^3$

בעלי מסות $m_1,\dots,m_N$

מיקום $q=(q_1,\dots,q_N)\in\mathbb{R}^{3N}$ $\qquad q_i, v_i\in\mathbb{R}^3$

מהירות $v=(v_1,\dots,v_N)\in\mathbb{R}^{3N}$

פוטנציאל $V(q):\mathbb{R}^{3N}\to\mathbb{R}$ מתאר את האנרגיה באינטראקציה בין החלקיקים.

משוואות התנועה של ניוטון:

$$\begin{cases}\dot{q}_i = v_i\\ m_i\dot{v}_i = F_i\end{cases} \qquad ; \quad F=-\nabla_q V(q)$$

דוגמא: אוסילטור הרמוני (במימד 1)

$$V=\frac{1}{2}q_1^2 \qquad m=1$$

$$\begin{cases}\dot{q}_1 = v_1\\ \dot{v}_1 = -q_1\end{cases}$$

תנאי התחלה:

$$\begin{cases}q(0)=q^0\\ v(0)=v^0\end{cases}$$

טענה: תחת משוואות ניוטון נשמרת האנרגיה הכללית

$$E(q,v)=\frac{1}{2}\sum_i m_i|v_i|^2+V(q)$$

הוכחה:

$$\frac{d}{dt}E(q(t),v(t)) = \sum_i \underbrace{\nabla_{q_i} V(q)}_{-F_i}\cdot \underbrace{\dot q_i}_{v_i} + \frac{1}{2}\sum_i m_i 2v_i \underbrace{\dot v_i}_{\frac{F_i}{m_i}}$$

$$= 0 \quad \blacksquare$$

נכליל:

נגדיר מטריצה אלכסונית

$$M = \mathrm{diag}(m_1,m_1,m_1,\ m_2,m_2,m_2,\ \dots,\ m_N,m_N,m_N) \in M_{3N}$$

נגדיר את התנע $p = Mv$

נגדיר את ההמילטוניאן:

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

משוואות התנועה של המילטון:

$$\begin{cases} \dot q = \nabla_p H(q,p) & \boxed{= M^{-1}p = v} \\ \dot p = -\nabla_q H(q,p) & \boxed{= -\nabla_q V(q)} \end{cases}$$

בדיוק כמו במשוואות ניוטון

תכונה: סימטריות בזמן

המשוואות סימטריות תחת החלפה:

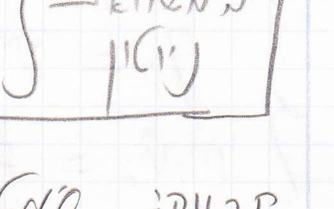
$$\begin{cases} t \longmapsto -t \\ p \longmapsto -p \end{cases}$$

שכן:

$$\dot q = \nabla_p H(q,p)$$
$$\Big\downarrow t \mapsto -t$$
$$-\dot q = \nabla_p H(q,p)$$
$$\Big\downarrow p \mapsto -p$$
$$-\dot q = -\nabla_p H(q,p)$$
$$\Downarrow$$
$$\dot q = \nabla_p H(q,p)$$

כנ"ל לגבי המשוואה השניה

הסבר פיזיקלי:



$(q(t),p(t))$ אז נשנה $p \to -p$ ונחזור בזמן אל נקודת ההתחלה.

לכן זה נקרא סימטריות בזמן

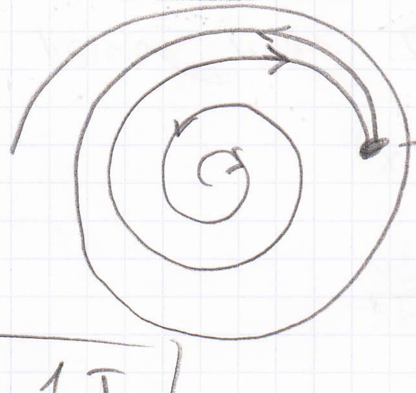
2.12.14 2

דוגמא: (F.E) → Forward Euler

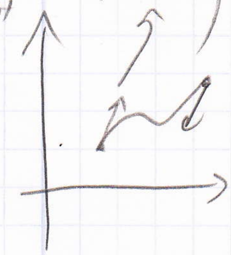
$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - h y_n \\ y_{n+1} = y_n + h x_n \end{cases}$$

$$\boxed{I_{n+1} = (1+h^2) I_n}$$

ענין גדל



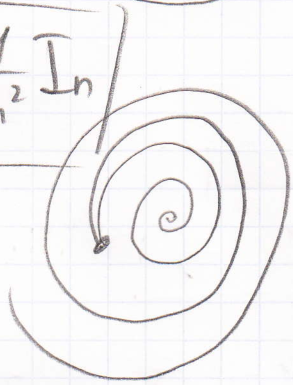
(מתקדמים בכיוון משיק ומחזירים בכיוון משיק אחר לנק' הבסיס.)



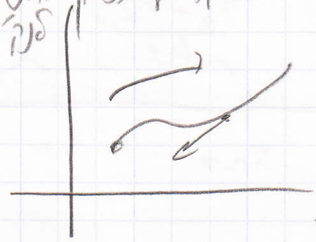
כאן נעצור ונחזור בזמן

ענין קטן

B.E: $\boxed{I_{n+1} = \frac{1}{1+h^2} I_n}$



מתקדמים בכיוון המשיק לנק' הבסיס



Semi implicit Euler
↑
S.E :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - h y_n \\ y_{n+1} = y_n + h x_{n+1} \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}$$

כאן ניתן לחזור לנקודה הקודמת. בהינתן (x_{n+1}, y_{n+1}) ניתן לחשב את y_n ואז את x_n

---

F.E למשוואת המילטון

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

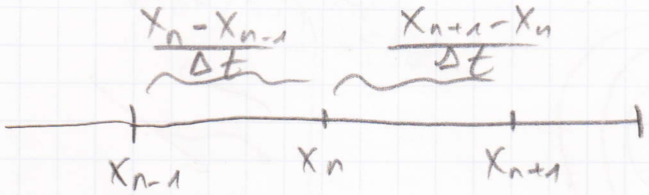
$$S.E: \begin{cases} q_{n+1} = q_n + hM^{-1}p_n \\ p_{n+1} = p_n + hF(q_{n+1}) \end{cases}$$

שיטת Stormer-Verlet

שיטה מפורשת מספר 2.

$$m\ddot{x} = F(x)$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d}{dt}\cdot\frac{dx}{dt}$$



$$\ddot{x} = \frac{\frac{x_{n+1}-x_n}{\Delta t} - \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t}}{\Delta t} = \frac{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}{\Delta t^2}$$

$$\frac{m}{\Delta t^2}\left(x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}\right) = F(x_n)$$

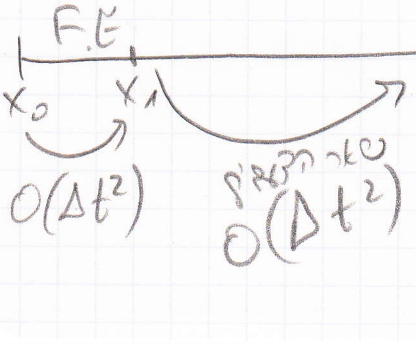
$$x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1} = \frac{\Delta t^2}{m}F(x_n)$$

2 step method

שיטה סימטרית בזמן

בגלל ש x_{n-1} ו x_n מגדירים את x_{n+1} וניתן לחזור מ x_{n+1} ו x_n בדיוק לגבי x_{n-1}.

צעד ראשון עושים ב FE שיטה מספר (עם Δt^2
כדי לקבל 2 צעד׳.



$=$ סה״כ שגיאה מסדר $O(\Delta t^2)$

2.12.14 3 **Velocity Verlet** (שיטת כתיבה אחרת)

(דינמיקה של מולקולות)

$$\begin{cases} x_{n+1} = v_n \Delta t + \dfrac{\Delta t^2}{2m} F(x_n) \\ v_{n+1} = v_n + \dfrac{\Delta t}{2m}\left(F(x_n) + F(x_{n+1})\right) \end{cases}$$

היתרון הוא שהשיטה is היא 1 step method

חוקי שימור

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

נקרא מרחב הפאזה.

נגדיר

$$J = \begin{pmatrix} 0_{3N} & I_{3N} \\ -I_{3N} & 0_{3N} \end{pmatrix} \in M_{6N}$$

דוגמא: $N=1$.

$$J = \begin{pmatrix} 0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&1 \\ -1&0&0&0&0&0 \\ 0&-1&0&0&0&0 \\ 0&0&-1&0&0&0 \end{pmatrix}$$

J נקרא structure factor

מ. המילטון נכתבות בצורה הבאה

$$\begin{cases} \dot{q} = \nabla_p H \\ \dot{p} = -\nabla_q H \end{cases} \Longrightarrow \boxed{\dot{z} = J \nabla_z H}$$

תנאי התחלה $z^0 = \begin{pmatrix} q^0 \\ p^0 \end{pmatrix}$

נסמן את הפתרון עם תנאי ההתחלה z^0:

$$\boxed{z(t; z^0)}$$

הגדרה: פונקציונל $G:\mathbb{R}^{6N}\longrightarrow\mathbb{R}$

נקרא <u>אינטגרל ראשון</u> (או גודל נשמר או חוק שימור)

אם $G(z(t;z^0))$ קבוע ב-t.

כלומר,

$$\forall t\ ,\quad G(z(t;z^0))=G(z^0)$$

<u>תנאי מספיק והכרחי לכך ש G אינטגרל ראשון:</u>

$$0=\frac{d}{dt}G(z(t;z^0))=\nabla_z G\cdot\dot{z}=$$

$$=\nabla_z G\cdot J\nabla_z H=\begin{pmatrix}\nabla_q G\\ \nabla_p G\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & I\\ -I & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nabla_q H\\ \nabla_p H\end{pmatrix}=$$

$$=\nabla_q G\cdot\nabla_p H-\nabla_p G\cdot\nabla_q H=$$

$$=\sum_k\frac{\partial G}{\partial q_k}\frac{\partial H}{\partial p_k}-\sum_k\frac{\partial G}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial H}{\partial q_k}=\{G,H\}$$

נקראים סוגרי פואסון / Poisson brackets

<u>מסקנה:</u> G הוא אינטגרל ראשון אם ורק אם $\{G,H\}=0$

<u>דוגמא:</u> $G=H$, $\{H,H\}=0$ שכן סוגרי פואסון הם אנטי-סימטריים.

נקרא חוק שימור האנרגיה.

<u>דוגמא:</u> $V=0$, $G=P$

$$\sum_k\underbrace{\frac{\partial p}{\partial q}}_{=0}\cdot\frac{\partial H}{\partial p}-\sum_k\underbrace{\frac{\partial p}{\partial p}}_{=1}\cdot\underbrace{\frac{\partial H}{\partial q}}_{=0}=0$$

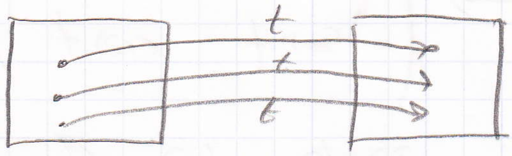
נקרא חוק שימור התנע.

2.12.14 (4)

flow map   הגדרה: העתקת זרימה

$$\phi_t : \mathbb{R}^{6N} \to \mathbb{R}^{6N}$$

$$z_0 \longmapsto z(t;z_0)$$



תכונות:

$$\begin{cases} \phi_0 = id \\ \phi_{t+s} = \phi_t \circ \phi_s = \phi_s \circ \phi_t \end{cases}$$

המשפחה נקראת אגודה ביחד עם תכונות אלו.
semi-group

תרגיל: רשמו את ϕ_t עבור אוסילטור הרמוני במימד 1.

פתרון:

$$\phi_t : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2 \qquad \overset{\text{מסה}}{m=1} \qquad \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$$

$$\begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -q \end{cases} \qquad z^0 = \begin{pmatrix} q^0 \\ p^0 \end{pmatrix}$$

נסמן

$$\begin{cases} w^0 = q^0 + ip^0 \\ w = q + ip \end{cases}$$

$$\dot{w} = \dot{q} + i\dot{p} = p - iq = -iw$$

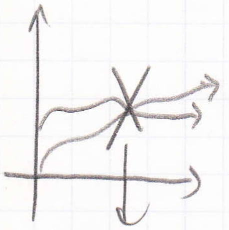
$$w(t;w^0) = e^{-it} w^0 = e^{-it}(q^0 + ip^0) =$$

$$= [\cos(t) - i\sin t](q^0 + ip^0) =$$

$$= (q^0\cos t + p^0 \sin t) + i(p^0 \cos t - q^0 \sin t)$$

$$z(t;z^0) = \begin{pmatrix} q^0\cos t + p^0\sin t \\ p^0\cos t - q^0\sin t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q^0 \\ p^0 \end{pmatrix}$$

$$\phi_t : \begin{pmatrix} q^0 \\ p^0 \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q^0 \\ p^0 \end{pmatrix}$$



כי אז מנ"ה לו לא יהיה יחידות בפתרון.

תכונה: ϕ_t היא העתקה חח"ע.
כלומר מסלולים לא יכולים להיחתך.

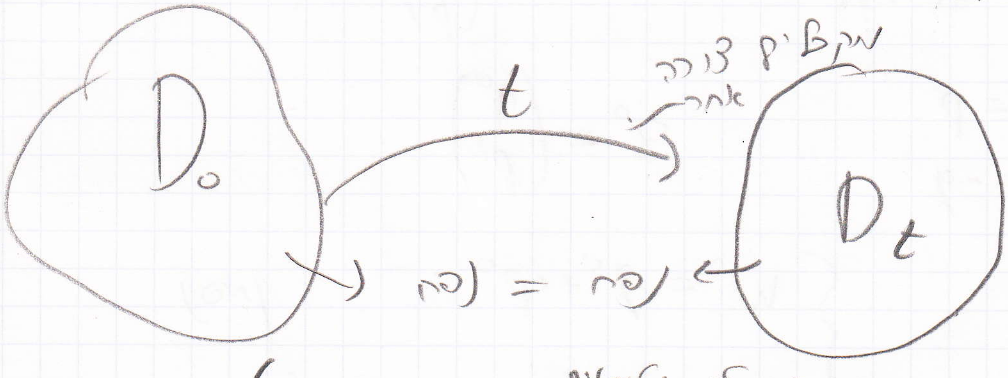
משפט ליוביל: שימור נפח במרחב פאזה.
לכל קבוצה פתוחה וחסומה $D \subset \mathbb{R}^{6M}$
ולכל t מתקיים

$$Vol(D) = Vol(\phi_t D)$$

כאשר

$$Vol(D) = \int_D dv = \int_D dq_1 \cdots dq_M dp_1 \cdots dp_M$$

(נפח לפי מידת לבג)



(הוכחה מהספר של VI Arnold)
מכניקה למתמטיקאים

משפט: (כללי יותר) נתון מד"ר $\dot{x} = f(x)$ המקיים $\forall x \ \nabla \cdot f = 0$
נניח שלכל תנאי התחלה x_0, קיים פתרון ב $[0,T]$
נגדיר $\phi_t = x(t;x_0)$
תהי D_0 קבוצה פתוחה וחסומה. נסמן $D_t = \phi_t D_0$
$V(t) = Vol D_t = \int_{D_t} dv = \int_{D_t} dx_1 \cdots dx_d$ אז $V(t)$ פונ' קבועה.

- משפט ליוביל עבור משוואות המילטון:

$$\dot{z} = J \nabla_z H$$

$$f = J \nabla_z H$$

$$\nabla \cdot f = \nabla \cdot J \nabla_z H = \begin{pmatrix} \nabla_q \\ \nabla_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_q H \\ \nabla_p H \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \nabla_q \\ \nabla_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_p H \\ -\nabla_q H \end{pmatrix} = \nabla_q \nabla_p H - \nabla_p \nabla_q H = 0$$

(מקרה פרטי המקיים את המשפט)

הוכחת המשפט: נראה כי $\dot{V}(s) = \int_{D_s} \nabla \cdot f \, dV$

ואז $\forall s, \dot{V}(s) = 0$ וסיימנו

נסתכל על $\phi_t : D_s \to D_{s+t}$ חח"ע ועל

אפשר לחשוב על ϕ_t כהחלפת משתנים.

$$\int_{D_s} dV = \int_{D_{s+t}} \left| \det \underbrace{\left(\frac{\partial \phi_t^{-1} z}{\partial z} \right)}_{} \right| dV$$

המטריצה נקרא $\Phi_t^{-1} z$

$$\Phi_t = \frac{\partial \phi_t z}{\partial z} = 1 + t \frac{\partial f}{\partial z} + O(t^2)$$

$$\frac{d}{dt} \phi_t z^0 = \frac{d}{dt} z(t; z^0) \Big|_{t=0} = f(z^0)$$

$$\phi_t z = z + t f(z) + o(t^2)$$

$$\Phi_t = \frac{\partial}{\partial z} \phi_t z = 1 + t \frac{\partial f}{\partial z} + o(t^2)$$

לחישוב det נשתמש במשפט מא.לינארית:

לכל מטריצה $A\in M_n$

$$\det(1+A\epsilon)=1+\varepsilon \operatorname{Tr} A+O(\varepsilon^2)$$

$$\int_{D_s} dv=\int_{D_{s+t}} \left|\det \Phi_t^{-1} z\right| dv=\int_{D_{s+t}} \left|1-t\operatorname{Tr}\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)+O(t^2)\right| dv=$$

ניתן להוליך ע.מ

$$=\int_{D_{s+t}} dv-t\int_{D_{s+t}}\operatorname{Tr}\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)dv+O(t^2)$$

$$\frac{\partial f}{\partial z}=\begin{pmatrix}\frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial z_d}\\ \vdots & & \\ \frac{\partial f_d}{\partial z_1} & \cdots & \frac{\partial f_d}{\partial z_d}\end{pmatrix}\Rightarrow \operatorname{Tr}\left(\frac{\partial f}{\partial z}\right)=\nabla\cdot f$$

בסה"כ קיבלנו

$$V(s)=V(s+t)-t\int\nabla\cdot f\,dv+O(t^2)$$

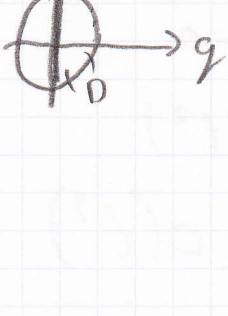
$$\frac{V(s+t)-V(s)}{t}=\int\nabla\cdot f\,dv+o(t)$$

$$\Big\downarrow\ t\to 0$$

$$\dot V(s)=\int\nabla\cdot f\,dv$$

מ.ש.ל

המשמעות היא שלדינמיקה ההמילטונית יש התפלגות סטציונרית



ההתפלגות בפזמה תהיה אחידה