



Geometrisk numerisk integrering av differentialekvationer

Geometric Numerical Integration of Differential Equations

Examensarbete för kandidatexamen i matematik vid Göteborgs universitet

Kandidatarbete inom civilingenjörsutbildningen vid Chalmers

Erik Sahlin

Georg Kyhn

William Karlander

Geometrisk numerisk integrering av differentialekvationer

*Kandidatarbete i matematik inom civilingenjörsprogrammet Kemiteknik med fysik
vid Chalmers*

Erik Sahlin

Examensarbete för kandidatexamen i matematik vid Göteborgs Universitet

Georg Kyhn

*Kandidatarbete i matematik inom civilingenjörsprogrammet Maskinteknik vid
Chalmers*

William Karlander

Handledare: David Cohen
Annika Lang

Institutionen för Matematiska vetenskaper
CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA
GÖTEBORGS UNIVERSITET
Göteborg, Sverige 2022

Förord

Denna kandidatuppsats skrevs av Erik Sahlin och William Karlander vilka studerar vid Chalmers tekniska högskola, samt Georg Kyhn som studerar vid Göteborgs universitet. Våra handledare under projektet var Annika Lang och David Cohen från institutionen för Matematiska vetenskaper. Stort tack till David och Annika som var till mycket god hjälp vid skrivandet av kandidatuppsatsen. När det kommer till vilka avsnitt som kan tillskrivas vilken författare har gruppen fört loggbok.

Erik skrev den populärvetenskapliga presentationen, avsnitt 2.2 om fasrum och det inledande texten i kapitel 3 som introducerar hamiltonsk mekanik. Men framförallt har han skrivit kapitel 4 som handlar om invarianter, kapitel 6 om baklänges felanalys och kapitel 7 om Störmer-Verlet methods energibevarande egenskaper inom molekylodynamik. Till dessa kapitel har Erik även skrivit appendix A.3, A.4, A.5, A.6, A.7 och appendix A.8 med tillhörande delappendix A.8.1 och A.8.2. Koden i appendix A.7 och appendix A.8 är alltså skriven av Erik. Slutligen skrev Erik också den korta texten om rapportens slutsats i avsnitt 8.

William skrev om pendelproblemet under avsnitt 3.1, samt symplektismavsnittet (kapitel 5) bortsett från det numeriska exemplet. Utöver detta har William även skrivit inledningen till rapporten.

Georg skrev sammanfattningen och abstract, samt avsnitten 2.3 om flöde, 2.4 om de avhandlade numeriska metoderna, 3.2 om Keplers problem och appendix A.1 om inledande teorier, appendix A.2 om framtagningen av hamiltonianen för Keplers problem. Georg skrev även koder som användes för framtagning av figurer 1-7 i MATLAB¹ samt exempel 5.1.

Vi var tursamma nog att ha varit i direkt kontakt med Ernst Hairer för tillåtelse om att använda följande bilder: figur 8 och figur 9. Dessa är tagna ur boken Geometric Numerical Integration av Hairer, Lubich och Wanner [1]. Detta var till stor hjälp för att fullföra arbetet och samtidigt säkerställa god kvalitet.

¹Längden av dessa figurgenererande koder gör det olämpligt att lägga in dem i appendix. Koderna skickas däremot vid begäran.

Populärvetenskaplig presentation

Jorden är 4.54 miljarder år gammal och förmodligen är det uppenbart att jorden har hållit sig i samma bana runt solen under den tiden [2]. Jordens avstånd från solen ger vår planet egenskaper som (till vår vetskap) är unika. Fikon, fiskar, fåglar till och med bärfisar. Allt liv bygger på jordens perfekta bana runt solen. Om matematiker och astrofysiker vill simulera vårt solsystem med beräkningar är det dock inte alls uppenbart att jorden hålls kvar i sitt optimala avstånd från solen. Om fel numerisk metod väljs kan jorden flyga ut i universum (se figur 1) eller till och med tvärtom flyga in i solen och förintas. Eller ja på papper och i matematikers datorer i alla fall. För att förhindra att detta sker och säkerställa en så verklighetstrogen modell som möjligt vill matematiker välja *geometrisk numerisk integration* för att simulera solsystemet och många andra naturvetenskapliga fenomen. För att mer precist förstå vad geometrisk numerisk integration handlar om måste vi dock först förstå den typ av problem som geometrisk numerisk integration löser. Nämligen *differentialekvationer*.

Oj. Oj. Oj. Differentialekvationer, ett begrepp som får blodet att stelna i ådrorna hos de som inte förstår sig på dem. Men frukta ej kära läsare! Vi ska guida dig genom denna snåriga skog in i klarhetens ljus. Och differentialekvationer visar sig dessutom vara väldigt användbara då de kan beskriva alla möjliga sorters naturvetenskapliga fenomen. Allt från hur djurpopulationer ökar och minskar till hur atomer rör sig. Vi kan förklara differentialekvationer genom att först dra en likhet till de mer välkända *algebraiska ekvationerna*. En algebraisk ekvation kan exempelvis se ut som

$$5t - 12 = 8.$$

Och vårt uppdrag är att finna vad t är för något. Låt oss därför lösa ekvationen

$$5t - 12 = 8$$

$$5t = 20$$

$$t = 4.$$

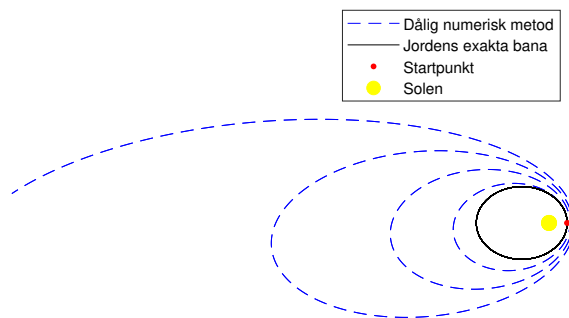
Alltså ger lösningar av algebraiska ekvationer ett *tal*, i det här fallet 4. Skillnaden mellan en differentialekvation och en algebraisk ekvation är att istället för att vi letar efter ett tal vill vi hitta oändligt många tal som ligger oändligt nära varandra allt på en gång. Men att leta efter oändligt många tal som ligger oändligt nära varandra, låter inte det som något som också kommer att ta oändligt lång tid? Talen har dock något gemensamt; de följer ett recept. Vad man egentligen gör är alltså att leta efter ett recept som ger alla tal samtidigt! Det här receptet är vad matematiker kallar för en *funktion* och kan exempelvis se ut som

$$f(t) = t^2 + 4t - 1,$$

där t är vilket tal som helst. Om vi stoppar in $t = 2$ i vår funktion får vi att

$$f(2) = 2^2 + 4 \cdot 2 - 1 = 4 + 8 - 1 = 11.$$

Men stoppar vi istället in $t = 3$ får vi att $f(3) = 20$ och för $t = 4.5$ får vi $f(4.5) = 37.25$. Talen 11, 20 och 37.25 är alla exempel på tal som beskrivs av receptet $f(t)$. Och hittar vi det här receptet när vi löser en differentialekvation kan vi förutspå framtiden men också se bakåt i tiden om t är t som i tid.



Figur 1: Jorden åker ut ur solsystemet om en fel numerisk metod appliceras. I det här fallet applicerades Eulers explicita metod.

Men hur hittar man den här funktionen? Att lösa en algebraisk ekvation verkade relativt lätt (det var bara att lösa ut t så fick vi svaret). Är det lika lätt med differentialekvationer? Nja... Det visar sig att endast i särskilda fall kan funktionen hittas, men oftast är detta svårt eller rent utav omöjligt. Matematiker har ändå lyckats hitta några knep och knåp för att i alla fall ungefärligt hitta en del av talen som tillhör funktionen. Dessa knep och knåp kallas för numeriska metoder och löser visserligen inte differentialekvationer exakt men de resulterar i approximativa lösningar.

De första och enklaste numeriska metoderna är Eulers explicita metod och Eulers implicita metod. Ni kommer att märka att många av de numeriska metoder vi kommer att presentera är namngivna efter den schweiziska matematikern Leonhard Euler (1707-1783), vilket kan vara ytterst förvirrande. Emellertid visade det sig att de här metoderna fungerade mindre bra på den sortens differentialekvationer som kallas för *hamiltonska problem*.

Hamiltonska problem utvecklades på 1800-talet av sir William Rowan Hamilton (1805-1865) och revolutionerade hur partiklars rörelse beskrevs inom naturvetenskapen [1, Kapitel VI.1]. Hamiltonska problem bygger på att en given energifunktion (den så kallade *hamiltonianen* \mathcal{H}) som beskriver den totala energin hos ett system. Denna hamiltonian beror sedan på position och hastighet hos partiklar i systemet. Med hjälp av hamiltonianen kan man sen ställa upp differentialekvationer och om man löser de här differentialekvationerna kan man förstå hur partiklarna rör sig genom tid och rum. Vi har redan stött på ett exempel på ett hamiltonskt problem i form av jordens bana runt solen. Jordens hamiltonian är alltså en energifunktion som beror på jordens avstånd från solen och jordens hastighet runt solen.

När det kommer till energi visar det sig inom naturvetenskapen att energin alltid är bevarad [3]. Det här innebär att energin är konstant över tid och inte förändras, vilket innebär att vår totala energifunktion hamiltonianen \mathcal{H} också måste ha ett och samma värde genom tiden. Om vi betraktar vårt exempel med jorden igen blir detta rätt logiskt eftersom ett visst avstånd från jorden och en viss hastighet korresponderade med en viss energi. Det är nu problematiken med att lösa differentialekvationerna med rätt numeriska metod kommer in i bilden. Dåliga numeriska metoder simulerar att jorden får mer energi än vad den faktiskt har och säger därför att jorden glider ut ur sin omloppsbana ut i kosmos (se figur 1). Och andra lika dåliga metoder simulerar jorden så att den tvärt får mindre energi och åker in i solen och förintades av den.

Men vilka metoder lämpar sig då för att hålla energin konstant eller i alla fall nästan konstant? Svaret ges av geometrisk numerisk integration. För geometriska integratorer är en underklass av numeriska metoder som visar sig vara mycket fördelaktiga när man löser hamiltonska problem. Och tro det eller ej, en av dessa utomordentliga metoder är namngiven efter självaste Euler, närmare bestämt Eulers symplektiska metod. Men en annan metod är Störmer-Verlets metod (Euler må ha varit supersmart men äntligen bryter vi trenden av att alla numeriska metoder ska vara döpta efter honom). Anledningen till varför dessa två metoder fungerar så väl är eftersom de har en väldigt viktig egenskap, de är båda *symplektiska numeriska metoder*.

Ordet symplektisk kommer från grekiskan och betyder komplext. Och precis som ordet antyder är det inte helt lätt att förklara konceptet utan att först gå igenom tre års eftergymnasiala studier i matematik. Men mer intressant än vad symplektism egentligen är för något är dess konsekvenser. Att en numerisk metod är symplektisk innebär inte att energin är bevarad när vi approximativt löser ett hamiltonskt problem. Däremot kan man visa att energifelet som symplektiska metoder ger upphov till är så pass litet att det inte riktigt spelar någon roll. Alltså kan man simulera jordens bana runt solen, eller till och med hela solsystemet, utan problem en lång tid framåt.

Slutligen kan det dock nämnas att planeters omloppsbana är långt ifrån det enda appliceringsområde som är relevant för geometrisk numerisk integration. Alla hamiltonska problem kan lösas utmärkt med geometrisk numerisk integration. Det inkluderar allt som på något sätt har med energi att göra. Förutom planeters banor kan man även applicera geometrisk numerisk integration på molekylodynamik för att beskriva kemiska föreningars rörelse och interaktion med varandra. Det kan användas för att beskriva rörelsemängdsmoment. Det kan till och med användas för att appliceras inom kvantmekanik där det visar sig att hamiltonianen spelar en extra viktig roll. Men listan slutar egentligen inte på hamiltonska problem. Även andra differentialekvationer kan lösas med geometrisk numerisk integration. Alltså möjliggör geometrisk numerisk integration att vetenskapsmän kan lösa massor av olika komplicerade problem ungefärligt. Problem vars lösningar är essentiella för att förstå universums alla små nischade klurigheter och bidrar till människans eviga törst efter mer kunskap!

Sammanfattning

Rapporten studerar främst Eulers symplektiska och Störmer-Verlets metoder applicerade på hamiltonska problem. Metoderna appliceras numeriskt på tre olika hamiltonska problem och jämförs med andra numeriska metoder i form av Eulers explicita metod och Eulers implicita metod. Det första hamiltonska problemet som studeras är en ideal pendel. Det andra är ett hamiltonskt system bestående av två himlakroppar. Och det tredje är ett molekylodynamikproblem bestående av två atomer. I exemplen uppvisas egenskaper som sedan definieras och bevisas konkret för generella fall. Av dessa egenskaper ingår definiering av invarianter och symplektiska avbildningar. Bevis av metodernas bevarande av invarianter och bevis av att vissa stegmetoder är symplektiska genomförs. Det visas även vilka problem som har symplektiska lösningar

Keplers problem är ett av exemplen som granskas, där modelleras två himlakroppar med den ena som kretsar runt den andra. De fyra stegmetoderna (Eulers explicita, implicita och symplektiska metoder samt Störmer-Verlets metod) appliceras och avvikelser från den exakta lösningen jämförs, specifikt visas omloppsbanan, avvikelse av energi, vinkelmoment och position skapat av de numeriska metoderna.

Rapporten visar att alla hamiltonska system har en symplektisk avbildning. Ytterligare visar rapporten att Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod är symplektiska. Det visas även att symplektiska numeriska metoder är nästan energibevarande på hamiltonska problem. Detta görs genom att utföra simuleringar som numeriskt visar att Eulers symplektiska och Störmer-Verlets metoder bevarar energin inom ett begränsat intervall över exponentiellt lång tid. Baklänges felanalys introduceras sedan som område för att förklara varför symplektiska numeriska metoder har denna egenskap.

Abstract

The report analyses the symplectic Euler method and the Störmer-Verlet method applied to Hamiltonian systems. The methods are numerically applied to three different hamiltonian systems and are compared to other numeric methods such as the explicit Euler method and the implicit Euler method. The first Hamiltonian system that is studied is the ideal pendulum. The second is a Hamiltonian system consisting of two celestial bodies. The third Hamiltonian system is a molecular dynamics problem consisting of two atoms. Examples are given to show important properties of Hamiltonian systems that later are defined and proved for general cases. These important properties includes invariants and symplectic maps. Proofs of the symplectic numerical methods conservation of first integrals and proofs of which methods are symplectic are performed. Which problems that have symplectic solutions are also shown.

Kepler's problem is one of the examples brought to light. Here two celestial bodies are modeled with one orbiting the other. The four numerical methods (the explicit, implicit and symplectic Euler method, and the Störmer-Verlet method) are applied and deviations from the exact solution are examined. Specifically the orbit, the deviation of energy in the system, angular momentum and position created by the numerical methods.

The report shows that all Hamiltonian problems have a symplectic map as well as showing that the symplectic Euler method and Störmer-Verlet method are symplectic. The report also shows that symplectic numerical methods conserve energy approximately when applied to Hamiltonian problems. This is shown by carrying out simulations which show numerically that the symplectic Euler method and Störmer-Verlet method conserve energy within a small interval over exponential time. Backward error analysis is then introduced to explain this property of symplectic numerical methods in general.

Innehåll

1 Inledning	1
2 Inledande teori	1
2.1 Ordinära differentialekvationer	1
2.2 Fasrum	1
2.3 Flöde	2
2.4 Numeriska metoder	2
2.4.1 Eulers explicita metod	2
2.4.2 Eulers implicita metod	2
2.4.3 Eulers symplektiska metod	3
2.4.4 Störmer-Verlets metod	3
3 Introduktion till hamiltonska problem	3
3.1 Pendelproblemet	4
3.2 Keplers problem	6
4 Invarianter	8
4.1 Linjära invarianter	8
4.2 Kvadratiska invarianter	10
4.3 Polynomianter	11
5 Symplektism	11
6 Baklänges avvikelseanalys och långtidsbeteende hos symplektiska numeriska metoder	16
7 Störmer-Verlet metods energibevarande egenskaper inom molekylodynamik	17
8 Slutsats	20
Referenser	21
Appendix A Bilagor och Beräkningar	22
A.1 Inledande teorier	22
A.1.1 Eulers explicita metod	22
A.1.2 Eulers implicita metod	22
A.1.3 Eulers symplektiska metod	22
A.1.4 Störmer-Verlets metod	23
A.2 Framtagninga av hamiltonianen för Keplers problem	23
A.3 Störmer-Verlet metods bevarande av linjära invarianter	24
A.4 Störmer-Verlet metods misslyckande att generellt bevara kvadratiska invarianter	24
A.5 Bevis av sats 4.1	25
A.6 Bevis av sats 6.1	26
A.7 MATLAB-kod för Lennard-Jonespotentialen för argon	28
A.8 Jämförelse mellan Eulers explicita metod och Störmer-Verlets metod applicerad på ett endimensionellt MD-problem	28
A.8.1 MATLAB-kod för Störmer-Verlets metod applicerad på endimensionellt MD-problem	28
A.8.2 MATLAB-kod för Eulers explicita metod applicerad på endimensionellt MD-problem	29

1 Inledning

En ordinär differentialekvation (ODE) kan beskriva situationer där tillstånd förändras. ODE:er är därför viktiga för många tekniska och vetenskapliga områden. Bortsett från några specialfall, som till exempel separabla differentialekvationer eller linjära homogena differentialekvationer, är analytiska lösningar mer ovanliga. Därför krävs det ofta att numeriska metoder måste appliceras [4, Kapitel 1]. Det finns en rad numeriska metoder för att lösa ODE:er, men de saknar bevarandet av egenskaper. Det är därför geometriska numeriska integrationsmetoder som är aktuella. Dessa integrationsmetoder kan bevara viktiga systemegenskaper.

Syftet med detta kandidatarbete är att introducera begrepp inom geometriska numeriska integration så som hamiltonska system, invarianter och symplektism. Dessutom ska arbetet introducera fyra numeriska metoder för att lösa ODE:er och visa på olika egenskaper hos metoderna. Metoderna som kommer att studeras är mer specifikt Eulers explicita metod, Eulers implicita metod, Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod. Mycket av arbetet kommer att vara kring hamiltonska system och deras egenskaper. Därefter ska de fyra numeriska metoderna appliceras på dessa hamiltonska system. Slutligen diskuteras mer i djup Eulers symplektiska metod samt Störmer-Verlets metod då dessa är symplektiska metoder. Att de är symplektiska ger metoderna specifika egenskaper. Kandidatarbetet är en litteraturstudie där huvudreferensen är *Geometric Numerical Integration* skriven av Ernst Hairer, Christian Lubich och Gerhard Wanner [1].

Rapporten och innehållet är främst skrivet till studenter på ingenjörsutbildningar och matematikstudenter vilka båda har förkunskaper inom någon form av numerisk analys och linjär algebra. Arbetet är skrivet på ett sådant sätt att man inte ska behöva kunna programmera, men om figurer och beräkningar vill replikeras är det en fördel att ha kunskaper inom MATLAB. Rapporten börjar med att i kapitel 2 beskriva grundläggande koncept kopplade till ODE:er. I kapitel 3 introduceras hamiltonska problem så som pendelproblemet och Keplers problem. Kapitel 4 introducerar invarianter och de olika formerna av invarianter som linjära och kvadratiska invarianter. I kapitel 5 introduceras en ytterligare viktig egenskap hos hamiltonska system, symplektism, samt ett numeriskt exempel. Därefter introduceras ämnet baklänges felanalys i kapitel 6, men även idéer som motiverar användandet av symplektiska numeriska lösningsmetoder. Slutligen tillämpas Störmer-Verlets metod på molekylodynamik i kapitel 7. Till intresserade läsare finns koder till samtliga grafer som vi själva framställt i appendix A.² Dessutom finns mer beräkningar och bevis kring framförallt Eulers metoder samt invarianter.

2 Inledande teori

I det här kapitlet vill vi presentera några grundläggande men ändå essentiella koncept kopplade till ODE:er. Syftet är att påminna läsaren om dessa koncept för att lättare kunna ta till sig texten i sin helhet.

2.1 Ordinära differentialekvationer

En allmän ordinär differentialekvation av första ordningen har utseendet $d\mathbf{y}/dx = \mathbf{f}(x, \mathbf{y})$. Med ordningen menar man den ordning som högsta förekommande derivatan har. \mathbf{f} är en given funktion av två variabler, och $\mathbf{y}(x)$ den sökta funktionen av en variabel x . Vanliga beteckningar är *oberoende* variabel för x och *beroende* variabel för \mathbf{y} [5, Kapitel 8]. Ordinära differentialekvationer är centrala för ämnet geometriska numeriska integration och förekommer i de flesta avsnitt i rapporten, men framförallt nämns de i kapitel 6 om baklänges felanalys.

2.2 Fasrum

Ett *fasrum* är ett rum som relaterar till en partikels tillstånd. Storheter som utgör tillståndet kan exempelvis vara position, momentum och dess tidsderivator i tre dimensioner. Dessa storheter kallar vi generellt för frihetsgrader. Således kan vi med hjälp av dessa storheter också förstå och förutse hur partikeln kommer att röra sig och bete sig i vårt system. I ett fasrum är varje koordinat

²Resterande kod till grafer kan fås vid förfrågan.

och dess tidsderivata en frihetsgrad för partikeln. I allmänhet har därför ett fasrum $2d$ dimensioner, där d är antalet frihetsgrader [6]. Fasrummet kommer användas något under symplektismkapitlet.

2.3 Flöde

Ett grundläggande koncept rörande differentialekvationer är flödet φ över tiden t . Flödet är en avbildning som omvandlar en startpunkt y_0 i fasrummet till en annan $y(t)$ så att $\varphi_t(y_0) = y(t)$ om $y_0 = y(0)$ där $y(t)$ är lösningen till differentialekvationen. Här är φ_t flödet φ som avbildar startvärdet $y(0)$ t tidsenheter fram i tiden [1, Kapitel I.1.1]. Flödet är ett betydande begrepp som används frekvent under framförallt symplektismavsnittet.

2.4 Numeriska metoder

För många differentialekvationer är det svårt att ta reda på den primitiva funktionen. Av detta skäl används numeriska metoder för att approximera denna primitiva funktion över ett givet intervall $[t_0, \tilde{t}]$ där $\tilde{t} > t_0$. Vi kan då göra en likformig fördelning av intervallet $t_0 < t_1 < \dots < t_N = \tilde{t}$ med $N \in \mathbb{N}$ steg och steglängden $h = t_i - t_{i-1}$ för alla $i = 0, 1, \dots, N$ där $Nh + t_0 = \tilde{t}$. På denna tidsuppdelning kan vi definiera en stegmetod som den diskreta avbildningen $\Phi_h : y_i \mapsto y_{i+1}$, där $y_i \approx y(t_i)$ för steglängden h . Antag att vi har ett system på formen

$$\dot{\mathbf{y}} = \frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) \quad (1)$$

där $\mathbf{y} : [t_0, \tilde{t}] \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m \in \mathbb{N}$ och $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$. Givet detta kan vi då definiera följande numeriska metoder.

2.4.1 Eulers explicita metod

Givet ekvationssystemet (1) och startvärdet $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ kan vi definiera Eulers explicita metod

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_i)$$

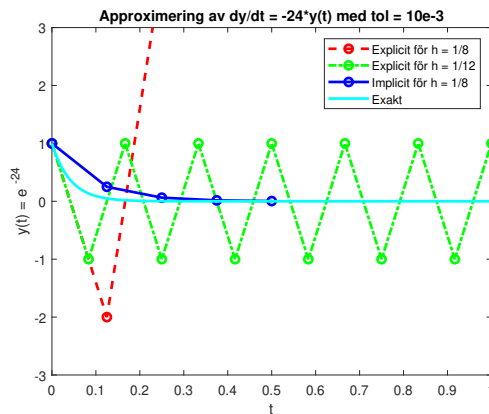
med steglängden h , se appendix A.1.1 för framtagandet av metoden. Här är $\mathbf{y}_i \approx \mathbf{y}(t_0 + ih)$ för alla $i = 0, 1, \dots, N$. Denna metod är enkel att applicera då den explicit definierar nästa steg och ger ett bra resultat för små steglängder h . Men metoden brister för problem där lösningen är numeriskt instabil, det vill säga system där metoden är känslig för storleken av steglängden och kräver tillräckligt litet h så att beräkningskostnaden blir orimligt stor. Exempelvis $\dot{y}(t) = -24y(t)$ där $y(0) = 1$ se figur 2. För dessa problem ägnar sig Eulers implicita metod bättre än explicita metoden då den inte är lika känslig för h 's storlek och då sparar beräkningstid.

2.4.2 Eulers implicita metod

Givet (1) kan Eulers implicita metod definieras enligt

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{i+1})$$

för något litet h , se appendix A.1.2 för explicit framtagning av metoden. Här är \mathbf{y}_{i+1} implicit definierad vilket för varje tidssteg kräver lösning av ett icke-linjärt system av ekvationer för att få ett exakt värde. När en lösning till detta system inte kan hittas analytiskt måste t.ex. en fixpunkt algoritm appliceras vilket kostar beräkningstid. Man kan då, om möjligt, definiera följande metod.



Figur 2: Approximationer av $y(t) = e^{-24t}$. Lösningar för den explicita metod med $h = 1/8$ lämnar snabbt visningsintervallet och lösningar för $h = 1/12$ oscillerar. Lösningar för implicita metoden konvergerar snabbt till $y(t)$ innanför toleransen.

2.4.3 Eulers symplektiska metod

Med ett partitionerat system av differentialekvationer på formen

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{a}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{b}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{cases}$$

där $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{v}(t) \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{a} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\mathbf{b} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $n, m \in \mathbb{N}$ med $\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$ och $\mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0$. Från detta kan både Eulers explicita och implicita metoder implementeras för att få Eulers symplektiska metod

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{i+1} &= \mathbf{u}_i + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_{i+1}) \\ \mathbf{v}_{i+1} &= \mathbf{v}_i + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_{i+1}) \end{aligned} \quad \text{eller} \quad \begin{aligned} \mathbf{u}_{i+1} &= \mathbf{u}_i + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i) \\ \mathbf{v}_{i+1} &= \mathbf{v}_i + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i), \end{aligned} \quad (2)$$

se appendix A.1.3 för framtagandet av metoden. Denna metod utnyttjar att ena variabeln är implicit definierad och explicit definierad. Som namnet antyder är Eulers symplektiska metod ett exempel på en *symplektisk* numerisk metod. Vad som innebär att en numerisk metod är symplektisk kommer vi diskutera mer ingående i kapitel 5. I kapitel 5 diskuteras också begreppet symplektism mer på djupet. Denna metod är inte perfekt då den appliceras på ODE:er. Vi kommer exempelvis synliggöra detta i avsnitt 3.1 som handlar om pendelproblemet där det även visar sig att Störmer-Verlets metod fungerar bättre.

2.4.4 Störmer-Verlets metod

Ett alternativ till Eulers symplektiska metod är Störmer-Verlets metod som kan definieras på en ickehomogen andra ordnings differentialekvation

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{f}(\mathbf{q})$$

där $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^m$ och $\mathbf{f} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m \in \mathbb{N}$ med $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$. Låt $\mathbf{p} = \dot{\mathbf{q}}$, $\Psi_{h/2} : (\mathbf{p}(ih), \mathbf{q}(ih)) \mapsto (\mathbf{p}((i+1/2)h), \mathbf{q}((i+1/2)h))$ och $\Psi_{h/2}^* : (\mathbf{p}((i+1/2)h), \mathbf{q}((i+1/2)h)) \mapsto (\mathbf{p}((i+1)h), \mathbf{q}((i+1)h))$, då kan Störmer-Verlets metod definieras som flödet $\Phi_h = \Psi_{h/2} \circ \Psi_{h/2}^*$ där $\Psi_{h/2}$ och $\Psi_{h/2}^*$ är ett steg av Eulers symplektiska metod (2) med steglängd $h/2$. Störmer-Verlets metod kan formuleras enligt

$$\begin{cases} \mathbf{p}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_i) \\ \mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_{i+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{p}_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{i+1}), \end{cases}$$

se appendix A.1.4. Denna metod är explicit för ett steg $\Phi_h : (\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i) \mapsto (\mathbf{q}_{i+1}, \mathbf{p}_{i+1})$, vilket underlättar beräkningstrycket då exempelvis en fixpunktiteration inte behövs. Denna metod ska visas erhålla vissa egenskaper, exempelvis är också denna numeriska metod symplektisk.

3 Introduktion till hamiltonska problem

Ett alternativ till Newtons formulering av klassisk mekanik (så kallad newtonsk mekanik) är den hamiltonska mekaniken. Denna matematiska beskrivning fokuserar på den så kallade *hamiltonianen* \mathcal{H} , vilken är en given funktion av \mathbf{p} och \mathbf{q} som beskriver ett systems totala energi. Fortsatt är $\mathbf{p} = [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n]^T$ och $\mathbf{q} = [\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n]^T$ så kallade *övervektorer* (från engelskans *supervectors*) bestående av n stycken element i form av vektorerna $\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^m$ där $k \in \{1, \dots, n\}$ är ett heltal [1, Kapitel I.2.4]. Notera att \mathbf{p}_k generellt sett inte behöver ha samma dimension som \mathbf{p}_j eller \mathbf{q}_j där $k \neq j$. Emellertid är det vanligt i fysikaliska appliceringsområden att \mathbf{p}_k och \mathbf{q}_k har samma dimension för alla k .

Oftast är hamiltonianen separabel, vilket innebär att vi kan skriva den som en summa av två separata funktioner

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}).$$

I fysikaliska appliceringsområden är det också vanligt att \mathbf{q} är positionsvektorn, \mathbf{p} är motsvarande rörelsemängd, $T: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$, är systemets kinetiska energi och $V: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$, är systemets potentiella energi.

Ytterligare om $\dot{\mathbf{p}}(t) = \frac{d\mathbf{p}}{dt}(t)$ och $\dot{\mathbf{q}}(t) = \frac{d\mathbf{q}}{dt}(t)$ noterar tidsderivatan kan ett hamiltonskt system beskrivas av differentialekvationerna

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} \end{cases} \quad (3)$$

där $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}, \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}$ är kolonnvektorer med element bestående av derivatorna med avseende på $\mathbf{p}_k, \mathbf{q}_k$. Och med hjälp av dessa differentialekvationer samt motsvarande initialvärden ($\mathbf{p}(0)$ och $\mathbf{q}(0)$) kan lösningar till hamiltonska system erhållas.

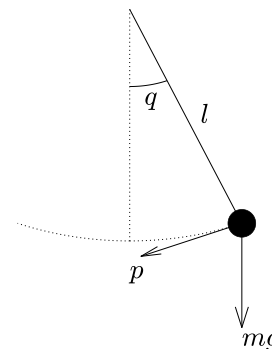
En essentiell egenskap för den hamiltonska mekaniken är att hamiltonianen är konstant över tid. Detta är något som ofta är användbart i fysikaliska tillämpningar då energin alltid är bevarad i ett slutet system enligt energilagen [3]. Att energin hos hamiltonianen är konstant över tid visas genom att derivera hamiltonianen med avseende på tid

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}\right)^T \dot{\mathbf{p}} + \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\right)^T \dot{\mathbf{q}} = \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}\right)^T \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\right) + \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}\right)^T \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}\right) = 0.$$

Den första likheten kommer från kedjeregeln och den andra likheten kommer från ekvation (3). Fortsatt kommer vi att se i kapitel 4 att detta är ett exempel på en så kallad *invariant*. I kapitel 4 kommer vi fördjupa oss i olika sorters invarianter och deras definitioner.

Följaktligen är en annan användbar egenskap hos den hamiltonska mekaniken dess *symplektism*. En avbildning sägs vara symplektisk om ett områdes area bevaras av avbildningen [4, Kapitel 15.1]. Emellertid är konceptet symplektism viktigt nog att ett eget kapitel (kapitel 5) har givits åt denna egenskap.

Vi har nu introducerat hamiltonianen som energifunktion och fått grundläggande förståelse för egenskaper så som invarianter och symplektism. Vi vill nu visa i avsnitt 3.1 och avsnitt 3.2 att det inte är självklart att dessa egenskaper bevaras när vi applicerar en numerisk metod. Alltså blir det intressant att undersöka vilka numeriska metoder som bevarar dessa egenskaper och förstå varför dessa egenskaper bevaras.



Figur 3: Enkel hängande pendel i rörelse.

3.1 Pendelproblemet

Efter att ha introducerat hamiltonianen och byggt en grundläggande förståelse för hamiltonska system presenterar vi nu ett exempel, pendelproblemet. Pendeln i detta fall är en enkel ideal pendel, där massa m , längd l från angreppspunkt till tyngdpunkt och gravitationen g alla förenklas till 1, det vill säga $m = l = g = 1$. Pendeln syns i figur 3. Dessutom har pendeln inga energiförluster eller extern påverkan. I system av denna karaktär beskrivs den totala energin av hamiltonianen \mathcal{H} . Hamiltonianen i pendelproblemet är en funktion beroende av p och q , som båda är tidsberoende variabler där $p(t)$ och $q(t)$ tillhör \mathbb{R} . I pendelproblemet är fortsatt q vinkeln på pendeln, medan p är vinkelhastigheten, alltså derivatan av q :

$$p(t) = \dot{q}(t).$$

Med de två variablerna kan det hamiltonska systemet beskrivas på formen

$$\dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

där hamiltonianen \mathcal{H} är det totala systemets energi givet av

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

Pendelproblemet definieras av

$$\dot{p} = -\sin(q), \quad \dot{q} = p. \quad (4)$$

I bilderna som syns i figur 5 visas fasporträtt för pendelsystemet. I en harmonisk pendel som beskrivs på formerna ovan kommer energin att bevaras för exakta lösningar. Det som syns i Eulers explicita och implicita metod är att förr eller senare avviker linjerna, vilket betyder att metoden för beräkningen visar att energin skulle öka eller minska i något läge för pendeln.

Eulers explicita metod med startvärde $p_0 = 0$ och $q_0 = \frac{1}{2}$ följer den verkliga lösningen något för att sedan avvika utåt, vilket betyder att approximationen inte är korrekt och skulle visa att energin ökar för den numeriska lösningen (se figur 4).

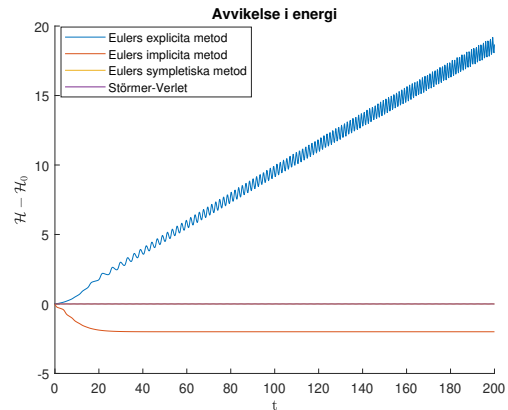
För Eulers implicita metod kommer lösningen konvergera mot noll, vilket skulle betyda att pendeln stannar, vilket en harmonisk pendel inte bör göra utan externa krafter. Detta medför också att Eulers implicita metod på något vis tappar energi, vilket inte stämmer med beteendet för den exakta lösningen.

Även Eulers symplektiska metoden avviker från exakt lösning, vilket syns av att linjen avviker från $\mathcal{H} - \mathcal{H}_0 = 0$. Energiskillnaderna för systemet varierar mer, även om det annars är periodiskt. Eulers symplektiska metod säger oss alltså att pendelns rörelser skulle vara kraftigare än vad dem egentligen är.

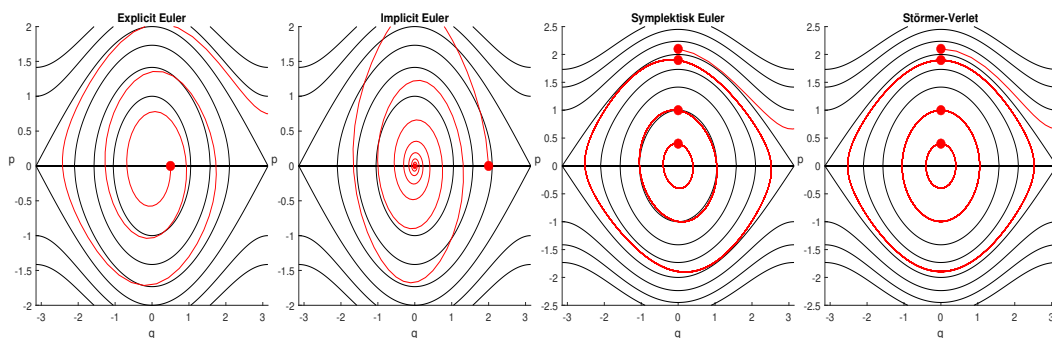
För Störmer-Verlets metod överlappar lösningen med den exakta lösningen, med visst fel. Inom vissa användningsområden och för vissa metoder är det så pass litet att man kan anse det försumbart och därmed inte behöver ta hänsyn till det.

I figur 5 ser vi energiavvikelsen för metoderna som appliceras på pendelproblemet. De symplektiska metoderna är mycket närmre korrekt lösning än Eulers explicita respektive implicita metod.

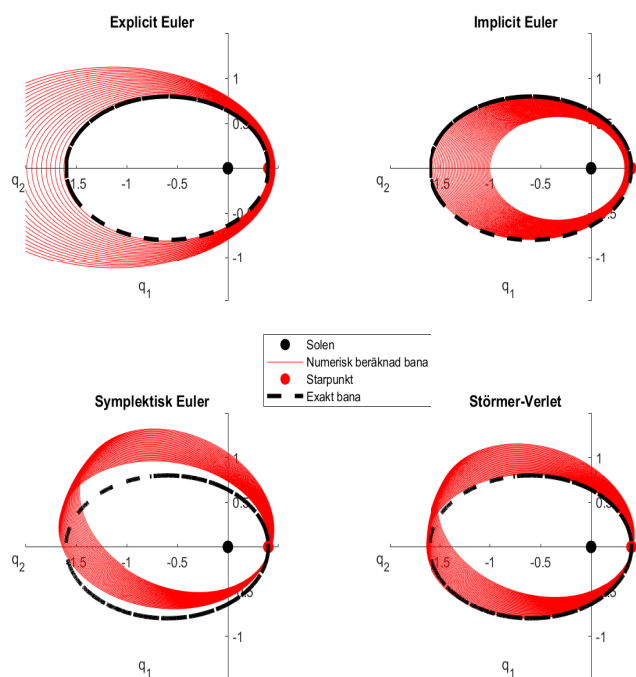
Tanken med pendelproblemet är att ytterligare förtydliga varför geometriska numeriska integrationsmetoder ger bättre uppskattningar än andra icke systemegenskapsbevarande metoder. Fortsatt illustrerade vi detta genom jämförelse mellan Eulers explicita, implicita och symplektiska metoder samt Störmer-Verlets metod. Härnäst ska vi introducera ett till exempel där egenskapsbevarande är viktigt.



Figur 4: Energiavvikelsen av Eulers explicita, implicita och symplektiska metoder samt Störmer-Verlets metod applicerade på pendelproblemet. Här överlappar Störmer-Verlets och Eulers symplektiska metod. Här användes $h = 0.2$.



Figur 5: Fasporträtt av lösningar till pendelproblemet (4). Steglängd $h = \frac{1}{5}$. Startvärden för Eulers explicita metod $(q_0, p_0) = (\frac{1}{2}, 0)$, Eulers implicita metod $(q_0, p_0) = (0, 2)$, Eulers symplektiska metod samt Störmer-Verlets metod med $q_0 = 0$ och $p_0 \in \{0.4, 1, 1.9, 2.1\}$.



Figur 6: En enskild planets omloppsbana runt en större himlakropp (solen) enligt Keplers ekvation. Här har Eulers explicita metod använts med $h = 0.0005$, Eulers implicita metod med $h = 0.0002$ och Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod med $h = 0.05$.

3.2 Keplers problem

Inom newtonsk fysik behöver differentialekvationer lösas för att kunna säga hur himlakroppar rör sig i solsystem. Det är då viktigt att egenskaperna hos systemet erhålls vid användning av geometrisk numerisk integrering. Exempelvis blir avvikelser i vinkelmoment tidsberoende för Eulers diskreta stegmetod. Kepler var först med att notera att himlakroppar rör sig i elliptiska banor runt solen (1609). Emellertid var Newton först med att kunna förklara varför banorna var elliptiska (1687) [1]. I ett system med två himlakroppar som attraherar varandra efter Newtons lagar, där positionen av kropparna illustreras på ett tvådimensionellt plan, läggs ena kroppen (solen) i origo och andra med koordinaterna $\mathbf{q}(t) = (q_1(t), q_2(t)) \in \mathbb{R}^2$. Rörelseförändringen av \mathbf{q} :s relativa position till solen kan således beskrivas

$$\ddot{q}_k = -\frac{q_k}{\|\mathbf{q}\|^3} \quad \text{för } \|\mathbf{q}\| \neq 0, \quad k = 1, 2. \quad (5)$$

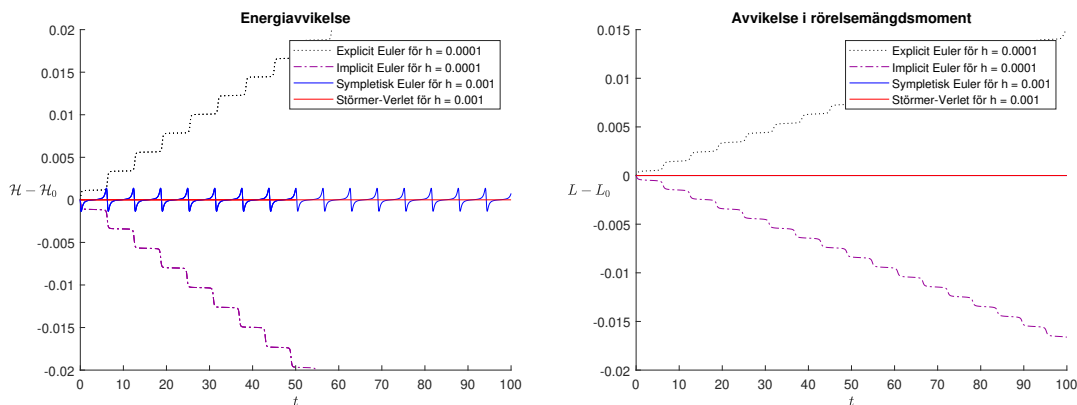
Notera att normen som används nu är den så kallade 2-normen, denna norm kommer användas framöver och kommer därför skrivas $\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2}$ för alla $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Sätter vi $\mathbf{p} = \dot{\mathbf{q}}$ blir (5) ett hamiltonskt problem med hamiltonian \mathcal{H} givet av

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{p}\|^2 - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} \quad \text{för } \|\mathbf{q}\| \neq 0,$$

(se appendix A.2 för framtagandet av hamiltonianen) samt rörelsemängdsmomentet $L : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ där

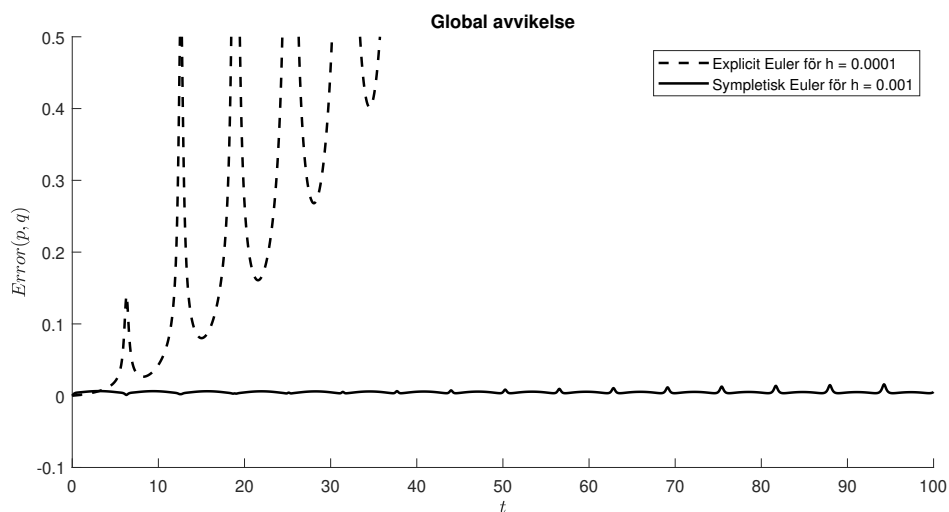
$$L(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = q_1 p_2 - q_2 p_1.$$

För Keplers problem gäller att den totala energin \mathcal{H} och rörelsemängdsmomentet L är invarianter (se kapitel 4) och är därför konstanta för alla lösningar till (5).



(a) Avvikelse av $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ från \mathcal{H}_0 .

(b) Avvikelse av $L(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ från L_0 . Notera att Eulers symplektiska och Störmer-Verlets metoder är båda noll.



(c) Total avvikelse av Eulers explicita och symplektiska metoder.

Figur 7: Avvikelse från den exakta lösningen som de fyra stegmetoderna orsakar.

Sätter vi

$$\mathbf{q}(0) = \begin{pmatrix} 1-s \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{och} \quad \mathbf{p}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{\frac{1+s}{1-s}} \end{pmatrix}$$

för något $s \in (0,1)$ får vi $\mathcal{H}(\mathbf{p}(0), \mathbf{q}(0)) = -\frac{1}{2} = \mathcal{H}_0$ och $L(\mathbf{p}(0), \mathbf{q}(0)) = \sqrt{1-s^2} = L_0$ varpå vi kan applicera Eulers explicita, implicita och symplektiska numeriska metoder samt Störmer-Verlets metod på intervallet $t \in [0,100]$. Det går att använda godtyckligt tidsintervall, men vi valde att sätta sluttiden till 100. I figur 6 ser vi numeriska lösningar för de fyra stegmetoderna där Eulers explicita metod åker moturs ut från den exakta lösningen och Eulers implicita metod åker moturs in från den exakta lösningen. Detta sker då dessa metoder inte erhåller hamiltonianens egenskaper och ökar respektive minskar energin i systemet (se figur 7 (a)). Eulers explicita och implicita metoder beter sig på ett liknande sätt som i pendelproblemet, vilket är väntat. Eulers symplektiska och Störmer-Verlets metoder är beräknade för en hundradels kortare steglängd och resulterar i bättre avvikelser. De sistnämnde metoderna ses pivotera den exakta banans ellips medurs.

I figur 7 ser vi avvikelserna mellan de numeriska metoderna och den exakta lösningen, där Eulers explicita och implicita metoder har en tiondels storlek på h jämfört med Eulers symplektiska och Störmer-Verlet metoderna. Figur 7 (a) visar hur energimängden i de explicita och implicita metoderna ökar respektive minskar linjärt i systemet, vilket förklarar uppförandet i tidigare grafer. Samtidigt ökar både Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod linjärt. I figur 7 (b) ser vi hur metoderna erhåller rörelsemängdsmomentet $L(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Vi kan se hur Eulers explicita och

implicita metoder förändras linjärt medan de andra är 0. Slutligen visar figur 7 (c) hur Eulers ex-

Tabell 1: Här listas avvikelseerna efter storlek på avvikelsen av de fyra metoderna utförda på Keplers problem [1, Kapitel I, Tabell 2.1].

Metod	Avvikelse i \mathcal{H}	Avvikelse i L	Global avvikelse
Eulers explicita metod	$\mathcal{O}(th)$	$\mathcal{O}(th)$	$\mathcal{O}(t^2h)$
Eulers implicita metod	$\mathcal{O}(th)$	$\mathcal{O}(th)$	$\mathcal{O}(t^2h)$
Eulers symplektiska metod	$\mathcal{O}(h)$	0	$\mathcal{O}(th)$
Störmer-Verlets metod	$\mathcal{O}(h^2)$	0	$\mathcal{O}(th^2)$

licita metod och Eulers symplektiska metod avviker från den exakta lösningen genom att använda två-normen. Vi undersöker enbart dessa två metoder då Eulers implicita metod uppför sig snarlikt Eulers explicita metod och Störmer-Verlets metod uppför sig snarlikt Eulers symplektiska metod. Vi kan se att Eulers explicita metod skiljer sig från noll med en kvadratisk avvikelse medan Eulers symplektiska metod avviker linjärt. Allt detta sammanfattas i tabell 1.

Nu har vi visat upp egenskaper hos metoderna, som bland annat att de alla har avvikelser och inte är exakta. Resterande del av fördjupningsarbetet kommer att vara av en mer teoretisk karaktär och vidareutveckla kring egenskaper hos hamiltonska system, men även egenskaper hos numeriska metoder, med extra fokus på de symplektiska metoderna.

4 Invarianter

I kapitel 3 såg vi att hamiltonianen var konstant över tid och sa att detta var ett exempel på en invariant. Därför vill vi nu studera mer generellt vad som menas med invarianter och få en förståelse varför geometrisk numerisk integrering är viktigt vid numeriska lösningar av hamiltonska problem. I detta kapitel kommer vi således att studera differentialekvationer på formen

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \end{cases} \quad (6)$$

där $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$ och $\mathbf{f}(\mathbf{y}) = [f_1(\mathbf{y}), f_2(\mathbf{y}), \dots, f_n(\mathbf{y})]^T$.

En invariant är en egenskap som hålls konstant över tid och avbildningar. Mer specifikt hålls egenskapen konstant över tid längs med den exakta lösningen till ekvation (6). Ett exempel på en invariant såg vi bland annat i kapitel 3 där energin var konstant med tiden hos hamiltonianen. Vi kommer nu att studera flera olika sorters invarianter men gemensamt för dem är följande:

Definition 4.1. En ickekonstant funktion $I: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ kallas för en *förste integral* (från engelskans *first integral*) till (6) om

$$\left(\frac{\partial I}{\partial \mathbf{y}} \right)^T \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0 \quad \text{för alla } \mathbf{y}.$$

Detta innebär att för varje lösning $\mathbf{y}(t)$ av (6) är $I(\mathbf{y}(t)) = I(\mathbf{y}_0)$ för alla $t \in [t_0, \tilde{t}]$. Synonymt med begreppet förste integral används även begreppet *invariant* [1, Kapitel IV.1, Definition 1.1].

Fortsatt ser vi dessutom att definitionen ovan är ekvivalent med att en egenskap hålls konstant över tid. Detta genom att studera tidsderivatan av I och utnyttja kedjeregeln

$$\frac{dI(\mathbf{y}(t))}{dt} = \frac{\partial I}{\partial y_1} \dot{y}_1(t) + \frac{\partial I}{\partial y_2} \dot{y}_2(t) + \dots + \frac{\partial I}{\partial y_n} \dot{y}_n(t) = \left(\frac{\partial I}{\partial \mathbf{y}} \right)^T \dot{\mathbf{y}}(t) = \left(\frac{\partial I}{\partial \mathbf{y}} \right)^T \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0.$$

Den nästsista likheten kommer från ekvation (6) och den sista likheten kommer från definitionen av att en invariant hålls konstant med tiden.

4.1 Linjära invarianter

Den enklaste sortens invarianter vi kommer att studera är så kallade linjära invarianter. Ordet linjär kommer från att funktionen som motsvarar I i definition 4.1 är en linjärkombination av y_k .

Per definition ska invarianten vara konstant med tiden, det vill säga

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{d}{dt}(c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) + \dots + c_n y_n(t)) = \frac{d}{dt}(\mathbf{c}^T \mathbf{y}(t)) = 0, \quad c_k \in \mathbb{R}, k \in \{1, \dots, n\}.$$

Om vi skriver ut derivatan och utnyttjar ekvation (6) får vi också att

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{c}^T \mathbf{y}(t)) = \mathbf{c}^T \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0$$

vilket ger oss definition 4.2.

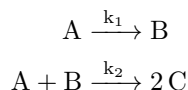
Definition 4.2. En ickekonstant funktion $I(\mathbf{y}) = \mathbf{c}^T \mathbf{y}$ är en linjär invariant till ekvation (6) om

$$\mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0 \quad \text{för alla } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$$

där $\mathbf{c} = \frac{\partial I}{\partial \mathbf{y}} \in \mathbb{R}^n$ är en konstant vektor [4, Kapitel 14.2, Ekvation (14.4)].

Linjära invarianter är bland annat viktiga inom kemi. Inom kemi kan nämligen vissa reaktioner bevara den totala molära koncentrationen av molekyler. Notera dock att dessa reaktioner är specialfall och inget som gäller för kemiska reaktioner i allmänhet. Låt oss genomföra ett liknande exempel som det i Hairer, Lubich och Wanner [1, Kapitel IV.1] för att illustrera ett fall då ODE:erna som beskriver koncentrationsförändringarna har en linjär invariant.

Exempel 4.1. Vi studerar en serie av kemiska reaktioner



där A, B och C är kemiska substanser och k_1, k_2 är hastighetskonstanter för respektive reaktion. Vi kan nu ställa upp ett system av ODE:er för att beskriva hur koncentrationerna y_A, y_B och y_C förändras.

$$\begin{cases} \dot{y}_A = -k_1 y_A(t) - k_2 y_A(t) y_B(t) \\ \dot{y}_B = k_1 y_A(t) - k_2 y_A(t) y_B(t) \\ \dot{y}_C = 2k_2 y_A(t) y_B(t). \end{cases} \quad (7)$$

Genom att studera summan av y_A, y_B och y_C fås även att tidsderivatan

$$\frac{d}{dt}(y_A(t) + y_B(t) + y_C(t)) = \dot{y}_A + \dot{y}_B + \dot{y}_C.$$

Om vi sedan använder oss av ekvation (7) får vi fortsatt

$$-k_1 y_A(t) - k_2 y_A(t) y_B(t) + k_1 y_A(t) - k_2 y_A(t) y_B(t) + 2k_2 y_A(t) y_B(t) = 0.$$

Alltså är $I(y_A, y_B, y_C) = y_A + y_B + y_C =$ konstant över den exakta lösningen och därmed en linjär invariant.

Låt oss nu studera vilka av de numeriska lösningsmetoderna som presenterades i avsnitt 2.4 som bevarar linjära invarianter. Lämpligen börjar vi med Eulers explicita metod.

Exempel 4.2. Låt oss studera ett system som har en linjär förste integral $I(\mathbf{y}) = \mathbf{c}^T \mathbf{y}$. Eulers explicita metod säger att

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i$$

där $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}(\mathbf{y}_i)$. Fortsatt får vi då följande

$$\mathbf{c}^T \mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{c}^T (\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i) = \mathbf{c}^T \mathbf{y}_i + h \mathbf{c}^T \mathbf{f}_i = \mathbf{c}^T \mathbf{y}_i$$

där den sista likheten kommer från definition 4.2. Alltså bevarar Eulers explicita metod linjära invarianter.

Vi kan även visa att Eulers implicita metod, Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod alla bevarar linjära invarianter. Beviset för Störmer-Verlets metod återfinns i appendix A.3 men övriga bevis är snarlika dessa två presenterade bevis.

4.2 Kvadratiska invarianter

Nästa steg är att studera kvadratiska invarianter. Per definition säger vi att ekvation (6) har en kvadratisk invariant Q om $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ är bevarad, där C är en konstant symmetrisk matris. Notera att Q motsvarar I från definition 4.1. Vad som menas med att Q ska vara bevarad är att Q ska vara oförändrad över tid, det vill säga

$$\frac{dQ(t)}{dt} = \frac{d}{dt}(\mathbf{y}^T C \mathbf{y}) = 0 \quad \text{för alla } \mathbf{y}.$$

Låt oss nu fortsatt studera denna derivata genom att utnyttja produktregeln. Vi får då att

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{d}{dt}(\mathbf{y}^T C \mathbf{y}) = \dot{\mathbf{y}}^T C \mathbf{y} + \mathbf{y}^T C \dot{\mathbf{y}} = 2\mathbf{y}^T C \dot{\mathbf{y}} = 2\mathbf{y}^T C \mathbf{f}(\mathbf{y}),$$

där den sista likheten kommer från ekvation (6) [4, Kapitel 14.3]. Eftersom 2:an endast är en konstant får vi således följande definition:

Definition 4.3. Låt $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ vara en symmetrisk matris. En ickekonstant funktion $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ är då en *kvadratisk invariant* till ekvation (6) om och endast om

$$\mathbf{y}^T C \mathbf{f}(\mathbf{y}) = 0 \quad \text{för alla } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n.$$

Notera att I från definition 4.1 motsvaras av Q i denna definition [1, Kapitel IV.2, Ekvation (2.1)].

Nu blir det emellertid intressant att studera vilka numeriska metoder som bevarar kvadratiska invarianter. Låt därför $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ vara en invariant till ett system likt (6). Följaktligen är det rimligt att börja med Eulers explicita metod.

Exempel 4.3. Eulers explicita metod säger att

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i$$

där \mathbf{f}_i noterar $\mathbf{f}(\mathbf{y}_i)$. Låt nu $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ vara en kvadratisk invariant till ett system likt ekvation (6), där C är en symmetrisk matris. Följaktligen kan vi nu studera om Eulers explicita metod bevarar Q .

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_{i+1}^T C \mathbf{y}_{i+1} &= (\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i)^T C (\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i) \\ &= (\mathbf{y}_i^T + h \mathbf{f}_i^T) C (\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i) \\ &= (\mathbf{y}_i^T C + h \mathbf{f}_i^T C) (\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i) \\ &= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + h \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i + h \mathbf{f}_i^T C \mathbf{y}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i \\ &= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + 2h \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i. \end{aligned}$$

Den sista likheten kommer från att $h \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i = h \mathbf{f}_i^T C \mathbf{y}_i$. Men om det existerar en invariant $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ innebär det att termen $2h \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i = 0$ per definition. Alltså får vi att

$$\mathbf{y}_{i+1}^T C \mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i.$$

Däremot är termen $h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i$ generellt sett nollskild. Alltså bevarar inte Eulers explicita metod kvadratiska invarianter eftersom $\mathbf{y}_{i+1}^T C \mathbf{y}_{i+1} \neq \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i$ generellt sett [4, Kapitel 14.3].

Vi får alltså resultatet att Eulers explicita metod inte bevarar kvadratiska invarianter generellt sett. Således kan det konstateras att bevarandet av kvadratiska invarianter inte är lika givet som för linjära invarianter. Inte oväntat visar det sig också att Eulers implicita metod inte bevarar kvadratiska invarianter. Men inte heller de geometriska integratorerna Eulers symplektiska metod och Störmer-Verlets metod bevarar kvadratiska invarianter. I appendix A.4 visas hur Störmer-Verlets metod misslyckas med att bevara kvadratiska invarianter men bevisen för de övriga metoderna är snarlika [4, Kapitel 14.3].

Det visar sig dock att Störmer-Verlets metod bevarar en underkategori av kvadratiska invari-

anter. Denna underkategori relaterar till system av ODE:er på formen

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{p}} = \mathbf{f}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \\ \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \end{cases} \quad (8)$$

där $\mathbf{p}(t)$, $\mathbf{q}(t)$ är övervektorer med index $\mathbf{p}_k : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{q}_k : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ och $k \in \{1, 2, \dots, n\}$. Fortsatt är $\mathbf{f}, \mathbf{g} : \mathbb{R}^{m \times n} \times \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ [1, Kapitel IV.2.2]. Viktigt att notera är att ekvation (3) tillhör denna underkategori varför vi kan ana att Störmer-Verlets metod är användbar vid lösning av hamiltonska system. Följaktligen kan vi specificera vilken typ av kvadratisk invariant som bevaras av Störmer-Verlets metod genom att formulera följande sats.

Sats 4.1. För ett system av ODE:er likt (8) bevarar Störmer-Verlets metod kvadratiske invarianten på formen

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T (B\mathbf{q} + \mathbf{b}),$$

där B är en konstant symmetrisk matris och \mathbf{b} är en konstant vektor av lämpliga dimensioner [7, Sats 3.5].

Beviset för satsen ovan erhålls i appendix A.5.

Fysikaliskt återfinns den här typen av invarianter i form av rörelsemängdsmomentet för system med n antal kroppar [7]. Emellertid är hamiltonianen sällan på formen som i sats 4.1 men det visar sig att Störmer-Verlets metod ändå är användbar för att lösa hamiltonska system, eftersom avvikelser i energi som Störmer-Verlets metod ger upphov till är liten [7]. Samma sak gäller även för andra symplektiska metoder, exempelvis Eulers symplektiska metod. Detta var något vi såg i figur 7 (c) från avsnitt 3.2. Att symplektiska numeriska metoder bevarar hamiltonianen approximativt utforskas mer i kapitel 6 där vi kommer att studera *baklänges felanalys*. Men för att kunna göra det behöver vi först introducera konceptet symplektism (kapitel 5).

4.3 Polynom invarianter

Innan vi börjar studera symplektism kan vi kort kommentera så kallade *polynom invarianter*. I avsnitt 4.2 studerade vi kvadratiske invarianter vars högsta potens är av grad 2, vilket bland annat sågs i exempel 4.3. Det existerar dock invarianter med gradtal högre än 2, vilka kallas för polynom invarianter. Fortsatt existerar det flera olika sorters polynom invarianter så som determinant invarianter och invarianter relaterade till *isospektralt flöde* [1, Kapitel IV.3]. Vi kommer dock inte att studera dessa typer av invarianter i större utsträckning. Men det kan ändå vara viktigt att veta att metoderna som presenterades i avsnitt 2.4 inte bevarar dessa invarianter generellt sett och att det leder till större komplexitet vid försök att bevara den här typen av invarianter [1, Kapitel IV.3].

5 Symplektism

Utöver det faktum att hamiltonianen är en invariant är *symplektism* en annan mycket viktig egenskap hos hamiltonska system [1, Kapitel VI.2]. I detta kapitel vill vi därför introducera begreppet symplektism och visa att lösningar till hamiltonsk problem har denna egenskap. Vi börjar med att studera flödet hos ett hamiltonskt system, på formen $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ som är symplektiskt. För att bevisa att flödet är symplektiskt utgår vi från definitionen som bygger på avbildningar.

En avbildning definieras som ett parallelogram $P \in \mathbb{R}^{2d}$ där d är antalet frihetsgrader. P spänns upp av två vektorer ξ och η på formen

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi^p \\ \xi^q \end{pmatrix}, \quad \eta = \begin{pmatrix} \eta^p \\ \eta^q \end{pmatrix}$$

där ξ och η tillhör domänen för (\mathbf{p}, \mathbf{q}) , där $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$ det vill säga $\xi^p, \xi^q, \eta^p, \eta^q \in \mathbb{R}^d$, medan

$$P = \{r\xi + s\eta \mid 0 \leq s \leq 1, 0 \leq r \leq 1\}.$$

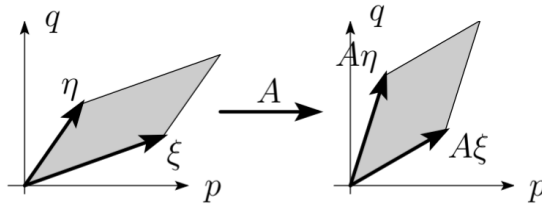


Figure 8: Area bevarandet av en symplektisk avbildning. Tack till Ernest Hairer för figuren [1, Kapitel VI, figur 2.1].

För fallet då vi studerar ett system med $d = 1$ antal frihetsgrader blir den orienterade arean ω_1 av parallelogrammet P

$$\omega_1(\xi, \eta) = \det \begin{pmatrix} \xi^p & \eta^p \\ \xi^q & \eta^q \end{pmatrix}.$$

Vad vi menar med symplektism är att denna orienterade area ω_1 ska vara bevarad av en avbildning A . Hur detta kan se ut för fallet $d = 1$ syns i figur 8. Arean för området kan ändra utseende, men kommer alltid att ha samma värde. Detta illustreras genom att först titta på en area som spänns upp av vektorerna η och ξ där vektorerna sedan transformeras till $A\eta$, $A\xi$ men ändå bevarar arean!

För högre frihetsgrader ($d > 1$) får vi istället en summa av de orienterade areorna för P på koordinatplanen (p_k, q_k) .

$$\omega_d(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^d \det \begin{pmatrix} \xi_k^p & \eta_k^p \\ \xi_k^q & \eta_k^q \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^d (\xi_k^p \eta_k^q - \xi_k^q \eta_k^p).$$

Detta definierar en bilinjär avbildning med vektorer i \mathbb{R}^{2d} . På matrisform kan avbildningen beskrivas som $\omega_d(\xi, \eta) = \xi^T J \eta$ där J är

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

och I är identitetsmatrisen.

Definition 5.1. En linjär avbildning $A: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ är symplektisk om $A^T J A = J$ eller $\omega_d(A\xi, A\eta) = \omega_d(\xi, \eta)$ för alla $\xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d}$ [1, Kapitel VI.2, Definition 2.1].

Även icke-linjära avbildningar är av intresse inom symplektism. En icke-linjär avbildning g kan definieras som

Definition 5.2. En differentierbar avbildning $g: U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ där $U \in \mathbb{R}^{2d}$ är en öppen mängd. Avbildningen är symplektisk om jacobimatrisen $g'(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ alltid är symplektisk, som går att beskriva på formen $g'(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J g'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J$ eller $\omega_d(g'(\mathbf{p}, \mathbf{q})\xi, g'(\mathbf{p}, \mathbf{q})\eta) = \omega_d(\xi, \eta)$ [1, Kapitel VI.2, Definition 2.2]. Observera att $g'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \nabla g(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left(\frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}}, \frac{\partial g}{\partial \mathbf{q}} \right)$.

Utifrån definitionen av avbildningar, och när de är symplektiska, kan man definiera flödet φ_t som en avbildning vilken ger nästkommande lösning för ett hamiltonskt system med avseende på tiden t . Detta för en avbildning på formen $\varphi_t: (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \mapsto (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ där $\varphi_t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ är lösningen till systemet med avseende på initialvärdena $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$.

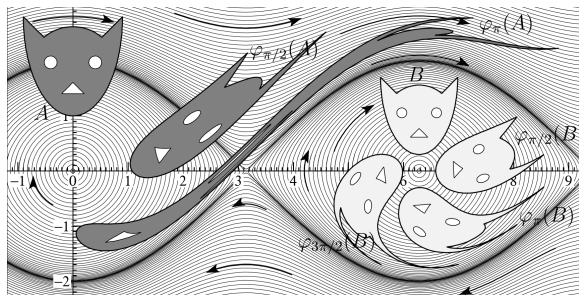
Sats 5.1. För alla bestämda tidpunkter t är flödet φ_t av ett hamiltonskt system en symplektisk avbildning [1, Kapitel VI, Sats 2.4].

Bevis. Låt övervektorn $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$. Fortsatt studerar vi hamiltonska problem på formen

$$\dot{\mathbf{y}} = J^{-1} \nabla \mathcal{H}(\mathbf{y})$$

Derivatans $\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0}$ är då en lösning till en variationsekvation på formen

$$\dot{\Psi} = J^{-1} \nabla^2 \mathcal{H}(\varphi_t, \mathbf{y}_0) \Psi$$



Figur 9: Nivåkurvor för en pendel och dess areabevarande flöde. Tack till Ernst Hairer för figuren [1, Kapitel VI, figur 2.2]

där $\nabla^2 \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ är hessianen till $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ eftersom $\nabla^2 \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ är symmetrisk. Därför får vi att

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) \right) &= \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) + \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) \\ &= \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T \nabla^2 \mathcal{H}(\varphi_t(\mathbf{y}_0)) J^{-T} J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) + \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T \nabla^2 \mathcal{H}(\varphi_t(\mathbf{y}_0)) \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

där den sista likheten kommer från att $J^T = -J$ samt att $J^{-T} J = -I$. Följaktligen kan det konstateras att eftersom relationen

$$\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial \mathbf{y}_0} \right) = J$$

är uppfylld för $t = 0$ är den också uppfylld för alla t och för alla $(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)$ förutsatt att lösningen tillhör domänen för definitionen av hamiltonianen \mathcal{H} . Notera även att φ_0 är identitetsavbildningen [1, Kapitel VI]. \square

I figur 9 ser vi en pendels flöde där figuren visar att flödet är areabevarande, oavsett startvärde för hamiltonska system. Areorna av $\varphi_t(A)$ och $\varphi_t(B)$ är oförändrade oberoende av val av t trots olika utseende.

För ett hamiltonskt problem är en numerisk metod symplektisk om dess jacobian med avseende på flödet, precis som för den linjära avbildningen i definition 5.1, uppfyller kravet att $\Phi_h'^T J \Phi_h' = J$ för alla \mathbf{p}, \mathbf{q} och tillräckligt små steglängder h . Notera att $\Phi_h'(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \nabla \Phi_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \left(\frac{\partial \Phi_h}{\partial \mathbf{p}}, \frac{\partial \Phi_h}{\partial \mathbf{q}} \right)$.

En illustration på hur areabevarandet kan se ut för några av de olika numeriska metoderna går att hitta i [1, Kapitel VI, figur 3.1]

Definition 5.3. En numerisk enstegsmetod är symplektisk om dess enstegsavbildning $y_1 = \Phi_h(y_0)$ är symplektisk när metoden appliceras på ett glatt hamiltonskt system, för alla tillräckligt små steglängder h [1, Kapitel VI.3, Definition 3.1].

Av de tidigare nämnda metoderna som används i pendelproblemet under avsnitt 3.1, där lösningarna illustreras i figur 5, är det enbart Eulers symplektiska metod som har en symplektisk enstegsavbildning av första ordningen. Störmer-Verlets metod är av andra ordningen. Men eftersom metoden är en sammansättning Eulers symplektiska metod applicerad två gånger med halva steglängden är även denna metod en symplektisk metod. Hairer, Lubich och Wanner [1, Kapitel VI, Sats 3.3] använder sig av *de Vogelaeres sats* för att bevisa detta.

Vi utgår likt tidigare från ett hamiltonskt system med $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ där $\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ och $\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ enligt ekvation (3). Detta hamiltonska system kan ekvivalent skrivas på formen $\dot{\mathbf{y}} = J^{-1} \nabla \mathcal{H}(\mathbf{y})$. Då kan Eulers symplektiska metod beskrivas enligt de Vogelaeres definition på två sätt:

Sats 5.2 (de Vogelaere 1956). *Eulers symplektiska metoder*

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_i - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_i) & \text{eller} & & \mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_i - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_{i+1}) \\ \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_i + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_i) & & & \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_i + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_{i+1}) \end{aligned} \quad (9)$$

är symplektiska av första ordningen [1, Kapitel VI, Sats 3.3].

På ett hamiltonskt system likt detta säger de Vogelaeres att Eulers symplektiska metod transformeras symplektiskt på formen $\Phi_h : (\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)^T \mapsto (\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})^T$.

Bevis. För ett hamiltonskt system på samma form som sats 5.2 utgår vi från den metod där nästkommande steg, med hänsyn till \mathbf{p} , beskrivs av \mathbf{p}_{i+1} och \mathbf{q}_i . Deriverar man de två ekvationerna som har nästa steg med hänsyn till \mathbf{p} från båda Eulers symplektiska metoder med avseende på $(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)$ får man ett uttryck på formen

$$\begin{pmatrix} I + h \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} \right)^T & 0 \\ -h \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^2} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})}{\partial(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -h \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ 0 & I + h \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} \end{pmatrix}.$$

De två matriserna är evaluerade vid punkten $(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_i)$ och med det förhållandet kan man räkna fram $\left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})}{\partial(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)} \right)$ och därefter direkt se om villkoret i definition 5.1 uppfylls, det vill säga att

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})}{\partial(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)} \right)^T J \left(\frac{\partial(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})}{\partial(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)} \right) = J \quad (10)$$

och är därför symplektisk [1, Kapitel VI.3]. \square

En fotnot som är intressant kring Eulers symplektiska metoder är att de är implicita för generella hamiltonska system, men för separabla system som $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q})$ blir de explicita. Det finns fler generella situationer där detta sker, men området är inget som kommer fortsätta bearbetas i detta arbete.

Vad gäller Störmer-Verlets metod som är av andra ordningens tillstånd och samtidigt är uppbyggd av både Eulers symplektiska metoder, så går det utifrån nyss gjorda procedur att komma fram till resultatet att metoden är symplektisk. Eftersom det är samma tillvägagångssätt kommer beviset inte att genomföras i arbetet, men med hänsyn till beviset för Eulers symplektiska metod kan Störmer-Verlets metod och dess symplektism även bevisas på liknande sätt.

Sats 5.3. *Båda Störmer-Verlets metoder*

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{i+1/2} &= \mathbf{p}_i - \frac{h}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_i) \\ \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_i + \frac{h}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_i) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_{i+1}) \right) \\ \mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_{i+1/2} - \frac{h}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_{i+1}) \end{aligned}$$

samt motsvarande med halva steg till hänsyn av \mathbf{q} istället

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_{i+1/2} &= \mathbf{q}_i + \frac{h}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_{i+1/2}) \\ \mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_i - \frac{h}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_{i+1/2}) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1/2}) \right) \\ \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_{i+1/2} + \frac{h}{2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1/2}) \end{aligned}$$

är symplektiska metoder av andra ordningsgraden [1, Kapitel VI, Sats 3.4].

Med utgångspunkt i sats 5.2 och 5.3 kan följande exempel underlätta förståelsen.

Exempel 5.1. Givet Keplers problem med hamiltonianen $\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|}$ kan Eulers symplektiska metod (9) tillämpas. Låt $\Phi_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ vara flödet där $\Phi_h : (\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i) \mapsto (\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})$ givet av

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_i - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_i) = \mathbf{p}_i + \frac{h \mathbf{q}_i}{\|\mathbf{q}_i\|^3} \\ \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_i + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_i) = \mathbf{q}_i + h \mathbf{p}_{i+1}.\end{aligned}$$

Jacobianen Φ'_h av flödet beräknas till

$$\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

varpå vi kan observera att

$$\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} = J,$$

det vill säga att $\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J$ vilket visar att Eulers symplektiska metod är symplektisk på Keplers problem. Liknande beräkningar för Störmer-Verlets metod (se delavsnitt 2.4.4) för sammansättningen $\Psi_h = \Phi_{h/2}^* \circ \Phi_{h/2}$ där $\Phi_{h/2} : (\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i) \mapsto (\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_{i+1/2})$ och $\Phi_{h/2}^* : (\mathbf{p}_{i+1/2}, \mathbf{q}_{i+1/2}) \mapsto (\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})$ ger

$$\Psi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \Phi_{h/2}^{*'}(\Phi_{h/2}(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \circ \Phi'_{h/2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ \frac{h}{2} I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ 0 & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ \frac{h}{2} I & \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} + I \end{pmatrix}.$$

Vidare gäller

$$\begin{aligned}\Psi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Psi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} I \\ \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} + I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ \frac{h}{2} I & \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} + I \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I & \frac{h}{2} \mathcal{H}_I \\ \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} + I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{h}{2} I & \frac{h^2}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} + I \\ -I & -\frac{h}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} = J\end{aligned}$$

från vilket vi kan se att Störmer-Verlets metod är symplektisk på Keplers problem. Annat kan observeras för Eulers explicita metod (se delavsnitt 2.4.1) där flödesavbildningen Φ_h ges av

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{i+1} &= \mathbf{p}_i - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i) = \mathbf{p}_i + \frac{h \mathbf{q}_i}{\|\mathbf{q}_i\|^3} \\ \mathbf{q}_{i+1} &= \mathbf{q}_i + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i) = (1 + h) \mathbf{p}_i.\end{aligned}$$

Vi kan nu beräkna Φ'_h till att vara

$$\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ (1 + h)I & 0 \end{pmatrix}$$

samt

$$\begin{aligned}\Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q})^T J \Phi'_h(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \begin{pmatrix} I & (1+h)I \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ (1+h)I & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I & (1+h)I \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & I \\ 0 & (1+h)I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -(1+h)\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \\ (1+h)\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Vilket visar att Eulers explicita metod inte är symplektisk då $(1+h)\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}^2} \neq I$.

Ett viktigt attribut hos symplektism är dess energibevarande egenskap. Om vi tittar tillbaka på avsnitt 3.2, Keplers problem, i figur 7 där energiavvikelsen för de olika metoderna visas, ser vi en tydlig skillnad mellan metoderna. De symplektiska metoderna har en väldigt liten avvikelse från den verkliga lösningen (att energin är konstant) medan andra metoder vilka inte bevarar symplektism så som Eulers explicita metod divergerar. Detta diskuterades kortfattat under avsnitt 3.2. Dock ser man ändå en märkbar avvikelse med hänsyn till steglängdens storlek hos de symplektiska metoderna och det är därför viktigt att fortsätta diskutera, vilket för oss in på nästa kapitel.

6 Baklänges avvikelseanalys och långtidsbeteende hos symplektiska numeriska metoder

I avsnitt 4.2 antydde det att avvikelsen i energi som symplektiska numeriska metoder ger upphov till är litet. I kapitel 5 presenterades den första pusselbiten för att förstå varför symplektiska numeriska metoder bevarar hamiltonianen approximativt. Vad vi vill göra nu är att presentera nästa pusselbit för att sedan i sats 6.2 presentera att så är fallet. Följaktligen introducerar vi området *baklänges felanalys* (från engelskans *backward error analysis*).

Konceptet bygger på att en approximativ numerisk lösning till ett givet problem är en exakt lösning till ett snarlikt problem. Vi kan sedan jämföra detta snarlika problem med originalproblemet för att se om egenskaper ärvs till det snarlika problemet [4, Kapitel 13.4]. Mer specifikt kan vi återigen studera system av ODE:er på formen

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{f}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

och en enstegsformulering av en numerisk metod $\mathbf{y}_{i+1} = \Phi_h(\mathbf{y}_i)$ (exempelvis Störmer-Verlets metod). Därefter vill vi finna ett modifierat system av ODE:er

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) + h\mathbf{f}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathbf{f}_3(\mathbf{y}) + \dots + \mathbf{f}_j(\mathbf{y}) + \dots \quad (11)$$

sådan att det exakta flödet $\tilde{\varphi}_h$ hos (11) uppfyller att $\tilde{\varphi}_h(\mathbf{y}) = \Phi_h(\mathbf{y})$ inom steglängden h [7]. Notera att $\mathbf{f}_1 = \mathbf{f}$ och att det inte är självklart att summan ovan konvergerar. Tvärtom divergerar ofta summan [1, Kapitel IX.1]. Om ett system likt (11) ändock funnes kan slutsatser om ärvda egenskaper göras.

Men eftersom (11) ofta divergerar är det inte rimligt att studera serien för oändligt många termer \mathbf{f}_j , där $j \in \mathbb{N}$. Därför blir det intressant att istället studera vilken trunkering av (11) som är tillräcklig för att få en optimal approximation. Vi vill alltså hitta ett N sådan att motsvarande trunkering

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) + h\mathbf{f}_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}\mathbf{f}_N(\mathbf{y}) \quad (12)$$

leder till att avvikelsen mellan det trunkerade modifierade systemets flöde $\tilde{\varphi}_{N,h}$ och den numeriska lösningens flöde Φ_h blir så litet som möjligt. För att finna ett sådant N vill man uppfylla kriteriet

$$\|\Phi_h(\mathbf{y}_0) - \tilde{\varphi}_{N,h}(\mathbf{y}_0)\| \leq Ce^{-h_0/h} \quad \text{för } h \leq h_0$$

där C är en konstant och h_0 är en konstant av återhållsam storlek [1, Kapitel IX.7.3].

Det visar sig nu att såväl det modifierade systemet av ODE:er som det trungerade modifierade systemet av ODE:er har en egenskap som är essentiell för det här kapitlet. Om vi studerar ett uppdelat hamiltonskt system

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} \end{cases} \quad (13)$$

kan denna egenskap formuleras i följande sats.

Sats 6.1 (Hamiltonska system). *Om en symplektisk metod Φ_h appliceras på ett hamiltonskt system med en glatt hamiltonian $\mathcal{H} : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$, då är det modifierade systemet av ODE:er en hamiltonian. Ekvivalent innebär detta att det existerar en glatt funktion $\mathcal{H}_j : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ för något heltal $j \in \mathbb{N}$ sådan att $\mathbf{f}_j(\mathbf{y}) = J^{-1} \nabla \mathcal{H}_j(\mathbf{y})$ där $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ [1, Kapitel IX.3.1, Sats 3.1].*

Beviset för sats 6.1 erhålls i appendix A.6. I och med sats 6.1 kan vi studera en trungerad modifierad hamiltonian

$$\mathcal{H}_{trunk}(\mathbf{y}) = \mathcal{H}(\mathbf{y}) + h\mathcal{H}_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{N-1}\mathcal{H}_N(\mathbf{y})$$

till ett trungerat modifierat system likt ekvation (12). Sats 6.1 tillsammans med övrig presenterad teori i det här kapitlet ger oss nu ett av de viktigaste resultaten inom geometrisk numerisk integration, nämligen att symplektiska numeriska metoder likt Störmer-Verlets metod eller Eulers symplektiska metod bevarar hamiltonianen approximativt under exponentiellt lång tid [1, Kapitel IX.8]. Vi kan således formulera följande sats.

Sats 6.2. *Betrakta ett hamiltonskt system med en analytisk hamiltonian $\mathcal{H} : D \rightarrow \mathbb{R}$ där $D \subset \mathbb{R}^{2d}$. Följaktligen appliceras en symplektisk numerisk metod Φ_h med tillräckligt liten steglängd h på detta hamiltonska system. Om den numeriska lösningen stannar inom en kompakt mängd $K \subset D$, då uppfyller den symplektiska metoden att*

$$\mathcal{H}_{trunk}(\mathbf{y}_i) = \mathcal{H}_{trunk}(\mathbf{y}_0) + \mathcal{O}(e^{-h_0/(2h)}), \quad \text{för } ih \leq e^{h_0/(2h)}$$

och att

$$\mathcal{H}(\mathbf{y}_i) = \mathcal{H}(\mathbf{y}_0) + \mathcal{O}(h^\rho), \quad \text{för } ih \leq e^{h_0/(2h)}$$

där h_0 är en positiv konstant av återhållsam storlek och ρ är ordningen hos den symplektiska numeriska metoden [1, Kapitel IX.8, Sats 8.1].

Nämnvärt är att $\rho = 1$ för Eulers symplektiska metod medan $\rho = 2$ för Störmer-Verlets metod i sats 6.2. Alltså är avvikelserna som Störmer-Verlets metod ger upphov till mindre än avvikelserna som Eulers symplektiska metod ger upphov till.

Slutligen kan vi konstatera att vi i detta kapitel har presenterat idéer som motiverar användandet av symplektiska numeriska lösningsmetoder, likt Störmer-Verlets metod eller Eulers symplektiska metod, trots att de inte bevarar hamiltonianen exakt. Detta eftersom avvikelserna som metoderna ger upphov till är liten. Vad vi vill göra nu är att i kapitel 7 studera ett vanligt appliceringsområde för Störmer-Verlets metod. Appliceringsområdet i fråga är molekylodynamik och handlar om atomers och molekylers rörelse och energi.

7 Störmer-Verlet metods energibevarande egenskaper inom molekylodynamik

Ett viktigt applikationsområde för geometrisk numerisk integration är molekylodynamik (MD) där ett system med fixt antal partiklar N studeras. Mer specifikt är det partiklarnas interaktion med varandra och rörelse inom systemgränsen som studeras. Partiklarna i fråga kan vara atomer eller molekyler, men eftersom molekyler har mer komplicerade geometrier studerar vi främst atomer i detta kapitel. Av stor vikt för kvantkemister och materialfysiker är att energin är bevarad hos systemet. Därför blir det intressant att studera dess hamiltonian vilken ges av

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{m_k} \mathbf{p}_k^T \mathbf{p}_k + \sum_{k=2}^N \sum_{j=1}^{k-1} V_{kj}(r_{kj}) \quad \text{för } r_{kj} = \|\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_j\| \neq 0 \quad (14)$$

där m_k är atom k :s massa, $\mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^3$ är atom k :s position, $\mathbf{p}_k \in \mathbb{R}^3$ är atom k :s rörelsemängd, r_{kj} är

avståndet mellan partikel k och j och V_{kj} är *Lennard-Jonespotentialen* [1]. Lennard-Jonespotentialen beskriver hur partiklar interagerar med varandra genom

$$V_{kj}(r_{kj}) = 4\varepsilon_{kj} \left(\left(\frac{\sigma_{kj}}{r_{kj}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{kj}}{r_{kj}} \right)^6 \right)$$

där ε_{kj} är potentialgropens djup³ och σ_{kj} är Lennard-Jonespotentialens nollställe [8, Kapitel 1.1.1]. Vi använder oss av Lennard-Jonespotentialen eftersom den modellerar väl hur partiklar interagerar med varandra. En graf över Lennard-Jonespotentialen syns i figur 10 där dessa interaktioner visualiseras. Om partiklarna kommer för nära varandra kommer de vilja repelleras varandra, vilket höjer energin kraftigt i systemet. Men samtidigt existerar det ett optimalt avstånd mellan partiklarna där energin har ett minimivärde. Lite förenklat är detta optimala avstånd vad kemister syftar på när de talar om *bindingslängden* mellan två atomer. Alternativt skrivs ibland Lennard-Jonespotentialen på formen

$$V_{kj}(r_{kj}) = \varepsilon_{kj} \left(\left(\frac{r_m}{r_{kj}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r_{kj}} \right)^6 \right) \quad (15)$$

där r_m är avståndet då Lennard-Jonespotentialen har sitt minimivärde, det vill säga atomernas bindningslängd.

När vi nu har byggt upp förståelsen över systemet kan vi diskutera potentiella numeriska lösningsmetoder. Den franske fysikern Loup Verlet föreslog 1967 specifikt Störmer-Verlets metod för att lösa den här typen av problem [1, Kapitel I.4]. Hairer, Lubich och Wanner [1, Kapitel I.4] gör en jämförelse mellan Eulers explicita metod och Störmer-Verlets metod applicerad på ett molekyl-dynamikproblem. Låt oss således genomföra en liknande jämförelse med ett system med $N = 2$ atomer i en dimension. Att endast studera två helt isolerade atomer som endast kan röra sig i en dimension är visserligen inte särskilt verklighetstroget, men exemplet ger likväl en god förståelse till varför en symplektisk numerisk metod likt Störmer-Verlets metod är mer användbar än en ickesymplektisk numerisk metod likt Eulers explicita metod.

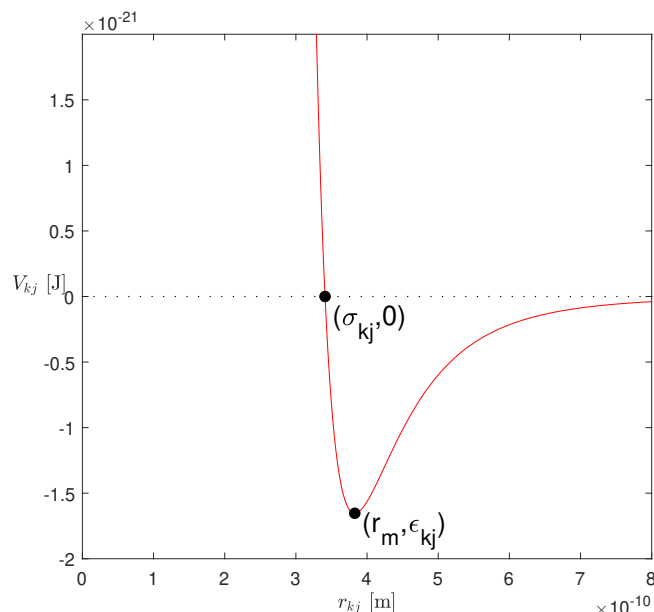
Exempel 7.1. Vi studerar ett system med $N = 2$ stycken atomer i en dimension. För ett sådant system kan vi sätta den första atomens position och rörelsemängd till noll och endast studera den andra atomens avstånd och relativa rörelsemängd till den första atomen. Låt avståndet mellan de två atomerna vara $r \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ och $p \in \mathbb{R}$ vara den andra atomens rörelsemängd. Således får vi att hamiltonianen i ekvation (14) blir

$$\mathcal{H}(p,r) = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{p^2}{2m} + \varepsilon \left(\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right).$$

Notera att vi använder oss av ekvation (15):s form av Lennard-Jonespotentialen i detta uttryck för hamiltonianen. Låt oss nu välja våra enheter så att hamiltonianen ytterligare kan skrivas om som

$$\mathcal{H}(p,r) = \frac{p^2}{2} + r^{-12} - 2r^{-6}.$$

³Det vill säga ε_{kj} är Lennard-Jonespotentialens minimivärde.



Figur 10: Plot över Lennard-Jonespotentialen för argon med $\sigma_{kj} = 3.41 \cdot 10^{-10}$ m och $\varepsilon_{kj} = 1.65 \cdot 10^{-21}$ J [1, Kapitel I.4]. Tillhörande MATLAB-kod erhålls i appendix A.7.

Detta val av enheter underlättar delvis beräkningarna men är dessutom essentiellt för att kunna applicera Störmer-Verlets metod. Kom ihåg att Störmer-Verlets metod endast är applicerbar på differentialekvationer på formen

$$\begin{cases} \dot{p} = f(q) \\ \dot{q} = p. \end{cases}$$

För vårt system motsvaras q av r . Och genom att göra den här omskrivningen får vi att

$$\dot{r} = \frac{\partial \mathcal{H}(p,r)}{\partial p} = p,$$

vilket innebär att kravet är uppfyllt. Låt nu våra initialvillkor vara $p(0) = -0.4$ rörelsmängdsenheter och $r(0) = 1$ längdenheter.

Följaktligen vill vi finna funktionen f för att därefter kunna applicera våra numeriska metoder. Vi finner f genom att derivera \mathcal{H} med avseende på r

$$f(r) = -\frac{\partial \mathcal{H}(p,r)}{\partial r} = -12r^{-13} + 12r^{-7} = 12(r^{-7} - r^{-13}).$$

Vi har nu all information som behövs för att applicera våra numeriska metoder. Låt oss därför först applicera Störmer-Verlets metod

$$\begin{cases} p_{i+\frac{1}{2}} = p_i + \frac{h}{2}f(r_i) \\ r_{i+1} = r_i + hp_{i+\frac{1}{2}} \\ p_{i+1} = p_{i+\frac{1}{2}} + \frac{h}{2}f(r_{i+1}) \end{cases}$$

och därefter applicera Eulers explicita metod för ett uppdelat system. Vi har inte stött på den uppdelade versionen av Eulers explicita metod förut men genom att låta

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} r \\ p \end{pmatrix} \quad \text{och} \quad \mathbf{g}(\mathbf{y}) = \mathbf{g}\left(\begin{pmatrix} r \\ p \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} p \\ f(r) \end{pmatrix}$$

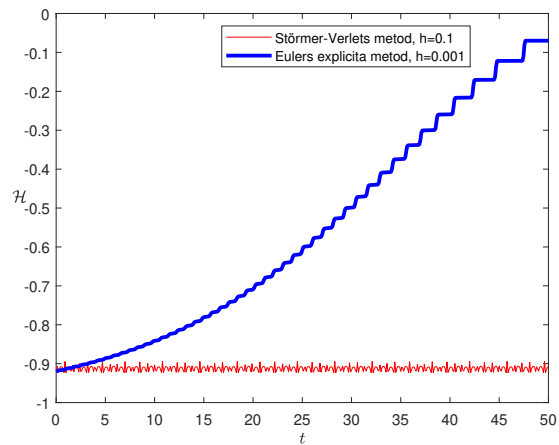
får vi att $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{g}(\mathbf{y})$. Och då ser vi att denna formen på ODE:n är samma form som presenterades i delavsnitt 2.4.1. Om vi fortsatt applicerar Eulers explicita metod på detta system får vi formlerna

$$\begin{cases} r_{i+1} = r_i + hp_i \\ p_{i+1} = p_i + hf(r_i) \end{cases}$$

för att lösa en uppdelad ODE numeriskt med Eulers explicita metod [9, Kapitel 2.1.1].

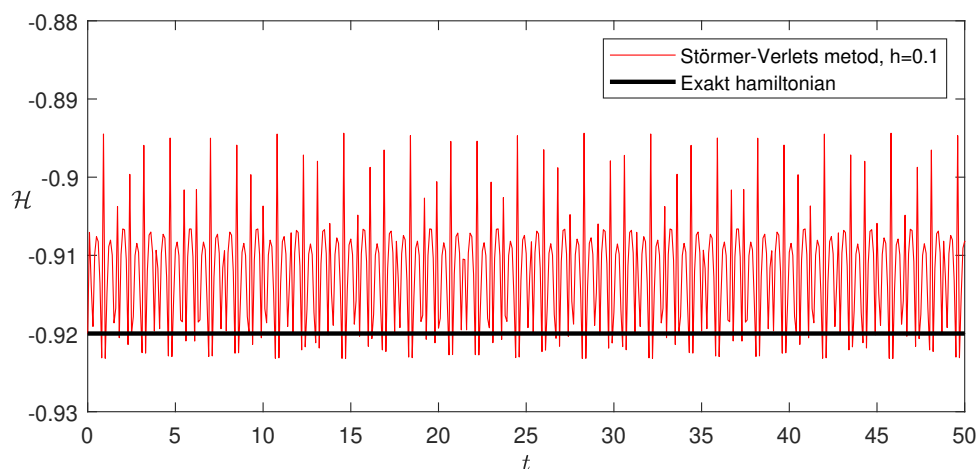
Vi genomför beräkningarna för Störmer-Verlets metod och Eulers explicita metod i MATLAB och tillhörande kod erhålls i appendix A.8. Först jämför vi hamiltonianen framtagen med Störmer-Verlets metod med ett $h = 0.1$ tidsenheter med hamiltonianen framtagen med Eulers explicita metod med ett $h = 0.001$ tidsenheter. Resultaten erhålls i figur 11. Där ser vi att fastän steglängden för Eulers explicita metod är betydligt mindre än för Störmer-Verlets metod modellerar den energin mycket sämre. Störmer-Verlets metod beter sig också väl eftersom den oscillerar kring initialenergin (det vill säga den exakta hamiltonianens energi) och inte avviker nämnvärt från initialenergin i det tidsspann vi studerar. Detta var något som var förväntat i och med idéerna som presenterades i kapitel 6.

Om vi ytterligare studerar Störmer-Verlets metod genom att halvera steglängden till $h = 0.05$ tidsenheter och jämföra amplituden i oscillationerna med originalsteglängden på $h = 0.1$ tidsenheter får vi de två jämförande graferna i figur 12. Här syns det att amplituden i oscillationerna

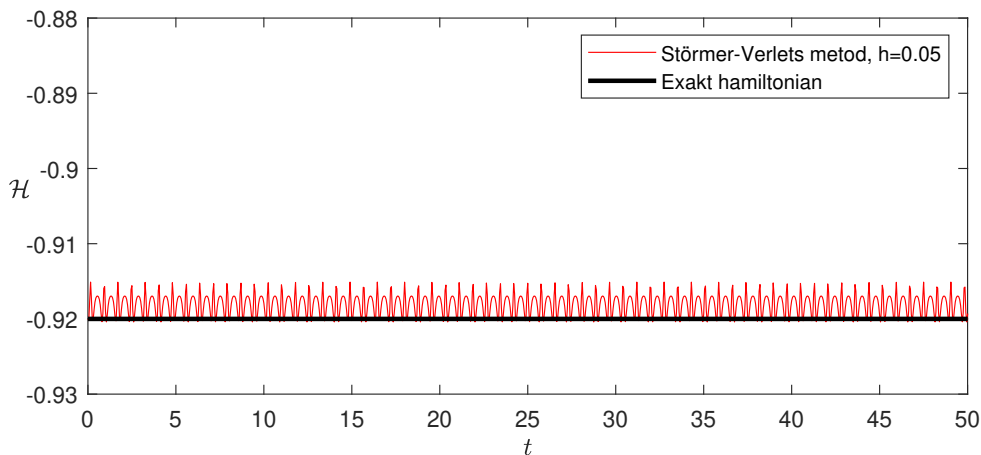


Figur 11: Jämförelse mellan två numeriskt framtagna hamiltonianer plottade mot tiden för ett MD-problem i 1D.

hos hamiltonianen minskar med steglängden, vilket stämmer överens med teorin eftersom det tyder på att Störmer-Verlets metod ger ett mer precist resultat om steglängden minskar.



(a) Hamiltonianen framtagen med Störmer-Verlets metod med steglängden $h = 0.1$ tidsenheter.



(b) Hamiltonianen framtagen med Störmer-Verlets med steglängden $h = 0.05$ tidsenheter.

Figur 12: Två jämförande grafer över hamiltonianen framtagen med Störmer-Verlets metod med $h = 0.1$ respektive $h = 0.05$ tidsenheter.

Vi har nu fått förståelse för att det är essentiellt att använda sig av en symplektisk numerisk metod likt Störmer-Verlets metod vid beräkningar på MD-problem. Samt har vi även fått förståelse för hur steglängden påverkar noggrannheten i våra numeriska lösningar när Störmer-Verlets metod appliceras på ett hamiltonskt system.

8 Slutsats

Denna uppsats har tydliggjort att geometrisk numerisk integration spelar en stor roll för hur väl numeriska metoder kan modellera hamiltonska system. I synnerhet har vi fått förståelse för hur symplektiska metoder likt Störmer-Verlets metod och Eulers symplektiska metod har många fördelar över metoder som Eulers explicita metod och Eulers implicita metod. Slutligen förstår vi därför vikten av att välja rätt numerisk metod vid lösning av hamiltonska system då fel metod lättare leder till dåliga approximationer och missvisande beteenden av hamiltonska system.

Referenser

- [1] Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric Numerical Integration - Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. 2:a Uppl. Berlin: Springer; 2006.
- [2] AGE OF THE EARTH. National Geographic Society;. Hämtad 2022-05-03. Hämtad från: https://www.nationalgeographic.org/topics/resource-library-age-earth/?q=&page=1&per_page=25.
- [3] Eriksson T. konserveringslagen. Nationalencyklopedin;. Hämtad 2022-03-10. Hämtad från: <http://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/lång/konserveringslagar>.
- [4] Griffiths DF, Higham DJ. Numerical Methods for Ordinary Differential Equations - Initial Value Problems. Springer Undergraduate Mathematics Series. Springer-Verlag London, Ltd., London; 2010.
- [5] Persson A, Lars-Christer B. Analys i en variabel. Lund: Studentlitteratur; 2010.
- [6] fasrum. Nationalencyklopedin;. Hämtad 2022-02-15. Hämtad från: <http://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/lång/fasrum>.
- [7] Hairer E, Lubich C, Wanner G. I: Iserles A, redaktör. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer–Verlet method. vol. 12 av Acta Numerica. Cambridge University Press; 2003. s. 399–450.
- [8] Leimkuhler B, Matthews C. Molecular Dynamics - With Deterministic and Stochastic Numerical Methods. vol. 39 av Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer, Cham; 2015.
- [9] Leimkuhler B, Reich S. Simulating Hamiltonian Dynamics. vol. 14 av Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge; 2004.

Appendix A Bilagor och Beräkningar

I appendix samlas beräkningar som inte är nödvändiga för läsarens förståelse av rapporten och som på grund av deras längd riskerar att få läsningen att stanna upp. Eftersom dessa beräkningar ändå kan vara intressanta för läsaren placeras de här. Även koden som producerar graferna till kapitel 7 har samlats i appendix A.7 och A.8. Kod för övriga figurer ges vid förfrågan.

Appendix A.1 Inledande teorier

I detta appendix ingår framtagandet av de fyra stegmetoderna: Eulers explicita, implicita symplektiska och Störmer-Verlets metoder.

A.1.1 Eulers explicita metod

Antag att \mathbf{y} är en lösning till

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)) \\ \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \end{cases} \quad (16)$$

Taylor expansion av \mathbf{y} kring t_0 för något litet h ger

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t_0 + h) &= \mathbf{y}(t_0) + h\dot{\mathbf{y}}(t_0) + \mathcal{O}(h^2) \\ &\approx \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_0) =: \mathbf{y}_1 \end{aligned}$$

där vi utnyttjar att \mathbf{y} är en lösning till (16) samt ignorerar kvadrat och högre ordnings termer. Låt $t_1 = t_0 + h$ då blir $\mathbf{y}(t_1) \approx \mathbf{y}_1$, generalisera till godtyckligt steg i var på Eulers explicita metod fås. Framtagandet av Eulers implicita metod bygger vidare på denna metod.

A.1.2 Eulers implicita metod

Antag \mathbf{y} är en lösning till (16) på intervallet $[t_0, \tilde{t}]$ med likformig fördelning $t_0 < t_1 < \dots < t_n = \tilde{t}$ med $t_i - t_{i-1} = h$ för alla $i = 1, \dots, n$. Eulers explicita metod kan sägas applicerad baklänges⁴ på lösningen till (16) där \mathbf{y}_{i+1} byts ut mot \mathbf{y}_i och vice versa samt byta ut h mot $-h$ blir $\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_{i+1} - h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{i+1})$. En omskrivning ger sedan Eulers implicita metod. Appliceringen av båda dessa metoder på ett partitionerat system ger Eulers symplektiska metod.

A.1.3 Eulers symplektiska metod

Antag \mathbf{u} och \mathbf{v} är en lösning till det partitionerade systemet

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{a}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{b}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{cases} \quad (17)$$

med startvärden $\mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0$ och $\mathbf{v}(t_0) = \mathbf{v}_0$. Vi kan då utföra Eulers explicita metod på \mathbf{u} och Eulers implicita metod på \mathbf{v} för att få

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_{i+1}) \quad (18)$$

$$\mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{v}_i + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_{i+1}). \quad (19)$$

Därför är Eulers symplektiska metod även känt som Eulers *semi-implicita* metod. Genom att göra liknande omskrivning som för omvandlingen av Eulers explicita metod till Eulers implicita metod, det vill säga $\mathbf{u}_{i+1} \leftrightarrow \mathbf{u}_i$, $\mathbf{v}_{i+1} \leftrightarrow \mathbf{v}_i$ och $h \leftrightarrow -h$ fås den andra versionen av Eulers symplektiska metod

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_i &= \mathbf{u}_{i+1} - h\mathbf{a}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i) \\ \mathbf{v}_i &= \mathbf{v}_{i+1} - h\mathbf{b}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i), \end{aligned}$$

⁴Därför kallas även Eulers implicita och explicita metoder Eulers *bakåtmetod* respektive Eulers *framåtmetod*.

vilket är ekvivalent med

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i) \quad (20)$$

$$\mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{v}_i + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_{i+1}, \mathbf{v}_i). \quad (21)$$

Applicerar vi Eulers symplektiska metod två gånger fås Störmer-Verlets metod.

A.1.4 Störmer-Verlets metod

Antag vi har ett partitionerat system likt (17) där $\mathbf{a}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{v}$ och $\mathbf{b}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ samt \mathbf{u} och \mathbf{v} är lösningar så att

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{f}(\mathbf{u}). \end{cases}$$

Utför vi nu Eulers symplektiska metod (19) med steglängden $h/2$ och halva indexeringar får vi

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{i+1/2} &= \mathbf{v}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{u}_i) \\ \mathbf{u}_{i+1/2} &= \mathbf{u}_i + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{i+1/2}. \end{aligned}$$

Utför vi Eulers andra symplektiska metod (21) med steglängden $h/2$ och halva indexeringar fås för \mathbf{u}

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{i+1} &= \mathbf{u}_{i+1/2} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{i+1/2} \\ &= \mathbf{u}_i + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{i+1/2} + \frac{h}{2}\mathbf{v}_{i+1/2} \\ &= \mathbf{u}_i + h\mathbf{v}_{i+1/2} \end{aligned}$$

och för \mathbf{v}

$$\mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{v}_{i+1/2} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1/2})$$

vilket sammanlagt ger Störmer-Verlets metod med steglängden h

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{i+1/2} &= \mathbf{v}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{u}_i) \\ \mathbf{u}_{i+1} &= \mathbf{u}_i + h\mathbf{v}_{i+1/2} \\ \mathbf{v}_{i+1} &= \mathbf{v}_{i+1/2} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{u}_{i+1}). \end{aligned}$$

Appendix A.2 Framtagninga av hamiltonianen för Keplers problem

I detta appendix samlas beräkningar tillhörande avsnitt 3.2 om Keplers problem.

Från (5) kan vi skriva

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p} \\ \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3}. \end{cases}$$

Utnyttjar vi sedan omskrivningen av $\dot{\mathbf{p}}$ med hjälp av kedjeregeln

$$-\frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3} = \dot{\mathbf{p}} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{p}.$$

Varifrån vi kan separera variablerna

$$\mathbf{p}d\mathbf{p} = -\frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3}d\mathbf{q}$$

och sedan integrera för att få

$$\int \mathbf{p} \partial \mathbf{p} = - \int \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3} \partial \mathbf{q}. \quad (22)$$

Notera att integralerna behandlar flera dimensioner. Vi kan se att vänsterledet i (22) ger $\frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2} + C$ för någon konstant $C \in \mathbb{R}$. Högerledet fås till $\frac{1}{\|\mathbf{q}\|}$ genom att observera att $\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} = -\frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|^3}$. Sätter vi in höger- och vänsterledet i (22) får vi

$$\frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2} + C = \frac{1}{\|\mathbf{q}\|}$$

varefter en omskrivning ger hamiltonianen \mathcal{H}

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) := \frac{\|\mathbf{p}\|^2}{2} - \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} = C.$$

Här ser vi även att hamiltonianen är konstant.

Appendix A.3 Störmer-Verlet metods bevarande av linjära invarianter

I delavsnitt 2.4.4 introducerade vi att numeriska lösningar med hjälp av Störmer-Verlets metod följer iterationsformeln

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} &= \dot{\mathbf{y}}_i + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) \\ \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} \\ \dot{\mathbf{y}}_{i+1} &= \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_{i+1}). \end{cases}$$

Notera att vi använder oss av annorlunda notationer här än i delavsnitt 2.4.4 för att tydligare kunna tillämpa metoderna på ekvation (6). Fortsatt är vi endast intresserade av \mathbf{y} och inte $\dot{\mathbf{y}}$ varför vi kan skriva

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} = \mathbf{y}_i + h \left(\dot{\mathbf{y}}_i + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) \right) = \mathbf{y}_i + h \dot{\mathbf{y}}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) = \mathbf{y}_i + h \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i)$$

där den sista likheten kommer från ekvation (6). Om vi nu studerar vår linjära invariant får vi att

$$\mathbf{c}^T \mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{c}^T \left(\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) \right) = \mathbf{c}^T \mathbf{y}_i + h \mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) + \frac{h^2}{2} \mathbf{c}^T \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) = \mathbf{c}^T \mathbf{y}_i$$

där den sista likheten kommer från definition 4.2. Alltså bevarar Störmer-Verlets metod linjära invarianter.

Appendix A.4 Störmer-Verlet metods misslyckande att generellt bevara kvadratiska invarianter

Likt avsnitt A.3 kan vi skriva om

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} &= \dot{\mathbf{y}}_i + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_i) \\ \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i + h \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} \\ \dot{\mathbf{y}}_{i+1} &= \dot{\mathbf{y}}_{i+1/2} + \frac{h}{2} \mathbf{f}(\mathbf{y}_{i+1}) \end{cases}$$

till

$$\mathbf{y}_{i+1} = \mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i$$

där $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}(\mathbf{y}_i)$. Därefter kan vi studera Störmer-Verlets metod applicerad på den kvadratiske invarianten $Q(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^T C \mathbf{y}$ för att se om den kvadratiske invarianten bevaras.

$$\begin{aligned}
\mathbf{y}_{i+1}^T C \mathbf{y}_{i+1} &= \left(\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i \right)^T C \left(\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i \right) \\
&= \left(\mathbf{y}_i^T + h \mathbf{f}_i^T + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i^T \right) C \left(\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i \right) \\
&= \left(\mathbf{y}_i^T C + h \mathbf{f}_i^T C + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i^T C \right) \left(\mathbf{y}_i + h \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i \right) \\
&= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + h \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i + h \mathbf{f}_i^T C \mathbf{y}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i \\
&\quad + \frac{h^3}{2} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{y}_i + \frac{h^3}{2} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^4}{4} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i
\end{aligned}$$

Eftersom vi vet att vi har en invariant Q vet vi också att $\mathbf{y}_i^T C \mathbf{f}_i = \mathbf{f}_i^T C \mathbf{y}_i = 0$ enligt definition 4.3. Därför försvinner flertalet termer och vi får uttrycket

$$\begin{aligned}
\mathbf{y}_{i+1}^T C \mathbf{y}_{i+1} &= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^3}{2} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^3}{2} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^4}{4} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i \\
&= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + h^2 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + h^3 \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i + \frac{h^4}{4} \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i \\
&= \mathbf{y}_i^T C \mathbf{y}_i + \left(h^2 + h^3 + \frac{h^4}{4} \right) \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i
\end{aligned}$$

där $(h^2 + h^3 + h^4/4) \mathbf{f}_i^T C \mathbf{f}_i \neq 0$ generellt sett. Alltså bevarar inte Störmer-Verlets metod kvadratiske invarianter i allmänhet.

Appendix A.5 Bevis av sats 4.1

Bevis. Låt $I(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^T (B \mathbf{q} + \mathbf{b})$ vara en kvadratisk invariant. B är en konstant symmetrisk matris och \mathbf{b} är en konstant vektor av korresponderande dimension. Definition 4.1 säger att

$$\mathbf{f}(\mathbf{q})^T (B \mathbf{q} + \mathbf{b}) + \mathbf{p}^T B \mathbf{p} = 0 \quad (23)$$

för alla \mathbf{p}, \mathbf{q} , vilka är övervektorer med index $\mathbf{p}_k \in \mathbb{R}^m$ och $\mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^m$. Nu vill vi visa att Störmer-Verlets metod bevarar invarianten mellan två iterationer. Detta gör vi genom att först skriva om invarianten för iteration $i+1$. Därefter kommer vi utnyttja ekvation (23) för att visa att invarianten är bevarad. Således får vi med delavsnitt 2.4.4:s formulering av Störmer-Verlets metod att

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}_{i+1}^T (B \mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) &= \left(\mathbf{p}_{i+1/2} + \frac{h}{2} \mathbf{f}_{i+1} \right)^T (B(\mathbf{q}_i + h \mathbf{p}_{i+1/2}) + \mathbf{b}) \\
&= \left(\mathbf{p}_{i+1/2}^T + \frac{h}{2} \mathbf{f}_{i+1}^T \right) (B \mathbf{q}_i + h B \mathbf{p}_{i+1/2} + \mathbf{b}) \\
&= \mathbf{p}_{i+1/2}^T B \mathbf{q}_i + h \mathbf{p}_{i+1/2}^T B \mathbf{p}_{i+1/2} + \mathbf{p}_{i+1/2}^T \mathbf{b} \\
&\quad + \frac{h}{2} \mathbf{f}_{i+1}^T B \mathbf{q}_i + \frac{h^2}{2} \mathbf{f}_{i+1}^T B \mathbf{p}_{i+1/2} + \frac{h}{2} \mathbf{f}_{i+1}^T \mathbf{b}.
\end{aligned}$$

För alla $\mathbf{p}_{i+1/2}$ -termer utom termen $h\mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}$ utnyttjar vi att $\mathbf{p}_{i+1/2} = \mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i$ enligt formuleringen av Störmer-Verlets metod från delavsnitt 2.4.4. Då får vi att

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{i+1}^T(B\mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) &= \left(\mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i\right)^T B\mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2} + \left(\mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i\right)^T \mathbf{b} \\ &\quad + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{q}_i + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\left(\mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i\right) + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T \mathbf{b}. \\ &= \mathbf{p}_i^T B\mathbf{q}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i^T B\mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2} + \mathbf{p}_i^T \mathbf{b} + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i^T \mathbf{b} \\ &\quad + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{q}_i + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{p}_i + \frac{h^3}{4}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{f}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T \mathbf{b}.\end{aligned}$$

Låt oss nu arrangera om termerna så att vi får något som liknar ekvation (23).

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{i+1}^T(B\mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) &= \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i^T B\mathbf{q}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i^T \mathbf{b} + \frac{h}{2}\mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2} \\ &\quad + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{q}_i + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{p}_i + \frac{h^3}{4}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{f}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T \mathbf{b} + \frac{h}{2}\mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2} \\ &= \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_i^T B\mathbf{q}_i + \mathbf{f}_i^T \mathbf{b} + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &\quad + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{q}_i + h\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{p}_i + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}_{i+1}^T B\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{i+1}^T \mathbf{b} + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &= \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &\quad + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_{i+1}^T\left(B\mathbf{q}_i + hB\mathbf{p}_i + \frac{h^2}{2}B\mathbf{f}_i + \mathbf{b}\right) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &= \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &\quad + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_{i+1}^T\left(B\left(\mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_i + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}_i\right) + \mathbf{b}\right) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right).\end{aligned}$$

Enligt Störmer-Verlets metod är också $\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_{i+1/2} = \mathbf{q}_i + h\mathbf{p}_i + \frac{h}{2}\mathbf{f}_i$ varför vi ytterligare får att

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{i+1}^T(B\mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) &= \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right) \\ &\quad + \frac{h}{2}\left(\mathbf{f}_{i+1}^T(B\mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) + \mathbf{p}_{i+1/2}^T B\mathbf{p}_{i+1/2}\right).\end{aligned}$$

Men ekvation (23) säger nu att de sista två termerna är noll. Följaktligen får vi att

$$\mathbf{p}_{i+1}^T(B\mathbf{q}_{i+1} + \mathbf{b}) = \mathbf{p}_i^T(B\mathbf{q}_i + \mathbf{b}) \quad \text{för alla } i$$

och därmed är denna kvadratiske invariant bevarad av Störmer-Verlets metod [7]. \square

Appendix A.6 Bevis av sats 6.1

Bevis. Om vi låter $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ kan vi skriva om vårt hamiltonska problem (13) på den mer kompakta formen

$$\dot{\mathbf{y}} = J^{-1}\nabla\mathcal{H}(\mathbf{y}) \quad \text{där } J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$$

och I är identitesmatrisen i samma dimension som \mathbf{p} och \mathbf{q} . Vi vill nu visa genom ett induktionsbevis att alla koefficientfunktioner \mathbf{f}_j i det modifierade systemet av ODE:er i ekvation (11) kan skrivas som

$$\mathbf{f}_j(\mathbf{y}) = J^{-1}\nabla\mathcal{H}_j(\mathbf{y}). \quad (24)$$

1. För $j = 1$ stämmer ekvationen ovan eftersom $\mathbf{f}_1(\mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}) = \dot{\mathbf{y}} = J^{-1}\nabla\mathcal{H}(\mathbf{y})$.

2. Antag sedan att ekvation (24) stämmer för $j = r$, där r är ett godtyckligt heltal.

3. Fortsatt vill vi nu visa att ekvationen (24) gäller för $j = r + 1$. Vi gör detta genom att först studera den trunkerade modifierade ekvationen (12), det vill säga

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}) + h\mathbf{f}_2(\mathbf{y}) + \dots + h^{r-1}\mathbf{f}_r(\mathbf{y}).$$

Ekvationen ovan är nämligen ett hamiltonskt system enligt antagandet i **2.** med hamiltonianen

$$\mathcal{H}_{trunk}(\mathbf{y}) = \mathcal{H}(\mathbf{y}) + h\mathcal{H}_2(\mathbf{y}) + h^2\mathcal{H}_3(\mathbf{y}) + \dots + h^{r-1}\mathcal{H}_r(\mathbf{y})$$

vars flöde är $\tilde{\varphi}_{r,t}$. Låt oss nu jämföra $\tilde{\varphi}_{r,t}$ med flödet för det modifierade systemet av ODE:er (11). Essentiellt innebär en sådan jämförelse att vi också jämför vår symplektiska metods enstegsavbildning Φ_h med $\tilde{\varphi}_{r,t}$. Och eftersom flödet hos $\tilde{\varphi}_{r,t}$ stämmer överens med flödet hos Φ_h upp till $j = r$ kan vi förstå att dessa kommer att vara lika varandra upp till en term h^{r+1} . Mer precist säger Hairer, Lubich och Wanner [7] att Φ_h relaterar till $\tilde{\varphi}_{r,t}$ genom

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}_{r,h}(\mathbf{y}) + h^{r+1}\mathbf{f}_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2}).$$

Men då gäller det också att

$$\Phi'_h(\mathbf{y}) = \tilde{\varphi}'_{r,h}(\mathbf{y}) + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2}). \quad (25)$$

Definition 5.3 ger att Φ_h och $\tilde{\varphi}_{r,h}$ är symplektiska avbildningar. Kom ihåg att definition 5.3 säger att symplektiska metoder är symplektiska om de appliceras på ett hamiltonskt system. Faktumet att Φ_h och $\tilde{\varphi}_{r,h}$ är symplektiska avbildningar gör att vi kan teckna uttrycket

$$J = \Phi'_h(\mathbf{y})^T J \Phi'_h(\mathbf{y}). \quad (26)$$

Men om man taylorutvecklar $\tilde{\varphi}_{r,h}$ får vi att

$$\tilde{\varphi}_{r,h}(\mathbf{y}) = \mathbf{y} + \mathcal{O}(h)$$

vilket vid derivering ger

$$\tilde{\varphi}'_{r,h}(\mathbf{y}) = I + \mathcal{O}(h).$$

Om vi stoppar in detta i ekvation (25) får vi att

$$\Phi_h(\mathbf{y}) = I + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2}).$$

Om vi ytterligare sätter in detta i ekvation (26) får vi att

$$\begin{aligned} J &= \Phi'_h(\mathbf{y})^T J \Phi'_h(\mathbf{y}) \\ &= (I + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2}))^T J (I + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2})) \\ &= (I^T J + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y})^T J + \mathcal{O}(h^{r+2})) (I + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathcal{O}(h^{r+2})) \\ &= I^T J I + I^T J h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + h^{r+1}\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y})^T J I + \mathcal{O}(h^{r+2}) \\ &= J + h^{r+1} (J\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y}) + \mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y})^T J) + \mathcal{O}(h^{r+2}). \end{aligned}$$

Följaktligen kan det konstateras att matrisen $J\mathbf{f}'_{r+1}(\mathbf{y})$ är symmetrisk och den vektorvärda funktionen $J\mathbf{f}_{r+1}(\mathbf{y})$ är därför gradient till någon skalär funktion $\mathcal{H}_{r+1}(\mathbf{y})$ [1, Kapitel IX.3.1]. Alltså stämmer ekvation (24) även för $j = r + 1$ eftersom

$$\begin{aligned} J\mathbf{f}_{r+1}(\mathbf{y}) &= \nabla\mathcal{H}_{r+1}(\mathbf{y}) \\ J^{-1}J\mathbf{f}_{r+1}(\mathbf{y}) &= J^{-1}\nabla\mathcal{H}_{r+1}(\mathbf{y}) \\ \mathbf{f}_{r+1}(\mathbf{y}) &= J^{-1}\nabla\mathcal{H}_{r+1}(\mathbf{y}). \end{aligned}$$

1., 2. och 3. tillsammans ger då via induktion att sats 6.1 är bevisad [1, Kapitel IX.3.1]. \square

Appendix A.7 MATLAB-kod för Lennard-Jonespotentialen för argon

Nedan återfinns MATLAB-koden som användes för att producera figur 10.

```
1 clear
2 clc
3
4 %Lennard-Jonespotential of argon
5
6 %constants
7 kb = 1.38e-23;      %J/K
8 eps= 119.8*kb;    %J
9 s = 3.41e-10;     %m
10 rm = 3.8276e-10; %m
11
12 %Lennard-Jonespotential
13 V=@(r) 4*eps*s^6*(s^6*r.^(-12)-r.^(-6));
14 %distance vector
15 r=linspace(1e-15,8e-10,1000);
16
17 %zero energy
18 er=linspace(1e-15,8e-10,50);
19 E0=zeros(1,length(er));
20
21 %plot Lennard-Jones potential
22 plot(r,V(r),'r')
23 hold on
24 %plot zero energy
25 plot(er,E0,'k.','MarkerSize',0.5)
26 %plot where V intersect x-axis
27 plot(s,V(s),'k.','MarkerSize',20)
28 txt = '(\sigma_{kj},0)';
29 text(s+1e-11,V(s)-1.8e-22,txt,'FontSize',15)
30 %plot the minimum value of Lennard-Jones potential and bond length
31 plot(rm,V(rm),'k.','MarkerSize',20)
32 txt = '(r_m,\epsilon_{kj})';
33 text(rm+1e-11,V(rm)-1e-22,txt,'FontSize',15)
34
35 axis([0 8e-10 -2e-21 2e-21])
36 xlabel('$r_{kj}$ [m'],'Interpreter','latex')
37 ylabel('$V_{kj}$ [J'],'Interpreter','latex')
38 set(get(gca,'ylabel'),'rotation',0)
```

Appendix A.8 Jämförelse mellan Eulers explicita metod och Störmer-Verlets metod applicerad på ett endimensionellt MD-problem

I detta appendix presenteras MATLAB-kod för att genomföra beräkningarna i exempel 7.1. Appendix A.8.1 presenteras koden för Störmer-Verlets metod. Appendix A.8.2 presenteras koden för Eulers explicita metod.

A.8.1 MATLAB-kod för Störmer-Verlets metod applicerad på endimensionellt MD-problem

```
1 clear
2 clc
3
4 %Störmer-Verlet applied on Hamiltonian system:
5 %   H(p,r)=p^2/2+r^(-12)-2r^(-6)
6
7 %iteration information
8 N=5e4;      %number of points
9 h=1e-1;     %step size
10 t=(0:N).*h; %time vector
11
12 %Our hamiltonian system pdot=-dH/dr=F(r), rdot=dH/dq=p
13 F=@(r) -(-12*r.^(-13)+12*r.^(-7));
```

```

14
15 %before we iterate we need to create spaces for our values of the functions
16 p =zeros(size(t));
17 r =zeros(size(t));
18 p_halv =zeros(size(t));
19
20 %initial values
21 p(1)=-0.4;
22 r(1)=1;
23
24 %-----Stormer-Verlet iteration-----
25 for i=1:N
26     p_halv(i+1)= p(i)+h/2*F(r(i));
27     r(i+1) = r(i)+h*p_halv(i+1);
28     p(i+1) = p_halv(i+1)+h/2*F(r(i+1));
29 end
30
31 %our total energy in the Hamiltonian
32 H = p.^2/2+(r.^(-12)-2*r.^(-6));
33
34 %our exact Hamiltonian
35 Hexact = H(1)*ones(1,length(H));
36
37 %plot H against t
38 plot(t,H,'r')
39 hold on
40 %plot exact energy of Hamiltonian
41 plot(t,Hexact,'k','LineWidth',2)
42 ylabel('$ \mathcal{H}$','Interpreter','latex')
43 xlabel('$t$','Interpreter','latex')
44 set(get(gca,'ylabel'),'rotation',0)
45 axis([0 50 -0.93 -0.88])
46 legend('Stormer-Verlets metod, h=0.1','Exakt hamiltonian')

```

A.8.2 MATLAB-kod för Eulers explicita metod applicerad på endimensionellt MD-problem

```

1 clear
2 clc
3
4 %Stormer-Verlet applied on Hamiltonian system:
5 % H(p,r)=p^2/2+r^(-12)-2r^(-6)
6
7 %iteration information
8 N=5e5; %number of points
9 h=1e-3; %step size
10 t=(0:N).+h; %time vector
11
12 %Our hamiltonian system pdot=-dH/dr=F(r), rdot=dH/dq=p
13 F=@(r) -(-12*r.^(-13)+12*r.^(-7));
14
15 %before we iterate we need to create spaces for our values of the functions
16 p =zeros(size(t));
17 r =zeros(size(t));
18 p_halv =zeros(size(t));
19
20 %initial values
21 p(1)=-0.4;
22 r(1)=1;
23
24 %-----Explicit Euler method-----
25 for i=1:N
26     r(i+1) = r(i)+h*p(i);
27     p(i+1) = p(i)+h*F(r(i));
28 end
29
30 %our total energy in the Hamiltonian
31 H = p.^2/2+(r.^(-12)-2*r.^(-6));
32

```

```
33 %plot H angainst t
34 plot(t,H, 'b', 'LineWidth',2.5)
35 ylabel('$ \mathcal{H} $','Interpreter','latex')
36 xlabel('$t$','Interpreter','latex')
37 set(get(gca,'ylabel'),'rotation',0)
38 axis([0 50 -1 0])
39 legend('Eulers explicita metod, h=0.001')
```