1.4.14

בס"ד

הרצאה - לפני פסח

N חלקיקים ב-$\mathbb{R}^d$

מסות $m_1, \dots, m_N$

מיקומים $q_1, \dots, q_N \in \mathbb{R}^d$

מהירויות $v_1, \dots, v_N \in \mathbb{R}^d$

תנע: $p_i = m_i v_i$, $q_i' = v_i = \frac{1}{m_i} p_i$

חוקי ניוטון: $F = ma$ כאשר $a = v_i' = \frac{1}{m_i} p_i'$

$$p = \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{Nd} \quad , \quad q = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{Nd}$$

$$q_i' = \frac{1}{m_i} p_i$$

$$p_i' = -\nabla_{q_i} V(q_1, \dots q_N)$$

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & m_N \end{pmatrix}$$

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

אין תלות מפורשת ב-t ולכן הפונקציה לא תלויה ב-t

$$\left.\begin{aligned} q' &= \nabla_p H(q,p) \\ p' &= -\nabla_q H(q,p) \end{aligned}\right\} \quad \text{משוואות (המנוגדות של) המילטון}$$

<u>תכונות</u>: בהינתן תנאי התחלה q_0, p_0 נפתור את המערכת של אפ"ד עם תנאי ההתחלה ונמצא $q(t), p(t)$

① H גודל נשמר, כלומר $H(t) = H(q(t), p(t)) =$

$$H'(t) = \nabla_q H \cdot q' + \nabla_p H \cdot p' = \nabla_q H \cdot \nabla_p H + \nabla_p H (-\nabla_q H) = 0$$

② היפוך בזמן

נניח תנאי התחלה בזמן t_0:

$$q(t_0) = q_0$$
$$p(t_0) = p_0$$

(השטף בפתרון בזמן $t_1 > t_0$ $\qquad \Delta t = t_1 - t_0 \qquad q(t_1) = q_1$

$$p(t_1) = p_1 .$$

<u>הגדרה</u>: העתקה בזמן flow map, ישנו מפרקים תנאי ההתחלה.

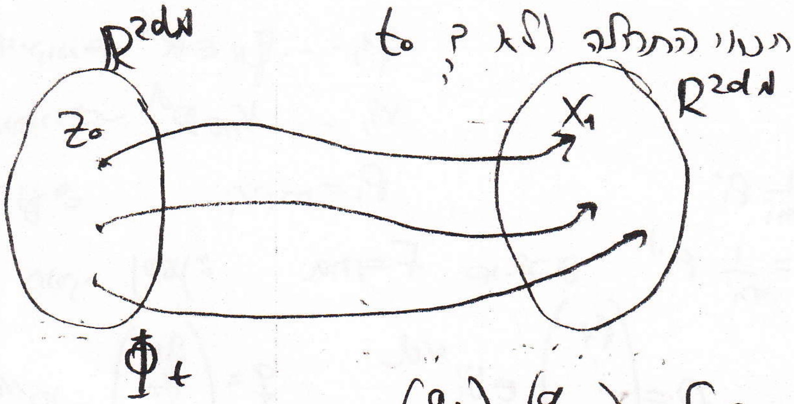
דרך להסתכל על הדינמיקה של המרחב מתוך העתקה.

המרחב לוקח אותנו מתנאי ההתחלה $z_0 = \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}$ ל: $z_1 = \begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q(t_1) \\ p(t_1) \end{pmatrix}$

הפתרון תלוי רק בתנאי התחלה ולא ב- t_0 :

כי
$$\begin{cases} q' = \nabla_p H \\ p' = -\nabla_q H \end{cases}$$
אוטונומית – מפורשת ב t.

הפתרון תלוי רק בתנאי התחלה ולא ב t_0



ניתן להפוך בזמן אם נתחיל ב:
$$\Phi_{-t}\begin{pmatrix} q_1 \\ -p_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_0 \\ -p_0 \end{pmatrix}$$
לזמן t אחורה

תכונות ה Φ

$$\Phi_{-t} = \Phi_t^{-1}$$

1. $\Phi_0 = id$

2. לפי משפט קיום ויחידות של מד"ר $\Phi_{t+s} = \Phi_t \circ \Phi_s = I_s \circ I_t$

הגדרה של תכונות הללו היא: קבוצה semi-group אינווה

3. מתוך תכונות ויחידות פתרון של מד"ר Φ_t חח"ע

נסמן $z(t,z_0)$ הפתרון בזמן t עם תנאי התחלה z_0

$z(t,z_0) = \Phi_t z_0$ בזמן t ובתנאי התחלה z_0

הגדרה: פונקציה $G: \mathbb{R}^{2dN} \to \mathbb{R}$ (מרחב הפאזה) נקרא אינטגרל ראשון / או גודל נשמר / או חוק שימור אם:

$$G(z(t;z_0)) = \underbrace{G(z_0)}_{\text{קבוע}}$$

$$G(\Phi_t z_0) = G(z_0)$$

דוגמא: ההמילטוניאן. תנאי מספיק והכרחי:

$$G'(z(t;z_0))' = 0$$

$$= \underbrace{\nabla_z G}_{\text{גרדיאנט של } G \text{ לפי } z.} \cdot z' = \nabla_q G \cdot q' + \nabla_p G \cdot p' = \nabla_q G \nabla_p H - \nabla_p G \nabla_q H = 0$$

סוגרי פואסון:

$$\{G,H\} = \sum_{i=1}^{dN} \frac{\partial G}{\partial q_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_{i=1}^{dN} \frac{\partial G}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

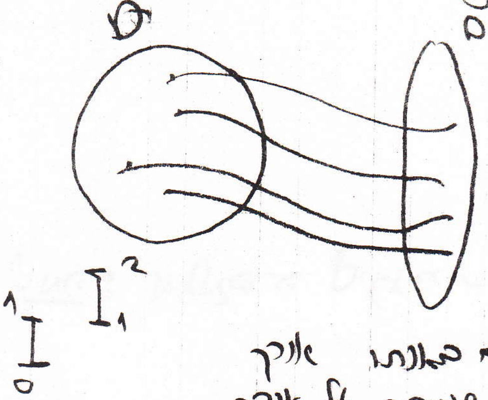
אינטואיציה לבדוק אם גודל נשמר לחשב את סוגר פואסון ולבדוק שמתאפס

תכונה: שימור נפח/ליוביל (משפט) / מצב

<u>משפט</u>: לכל קבוצה פתוחה וחסומה $D \subset \mathbb{R}^{2n}$ מתקיים:

$$\text{Volume}(D) = \text{Volume}(\Phi_t D)$$ נפח

$$\text{Volume}(D) = \int_D 1 \, dq \, dp$$

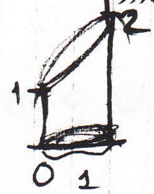


$$D_t = \Phi_t D$$

<u>דוגמה</u>: ① $x' = 1$

$x = x_0 + t$ ← התקדם באותו אורך

מגדר שומרת על אורך



② $x' = x$ שומרת על נפח

מערכת דינמית המילטונית

הנפח בעבר לא משתנה תחת הזרימה.

נרצה להגדיר שיטה נומרית שיש לה את אותן התכונות 1) סימטריה בזמן 2) שימור אנרגיה 3) שימור נפח

<u>המלצה</u>: ספר V.I. Arnold — אספרה את המכניקה הניוטונית.

<u>משפט</u>: נתונה מד"ר $x' = f(x)$ עם פתרון $x(t)$ מוגדר לכל זמן t

נגדיר את מפת הזרימה $\Phi_t(x_0) = x(t; x_0)$

$D_0 \subset \mathbb{R}^n$ סגורה $D_t = \Phi_t D_0$

הנפח של D_t $$v(t) = \int_{D_t} dx$$

אז אם $\operatorname{div} f = 0$ אזי $v(t) = v(0)$ (תנאי מספיק לשימור נפח)

ישנן שומרות נפח.

<u>מסקנה</u>: תחת משוואות המילטון
$$\begin{cases} q' = \nabla_p H \\ p' = -\nabla_q H \end{cases} \quad f$$

$$\operatorname{div} f = \nabla_q^T \nabla_p H + \nabla_p^T (-\nabla_q H) = 0$$
לגזור לפי q

← משוואות המילטון שומרות על נפח.

<u>ה.ז</u>: אם $\operatorname{div} f = 0$ אזי $v'(t) = 0$

בלי הגבלת הכלליות $t = 0$

נוכיח כי $v'(0) = 0$ מספיק

$$v(t) = \int_{D_t} dy$$

לפי ההגדרה

ונחשב את Φ_t בקירוב, הנפח של D_t הוא.

החלפת משתנים: $x \mapsto y = \Phi_t x$

$$V(t) = \int_{D_0} \det \underbrace{\frac{\partial \Phi_t(x)}{\partial x}}_{1+\frac{\partial f}{\partial x}t + O(t^2)} \cdot dx$$

$$\boxed{\Phi_t = 1 + f \cdot t + O(t^2)}$$

למה: מאלגברה לינארית עבור $\varepsilon \ll 1$

$$\det(1 + \underbrace{\varepsilon A}_{\text{הפרעה}}) = \underbrace{1}_{\det(1)} + \varepsilon \operatorname{Tr} A + O(\varepsilon^2)$$

נציב את זה ב־$V(t)$ ונקבל: $\varepsilon = t$

$$V(t) = \int_{D_0} \Big[1 + t \underbrace{\operatorname{Tr}\frac{\partial f}{\partial x}}_{\operatorname{div} f} + O(t^2)\Big] dt$$

$$f(x) = \begin{pmatrix} f_1(x_1 \dots x_n) \\ f_2(x_1 \dots x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots x_n) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \dots & , & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\boxed{\operatorname{Tr}\frac{\partial f}{\partial x} = \operatorname{div} f}$$

וקיבלנו:

$$V(t) = \underbrace{\int_{D_0} dx}_{V_0} - t \int_{D_t} \operatorname{div} f \, dx + O(t^2)$$

$$V(t) = V(0) + t \int_{D_0} \operatorname{div} f \, dx + O(t^2)$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{V'(0) = 0}$$

— וזו התכונה של שימור, מכיוון שהנפח נשמר
תחת כל זרימה המילטוניאנית

משוואת המילטון :

$$q' = \nabla_p H$$
$$p' = -\nabla_q H$$

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

Semi-implicit Euler –

הצגת שיטה סתומה

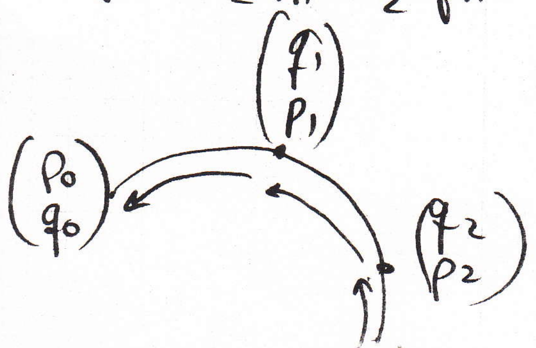
$$\begin{array}{ll} \text{FEi} & \left\{ \begin{array}{l} q_{n+1} = q_n + h M^{-1} p_n \\ p_{n+1} = p_n - h \nabla V(q_{n+1}) \end{array} \right. \\ \text{BEi} & \end{array}$$

דוגמא: $V(q) = \frac{1}{2} q^2$ ראינו שיש חוק שימור מקורב

$$R_n = \frac{1}{2} p_n^2 + \frac{1}{2} q_n^2 - \frac{1}{2} h p q$$

(השגיאה תשמר היא $O(h)$ לא הולכת וגדלה)

סימטריות בזמן:



צעד קדימה:

$$q_1 = q_0 + h M^{-1} p_0$$
$$p_1 = p_0 - h \nabla V(q_1)$$

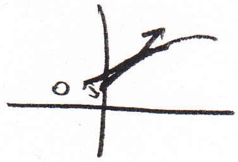
צעד אחורה:

ההיפוך

$$p_0 = p_1 + h \nabla V(q_1)$$
$$q_0 = q_1 - h M^{-1} p_0$$

כמו שגיאה שלצעד קדימה מתהפך בזמן
כמו אפס. (Semi-Implicit Euler)

ב- FE (פורוורד אוילר) **זה לא נכון.** (צעד קדימה וצעד אחד אחורה לא מקבל את אותו ה



backword error analysis / modified equations

נתון מש"ד $x'=f(x)$

נתונה סכימה נומרית, נניח FE, $x_{n+1}=x_n+hf(x_n)$, ונשווה אותו עם (x_n)

$$\Phi_h(x_n) = x_n + hf(x_n) + \frac{1}{2}h^2 f'(x_n)f(x_n) + O(h^3)$$

רעיון – כיוון המחשבה הפוך כיוון שאנחנו משנים את המשוואה

$$* \quad x' = f(x) - \frac{1}{2}h^2 f'(x)f(x)$$

ואם נשתמש ב FE עבור * נקבל

$$x_{n+1} = x_n + hf(x_n) + \frac{1}{2}h^2 f'(x)f(x)$$

כלומר: מקבלים – שגיאה לוקלית של FE היא מסדר h^3 לעומת $\Phi_h(x_n)$

SE – מפרידה עבור modified eqn אחרים – מקרבת המילטוניאני
סימפלקטי אילר

לדוגמא: עבור $V(q)=\frac{1}{2}q'$ ומציגות ההמילטוניאן

ה modified equation מציגנו ש: $\frac{1}{2}p^2+\frac{1}{2}q^2-\frac{1}{2}hpq$:

השיטה מפריקה יתר עבור המשוואה האחרת ולא משתמשת בתכונות של השיטה האחרת.

שיטה מספר 2: <u>Stormer-Verlet</u>

נפתח את מערכת ניוטון כמערכת מסדר שני.

$F=ma$

$$mq'' = F(q) = -\nabla(V(q))$$

צריך עבור פעמים כדי לפתור את q''

$q'_{n-\frac{1}{2}}$ $q'_{n+\frac{1}{2}}$

q_{n-1} q_n q_{n+1}

$$q'_{n-\frac{1}{2}} = \frac{q_n - q_{n-1}}{h}$$

$$q_{n+\frac{1}{2}} = \frac{q_{n+1} - q_n}{h}$$

$$q_n'' = \frac{q'_{n+\frac{1}{2}} - q'_{n-\frac{1}{2}}}{h} = \frac{q_{n+1} - q_n - q_n + q_{n-1}}{h^2}$$

$$= \frac{q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}}{h^2}$$

$$q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1} = h^2 m^{-1} F(q)$$

$$q_{n+1} = 2q_n - q_{n-1} + h^2 m^{-1} F(q_n)$$

1) סימטרית בזמן (ניתן להחליף את q_{n+1}, q_n, q_{n-1})

2) סימפלקטית (שומרת על נפחים)

<u>סדר 2</u> – שיטה מסדר 2.

Velocity - Verlet

שיטה שקולה לשיטה מספר 2 בגלל הסימטריה בזמן הפוכה

בניגוד לשיטה קודם

לא משתמשת הצעד הראשון כמו שצריך

$$
\begin{cases}
X_{n+1} = X_n + hV_n + \frac{1}{2}h^2 f(x_n) \\
V_{n+1} = V_n + \frac{1}{2}h \left[f(x_n) + f(x_{n+1}) \right]
\end{cases}
$$

מערכת

שומרת על נפחים) — סימפלקטית — שומרת על האנרגיה ושומרת על נפח במרחב הפאזה

שיטה מספר 2 -

רגיל — מערכת כאוטית — מסלול תלוי בתנאי התחלה צ"ו שינוי קטן בתנאי התחלה גורם לשינוי גדול במסלול

גדל שינויים מתאימים מעל השיטה הסימפלקטית.