MA2501 Numeriske metoder

Vår 2009

Prosjekt 2.

Praktisk informasjon

- *Utlevert:* 16. april.
- *Besvarelse:* En rapport på *maksimalt* 8 sider i pdf-format.
- *Innlevering:* Senest onsdag 6. mai. Rapporten sendes som e-post til faglærer, alternativt kan en papirutgave leveres i faglærers postboks i 7.etg. SBII. MATLAB-kode skal *ikke* legges ved.
- *Gruppestørrelse:* 1 eller 2 personer pr. gruppe.
- *Veiledning:* Onsdager 13:15 - 15:00 eller ved forespørsel. All veiledning foregår på faglærers kontor.
- *Vurdering:* Vurderingen baseres på
  1. Orginalitet og omfang.
  2. Ryddighet og struktur i rapporten.
  3. Gjennomføring av bevis, numeriske eksperimenter og tolkning av resultatene.

Innledende eksempel:

Gitt differensialligningen:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}' &= \mathbf{p} \\ \mathbf{p}' &= -\left(\frac{1}{r^3} + \frac{\alpha}{r^5}\right)\mathbf{q} \;=\; \mathbf{f}(\mathbf{q}).\end{aligned} \tag{1}$$

hvor $\mathbf{q} = (q_1, q_2)$, $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ og $r = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$. Sett $\alpha = 0.01$ og bruk startverdiene $\mathbf{q}(0) = (0.4, 0)$ and $\mathbf{p} = (0, 2)$. Vedlagte MATLAB-program løser denne ligningen på intervallet $[0, 500]$ og plotter resultatet i (q_1, q_2)-planet. Simuleringen er gjort med stor nok nøyaktighet til at løsningen kan betraktes som nogenlunde eksakt. Sett skrittlengden $h = 0.1$, og

1. Løs ligningen med Eulers metode (det kommer til å gå galt).
2. Løs ligningen med den 4. ordens klassiske Runge-Kutta metoden (RK4).
3. Løs ligningen med en metode som kombinerer eksplisitt og implisitt Euler, dvs.

$$\begin{aligned}\mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + h\mathbf{p}_n, \\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}).\end{aligned} \tag{2}$$

4. Løs ligningen med metoden:

$$\begin{aligned}\mathbf{p}_{n+1/2} &= \mathbf{p}_n + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_n),\\ \mathbf{q}_{n+1} &= \mathbf{q}_n + h\mathbf{p}_{n+1/2},\\ \mathbf{p}_{n+1} &= \mathbf{p}_{n+1/2} + \frac{h}{2}\mathbf{f}(\mathbf{q}_{n+1}).\end{aligned} \tag{3}$$

Gjenta eventuelt Sammenlign løsningen med den "eksakte". Hva observerer dere? Hva skjer om skrittlengden reduseres til $h = 0.01$? Gjenta gjerne eksperimentene med $\alpha = 0$.

Litt bakgrunnsteori:

Ligning (1)er et eksempel på et *Hamiltonsk* (Hamiltonian) problem: Fra en gitt Hamilton $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \; : \; \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ utledes et system av ordinære differensialligninger:

$$\begin{aligned}\mathbf{q}' &= \nabla_{\mathbf{p}} H,\\ \mathbf{p}' &= -\nabla_{\mathbf{q}} H,\end{aligned} \tag{4}$$

der $\nabla_{\mathbf{q}} H$ er gradienten av H med hensyn til $\mathbf{q}$, tilsvarende for $\nabla_{\mathbf{p}} H$. Hamiltonen for (1) er gitt ved

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^{\mathbf{T}}\mathbf{p} - \frac{1}{r} - \frac{\alpha}{2r^3} = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2} - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} - \frac{\alpha}{2\left(\sqrt{q_1^2 + q_2^2}\right)^3}. \tag{5}$$

(Vis det.)

Et *N-legeme* (N-body*)* problem beskriver partikler (punktmasser) som beveger seg friksjonsløst i rommet, kun påvirket av gravitasjonen fra andre partikler. Disse har en Hamilton på formen

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^T M^{-1}\mathbf{p} + V(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{m_i}\mathbf{p_i}^{\mathbf{T}}\mathbf{p_i} - G\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=0}^{i-1} \frac{m_i m_j}{\|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\|_2}, \tag{6}$$

der G er gravitsasjonskontanten, $\mathbf{q}_i$ er posisjonen, m_i massen og $\mathbf{p}_i$ momentet (masse·hastighet) til partikkel i. $\mathbf{q}_i$ og $\mathbf{p}_i$ er vektorer av dimensjon 2 (i planet) eller 3 (rommet). Ligningen beskrevet ved (5) eller (1) kan betraktes som et 1-legeme problem i planet. Med $\alpha = 0$ reduseres det til det velkjente Kepler-problemet, der en partikkel med masse 1 beveger seg kun påvirket av gravitasjonen fra en stillestående masse i origo.

Hamiltonske systemer er *konservative*, dvs. at en eller flere størrelser er bevart langs en løsning $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ av differensialligningene (4). Slike størrelser kalles *førsteintegraler* (first integrals).

For alle Hamiltonske systemer er Hamiltonen selv et førsteintegral. For N-legeme problemet ($N \geq 2$) er dessuten det totale momentet $\mathbf{p}_{tot} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{p}_i(t)$ og det totale *spinnet* (angular momentum) $\mathbf{m} = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{q}_i(t) \times \mathbf{p}_i(t)$ (der $\times$ er kryssproduktet mellom to vektorer) førsteintegraler. For (1) er spinnet $q_1(t)p_2(t) - q_2(t)p_1(t)$ et førsteintegral.

Oppgavebeskrivelse

Fra litteraturen er det kjent at numeriske metoder som bevarer et eller flere førsteintegraler har en langt bedre kvalitativ oppførsel enn metoder som ikke gjør det. *Deres oppgave er å verifisere numerisk at så er tilfelle!* Det gjør dere på følgende vis:

1. Velg et Hamiltonsk problem. Oppgi så mange førsteintegraler dere kan for dette problemet, og bevis at de virkelig er førsteintegraler. Det teller poitivt å vise generelle resultater, f.eks. at Hamiltonen er et førsteintegral for alle løsninger av ligningen (4).

2. Modifiser de to metodene (2),(3) til problemet dere har valgt (eller generaliser). Vis hvilke førsteintegraler som blir bevart. Dere må ikke forvente at alle førsteintegraler blir bevart. Hva med Euler og RK4?

3. Numerisk verifikasjon: Løs problemet med de fire metodene. Velg alltid konstant skrittlengde. Plot de ulike førsteintegralene for hvert tidsskritt. Stemmer resultatet med teorien? Hva med de førsteintegralene som ikke er bevart, hvordan utvikler de seg over tid? Se også den globale feilen (bruk en ODE-løser i MATLAB for å regne ut en "eksakt" løsning.) Og plott løsningen i et faseplan. Hva observerer du? Er det riktig å si at metoder som bevarer førsteintegraler gir "penere" resultat enn de som ikke gjør det?

Forslag til gjennomføring

1. Utfør oppgavene i det innledende eksempelet.

2. Gjennomfør de tre punktene i oppgaven for dette eksempelet. Bruk de to oppgitte førsteintegralene (Hamiltonen og spinn). Med dette er en absolutt minimumsvariant av prosjektet gjennomført. Men de litt mer ambisiøse bør også gjøre neste punkt:

3. Finn deres eget Hamiltonske problem, og gjennomfør den teoretiske analysen og de numeriske eksperimentene på dette. Metodene (2) og (3) må muligens modifiseres først. Det er fritt fram å bruke bøker, artikler og internett, men husk kildehenvisninger.
   NB! Dersom dere bruker et eget problem, *ikke ta med resultatet fra det innledende eksempelet i rapporten!*

Følgende bøker inneholder en del eksempler dere kan ta som utgangspunkt:

- Hairer, Lubich og Roche, *Geometric Numerical Integration.* Finnes som e-bok på biblioteket.
- Sanz-Serna og Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems.*
- Leimkuhler og Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics.*

Disse 3 finnes på biblioteket, men for at alle skal kunne ha glede av dem ber jeg dere om ikke å låne dem, bare kikke over dem der.

Rapport

Rapporten skal være på maksimalt 8 sider, og den skal skrives som en vitenskapelig artikkel, det betyr at den skal kunne leses som en selvstendig tekst. Den kan bestå av: I tillegg til tittel, dato og studentnr.,

Sammendrag:
Innledning: Innledningen skal motivere leseren til å lese resten av rapporten. Den bør inneholde en motivasjon for arbeidet, og en beskrivelse av hva man ønsker å undersøke. I dette tilfellet er det også naturlig å ta med en beskrivelse av problemet som løses, dvs. hvilket fysisk problem beskriver modellen.
Teori: Her oppgir dere Hamiltonen, de tilhørende differensialligningene, og eventuelle førsteintegraler. Se for øvrig punkt 1 og 2 i oppgavebeskrivelsen. Det er tilstrekkelig å vise resultatene for Eulers metode og (2) i rapporten.
Numeriske eksperimenter: Numeriske eksperimenter skal brukes for å bekrefte de teoretiske resultatene. Se for øvrig punkt 3. i oppgavebeskrivelsen. Husk at numeriske eksperimenter skal være reproduserbare, det betyr at alle parametre som inngår skal være oppgitt. Sørg for at figurene er lesbare, det betyr at aksene merkes, og at fontene er store nok.
*Konklusjon:*Stemmer numeriske resultater med teorien? Hva har du observert som ikke er bevist?

Lykke til!