

7. Hamiltoniaanse systemen

In de moleculaire dynamica, maar ook in andere gebieden zoals de hemelmechanica of klassieke mechanica, worden oplossingen gezocht van het *Hamiltoniaanse* systeem van differentiaalvergelijkingen (DVen):

$$\begin{cases} \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(p, q), \\ \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(p, q), \end{cases} \quad (1)$$

waarbij $H(p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d)$ de totale energie ('de Hamiltoniaan') van het systeem voorstelt en de q_i 's en p_i 's de plaatscoördinaten en momenta representeren, respectievelijk (d staat voor het aantal vrijheidsgraden in het systeem).

Opgave D3

Beschouw het geval $d = 1$, d.w.z. $H = H(p, q)$. Laat m.b.v. de kettingregel (zie eerste les) zien dat de energie H voor dit soort systemen constant blijft: $H(p(t), q(t)) = \text{constant}$ (hint: bereken $\frac{dH}{dt}$).

De mathematische slinger

De ongedempte mathematische slinger (zie figuur 1) met massa $m = 1$, een massaloos koord ter lengte $l = 1$ en gravitatieversnelling $g = 1$ (d.w.z. genormaliseerd) is een stelsel met één vrijheidsgraad (q speelt nu de rol van de hoek die de slinger maakt met de as in de richting van de zwaartekracht) en Hamiltoniaan

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

zodat de bewegingsvergelijkingen (1) worden (lees nu: $p = \dot{y}$ en $q = x$):

$$\begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = -\sin(x), \end{cases} \quad (3)$$

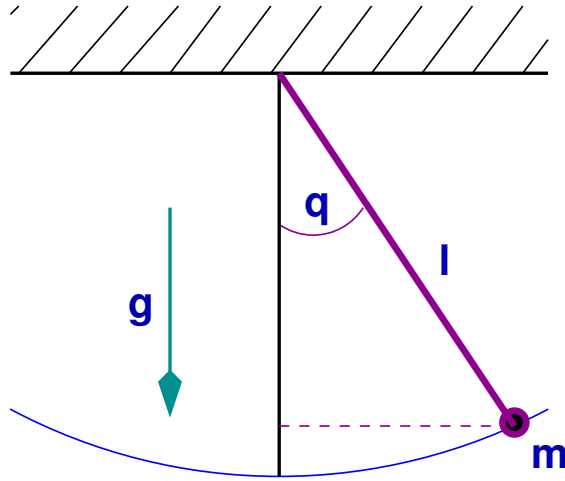
d.w.z. $y = \dot{x}$ is de snelheid.

NB. voor een algemenere situatie geldt natuurlijk $m\ddot{q} = -\frac{g}{l}\sin(q)$ (afleiding via " $F = m \times a$ ").

Opgave D4

Laat zien dat voor kleine uitwijkingen (hoeken) x de bewegingsvergelijkingen van de slinger vereenvoudigen tot $\dot{x} = y$, $\dot{y} = -x$. Controleer dat, voor de beginvoorwaarden $x(0) = 1$, $y(0) = 0$, de oplossing in dat geval wordt gegeven door $x(t) = \cos(t)$, $y(t) = -\sin(t)$. Hoe ziet de oplossingskromme er in het $x-y$ vlak uit (neem de tijd t als parameter voor de kromme)? Zoek ook een uitdrukking voor de energie H .

Een ander voorbeeld: twee elkaar aantrekkende lichamen (zoals de aarde en de maan) voldoen aan de wetten van Newton uit de mechanica; deze hebben als



Figuur 1: De mathematische slinger.

Hamiltoniaan:

$$H(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}.$$

Opgave D5

Leid de bewegingsvergelijkingen af voor dit stelsel (hint: maak gebruik van vergelijkingen (1)).

Enkele numerieke basismethoden

Beschouw het stelsel DVen

$$\begin{cases} \dot{x} = a(x, y), \\ \dot{y} = b(x, y), \end{cases} \quad (4)$$

voor gegeven functies a en b . De simpelste van alle numerieke methoden voor gewone DVen is Euler-Forward (EF; zie hoofdstuk 19.1 van Kreyszig), genoemd naar Leonhard Euler (zie figuur 2). Voor stelsel (4) luidt die

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \Delta t a(x^n, y^n), \\ y^{n+1} = y^n + \Delta t b(x^n, y^n), \end{cases} \quad (5)$$

waarin Δt de constante tijdstap is om van tijdstip t^n naar t^{n+1} te komen: $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Dit is een *explíciete* methode; hiermee wordt bedoeld dat er op ieder tijdstip t^n de "nieuweöplösing rechtstreeks volgt uit de öudeöplösing (=die van het vorige tijdstip). Een voorbeeld van een zogenaamde *impliciete* methode is Euler-Backward (EB). Toepassing op stelsel (4) geeft:

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \Delta t a(x^{n+1}, y^{n+1}), \\ y^{n+1} = y^n + \Delta t b(x^{n+1}, y^{n+1}). \end{cases} \quad (6)$$

Zoals te zien is, moet er in iedere tijdstap een stelsel worden opgelost om van x^n naar x^{n+1} te komen (idem voor y^n en y^{n+1}).

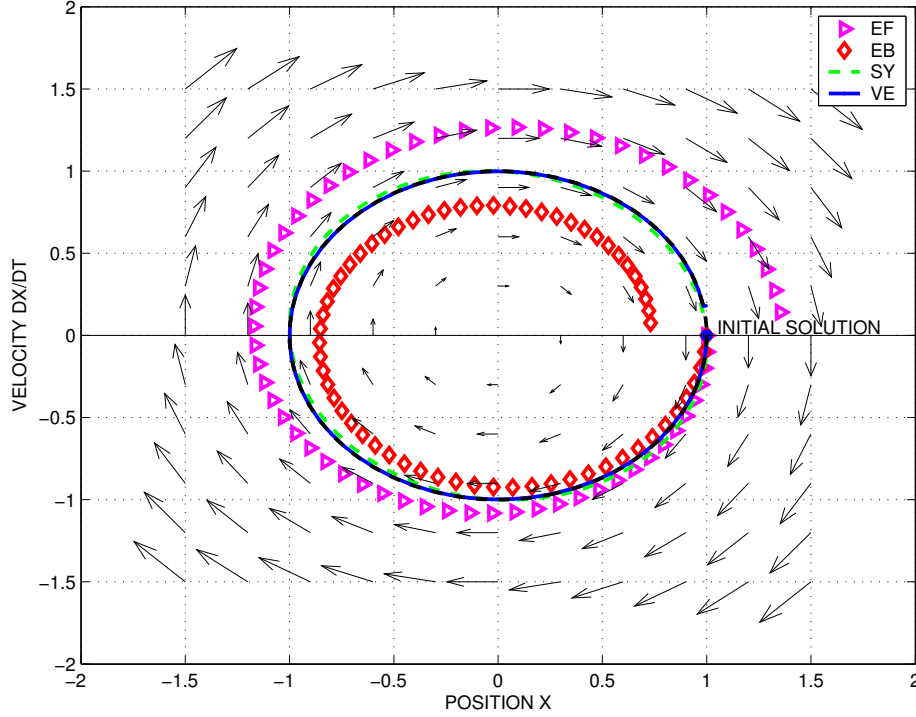
Een methode die gebruik maakt van een combinatie van EF en EB heet een gepartitioneerde Euler methode, in dit geval ‘symplectic Euler’ (SY):

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \Delta t a(x^{n+1}, y^n), \\ y^{n+1} = y^n + \Delta t b(x^{n+1}, y^n). \end{cases} \quad (7)$$

Indien we deze drie methoden toepassen op het vereenvoudigde stelsel uit Op-gave D4 zien we direkt al verschillende effecten optreden. Deze worden in figuur 3 en 4 getoond (stapgrootte $\Delta t = 0.1$ en eindtijd $T = 2\pi$). Opmerkelijk is het gedrag van de energie $H = x^2 + y^2$ als functie van de tijd t . Deze zou constant moeten zijn; echter we zien voor EF een toename van de energie (de oplossingskrommen zijn naar buiten gerichte spiralen i.p.v. cirkels), voor EB neemt de energie af (de oplossingskrommen zijn naar binnen gerichte spiralen...), terwijl voor SY de numerieke oplossing min of meer netjes (op het oog) de periodieke baan volgt en bovendien blijft de energie rondom de constante exacte waarde 1 hangen. De numerieke fout in deze drie methoden is van de orde $\mathcal{O}(\Delta t)$. Dit kan m.b.v. Taylorontwikkelingen uitgewerkt worden. Hiermee wordt bedoeld dat als we de stapgrootte $2\times$ zo klein zouden nemen, dat dan de gemaakte fout ook (ongeveer) met een factor 2 afneemt. De vierde methode in figuur 3 en 4 (‘Verlet’) komt nu aan bod.



Figuur 2: Leonhard Euler (1707-1783).



Figuur 3: Numerieke resultaten voor EF, EB, SY en Verlet voor de vereenvoudigde slinger vergelijking (in het fasevlak $x - y$).

De methode van Verlet

In de moleculaire dynamica wordt vaak gebruik gemaakt van Hamiltoniaanse systemen waarbij de totale energie dan gegeven wordt door

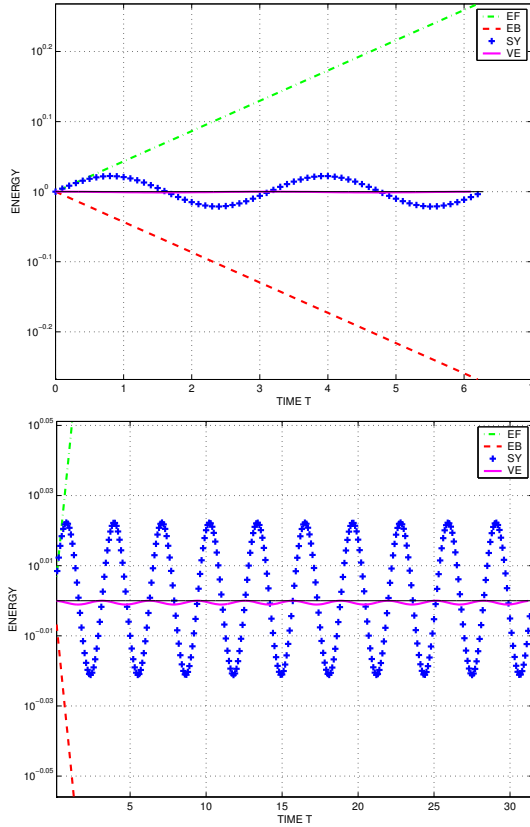
$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} p_i^T p_i + \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} V_{ij}(\| q_i - q_j \|), \quad (8)$$

met V_{ij} gegeven potentiaalfuncties. In dit geval geven de q_i 's en p_i 's de posities en momenta weer van de atomen, en m_i de atoommassa van het i -de atoom. Merk op dat in de hemelmechanica ook een dergelijk systeem bestaat voor een model dat de banen beschrijft van de aarde en de overige planeten rondom de zon (het N -lichamenprobleem) met $V_{ij} = -G \frac{m_i m_j}{r}$. In de moleculaire dynamica is de Lennard-Jones potentiaal populair:

$$V_{ij} = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right]. \quad (9)$$

Hier zijn ϵ_{ij} en σ_{ij} geschikte constanten die afhangen van de betreffende atomen. De Hamiltoniaan (totale energie) H in (8) kan geschreven worden in de vorm

$$H(p, q) = T(p) + U(q),$$



Figuur 4: Numerieke resultaten voor EF, EB, SY en Verlet voor de vereenvoudigde slinger vergelijking; de energie H als functie van de tijd t ; onder: ingezoomd.; de y -as is op logaritmische schaal getekend.

waarbij $T(p)$ een kwadratische functie is (immers er komen allerlei termen voor á la p_i^2). Het bijbehorende Hamiltoniaanse systeem (1) wordt in dit geval

$$\begin{cases} \dot{q} = M^{-1}p, \\ \dot{p} = -\nabla U(q). \end{cases}$$

Hierin is M de matrix $\text{diag}(m_1 I, \dots, m_N I)$ met I de drie-dimensionale identiteitsmatrix en $\nabla U = \frac{\partial U}{\partial q}$, de gradient van U . Dit stelsel is equivalent met de 2e orde DV

$$\ddot{q} = f(q), \tag{10}$$

waarbij het rechterlid $f(q) = -M^{-1}\nabla U(q)$ niet afhangt van \dot{q} .

Een voor de hand liggende numerieke benadering van vergelijking (10) is

$$q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1} = (\Delta t)^2 f(q^n). \tag{11}$$

Opgave D6

Laat m.b.v. een Taylorontwikkeling zien dat

$$\ddot{q}(t^n) = \frac{q^{n+1} - 2q^n + q^{n-1}}{(\Delta t)^2} + F_1,$$

waarbij de eerste term in de numerieke fout F_1 gegeven wordt door

$$-\frac{1}{12}(\Delta t)^2 \frac{d^4 q}{dt^4}.$$

Dezelfde vraag, maar dan voor

$$\dot{q}(t^n) = \frac{q^{n+1} - q^{n-1}}{2\Delta t} + F_2. \quad (12)$$

Hoe ziet de eerste term in de numerieke fout F_2 er uit?

Benadering (11) wordt de methode van Störmer (figuur 5, links) genoemd in de sterrenkunde en de ‘leap-frog’-methode in de context van partiële DVen. In de moleculaire dynamica heet (11) de Verlet-methode (zie figuur 5, rechts). In Opgave D6 zien we ook een benadering voor de snelheid \dot{q} . Aangezien we een 2e-orde afgeleide hebben in (10) hebben we ook twee beginvoorwaarden nodig om over ‘de’ oplossing te kunnen praten. Deze worden vaak gegeven door de beginwaarden $q(0) = q^0$ (de beginpositie) en $\dot{q}(0) = v_0$ (de beginsnelheid) voor te schrijven. Om de 3-term recursie in (11) te kunnen opstarten hebben we ook een waarde voor q^1 nodig. Neem $n = 0$ in (11) en (12), dan geeft eliminatie van q^{-1} :

$$q^1 = q^0 + \Delta t v_0 + \frac{(\Delta t)^2}{2} f(q^0) \quad (13)$$

voor de ontbrekende startwaarde in het proces.

Opgave D7

Beschouw de slingervergelijking uit Opgave D4. Geef de numerieke benaderingsformules voor EF, EB en de methode van Verlet wanneer ze worden toegepast op deze vergelijking. Schrijf de numerieke waarden op tijdstip t^{n+1} van de energie $(x^{n+1})^2 + (y^{n+1})^2$ uit als functie van de energie op tijdstip t^n . Doe dit laatste voor EF, EB en de ‘impliciete midpuntmethode’:

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \frac{\Delta t}{2} (y^n + y^{n+1}), \\ y^{n+1} = y^n - \frac{\Delta t}{2} (x^n + x^{n+1}). \end{cases} \quad (14)$$

Neemt de ‘numerieke energie’ af, of toe, of blijft deze (ongeveer) gelijk?

De Verlet-methode is een 2e-orde methode, d.w.z. de numerieke fout is van de orde $(\Delta t)^2$ (halvering van de stapgrootte Δt geeft ongeveer een factor 4 vermindering in de gemaakte fout). Dit kunnen we goed zien in figuur 3 en 4. De baan van de numerieke kromme valt vrijwel samen met de exacte oplossing (de cirkel) en de fout in de energie is vele malen kleiner dan die voor de andere drie methoden.



Figuur 5: Fredrik C. Mülertz Størmer (1874-1957) & Loup Verlet (1931-).