

SF1544 Laboration 4: Ergodicitet, symplektiska scheman och Monte Carlo-integration

Denna laboration kommer att exemplifiera begreppet ergodicitet, som relaterar tidsmedelvärden och rumsmedelvärden för vissa dynamiska system. Vi tänker oss att en partikel med massan ett rör sig i ett givet kraftfält i planet, vars koordinater vi benämner $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$. Kraften $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ antas ha en potential $v(\mathbf{x})$, dvs.

$$\nabla(v(\mathbf{x})) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}).$$

Partikelns hastighet i (x_1, x_2) -planet benämns $\mathbf{p} = (p_1, p_2) = (x'_1, x'_2)$. Partikelns totala energi kan skrivas

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2} + v(\mathbf{x}).$$

En partikel som rör sig längs banan $\mathbf{X}(t)$ med hastighet $\mathbf{P}(t)$ beskrivs av Newtons andra lag som ges av ett Hamiltonskt system

$$\begin{aligned}\mathbf{X}'(t) &= \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t)), \\ \mathbf{P}'(t) &= -\nabla_{\mathbf{x}} H(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t)),\end{aligned}\tag{1}$$

där $\nabla_{\mathbf{p}}$ och $\nabla_{\mathbf{x}}$ betecknar gradient i $\mathbf{p}$ - respektive $\mathbf{x}$ -koordinaterna. Inte sant?

Vi låter nu potentialen ges av

$$v(\mathbf{x}) = \frac{x_1^2}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}x_2^2 + \beta \sin(x_1 x_2),\tag{2}$$

med faktorn $\beta = 2$.

1. Energibevaring för symplektiskt schema

Lösningar $(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t))$ till (1) bevarar energin, dvs. funktionen

$$e(t) := H(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t))\tag{3}$$

är konstant. Visa detta.

Symplektiska scheman har egenskapen att de approximativt bevarar energin (dvs. funktionen H) för Hamiltonska system (1). *Symplektisk Euler* är ett exempel på ett symplektiskt schema och ges av

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_{n+1} &= \mathbf{P}_n - h\nabla_{\mathbf{x}} H(\mathbf{X}_n, \mathbf{P}_{n+1}), \\ \mathbf{X}_{n+1} &= \mathbf{X}_n + h\nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{X}_n, \mathbf{P}_{n+1}).\end{aligned}$$

Här är $\mathbf{X}_n$ och $\mathbf{P}_n$ approximationer till $\mathbf{X}(t_n)$ och $\mathbf{P}(t_n)$, där $t_n = nh$, dvs. steglängden $h = t_{n+1} - t_n$ är konstant. Skriv ett program som visar att detta schema approximativt bevarar energin (H) även för beräkningar över stora tidsintervall. Välj t.ex. längden på beräkningsintervallet $T = 10000$, och tidssteget $h = 0.01$. Som startposition kan väljas $\mathbf{X} = (0, 0)$ och $\mathbf{P} = (\cos(\pi/3), \sin(\pi/3))$. Ett tips är att förallokera lösningsvektorer till $\mathbf{X}$ och $\mathbf{P}$ för att få en snabbare beräkning.

Lös även det Hamiltonska systemet (1) med Matlabs ode45. Bevaras energin i detta fall?

2. Beräkning av observabel genom tidsmedelvärde

En observabel beskriver en genomsnittsegenskap hos en lösning, t.ex. genomsnittlig position eller lägesenergi. Denna kan beräknas exempelvis genom ett tidsmedelvärde

$$g_\infty := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T g(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t)) dt =: \lim_{T \rightarrow \infty} g_T.$$

Funktionen g representerar observabeln. I praktiken kan inte gränsvärdet i beräkningen av g_∞ tas, varför g_T med någon ändlig tid T används i stället. Välj en observabel, t.ex. $g = |\mathbf{x}|^2$ och plotta g_T som funktion av T . Undersök också hur felet $|g_\infty - g_T|$ avtar med T genom att plotta felet som funktion av T i loglog-skala. Eftersom det exakta värdet på g_∞ inte är känt behövs en approximation (vilken?).

Tips för plottning: När en radvektor $\mathbf{g}$ i MATLAB med komponenter $g_n := g(\mathbf{X}_n, \mathbf{P}_n)$ har bildats kan MATLAB-kommandot `cumsum` användas för att beräkna dess kumulativa summor (vilka ges i en ny vektor). Kommandot `cumsum(g)/(1:length(g))` är därför en vektor vars element n approximerar g_{t_n} .

Extrauppgift: Prova också att approximera g_∞ med Matlabs ode45 i stället för Symplektisk Euler. Funkar det?

3. Beräkning av observabel genom rumsligt medelvärde

Ergodicitet kan beskrivas som att tidsmedelvärden och rumsliga medelvärden sammanfaller. För Hamiltonska systemet (1) skulle ergodicitet innebära att tidsmedelvärdet g_∞ skulle sammanfalla med det rumsliga medelvärdet

$$g_H := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\int_{\{E \leq H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \leq E + \varepsilon\}} g(\mathbf{x}, \mathbf{p}) d\mathbf{x} d\mathbf{p}}{\int_{\{E \leq H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \leq E + \varepsilon\}} d\mathbf{x} d\mathbf{p}},$$

där E är systemets energi som ju bevaras av lösningar till det Hamiltonska systemet (1) (dvs. $E = H(\mathbf{X}(t), \mathbf{P}(t))$ för alla t). Låt oss nu betrakta en observabel g som är oberoende av $\mathbf{p}$, dvs.

$g = g(\mathbf{x})$. Det gäller då i vårt fall att

$$g_H = \frac{\int_{\{\mathbf{x}: v(\mathbf{x}) \leq E\}} g(\mathbf{x}) d\mathbf{x}}{\int_{\{\mathbf{x}: v(\mathbf{x}) \leq E\}} d\mathbf{x}}. \quad (4)$$

Kan ni visa detta? Denna fråga behöver ej besvaras för godkänd rapport.

Plotta upp en lösningskurva $\mathbf{X}(t)$ i (x_1, x_2) -planet. Verkar det troligt att systemet är ergodiskt, dvs. att tidsmedelvärden sammanfaller med rumsmedelvärden? Tätheten i (x_1, x_2) -planet som kurvan genererar kan t.ex. illustreras med matlabkommandot `plot(X1,X2, '.', 'markersize', 1)`; om $\mathbf{X1}$ och $\mathbf{X2}$ är vektorerna $(X_1(t_1), \dots, X_1(t_N))$ respektive $(X_2(t_1), \dots, X_2(t_N))$, med x_1 och x_2 komponenterna av lösningskurvan vid tidpunkterna t_n , $n = 1, \dots, N$.

Approximera g_H genom Monte Carlo-integration. (Läs i appendix om hur detta görs.) När integralerna i (4) ska beräknas används med fördel identiteten

$$\int_B f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_K f(\mathbf{x}) \mathbf{1}_B(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (5)$$

Här är

$$\mathbf{1}_B(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{om } \mathbf{x} \in B, \\ 0 & \text{om } \mathbf{x} \notin B, \end{cases}$$

den så kallade indikatorfunktionen för mängden B . Identiteten (5) gäller för alla $K \supset B$. En dubbelintegral över ett godtyckligt begränsat område kan alltså alltid skrivas som en dubbelintegral över en kvadrat (genom att K väljs att vara en kvadrat).

Kvadraten K väljs så att den täcker hela mängden $B = \{\mathbf{x} : v(\mathbf{x}) \leq E\}$. För att titta på B så kan kommandot `contour` i MATLAB användas. Använd t.ex. följande kod: `x=-3:0.1:3; y=x; [X,Y]=meshgrid(x,y); contour(x,y,X.^2/2+sqrt(2)/2*Y.^2+beta*sin(X.*Y),E)`;

För att koden ovan ska funka måste parametrarna `beta` och `E` sättas till sina korrekta värden. Energin `E` bestäms genom att se på vilken energi startpositionen $\mathbf{X} = (0, 0)$ och $\mathbf{P} = (\cos(\pi/3), \sin(\pi/3))$ motsvarar.

Genomför Monte Carlo-integration för beräkning av täljare respektive nämnare i (4). Undersök hur felet avtar med antal funktionsevalueringar M . Plotta felet som funktion av M i loglog-skala. MATLABs kommando `cumsum` är åter praktiskt att använda. Eftersom de exakta värdena av integralerna inte är kända kan ni använda beräkningen med störst M som approximation av integralens värde. Detta största M bör kunna uppfylla $M \geq 10^6$ utan att beräkningen blir plågsamt långsam.

Avgör genom att jämföra era framräknade approximationer av g_∞ och g_H om det Hamiltonska systemet tycks vara ergodiskt.

4. En annan potential

Ändra potentialen i (2) genom att sätta faktorn $\beta = 0$. Genomför alla beräkningar med denna nya potential (genom att modifiera era redan färdiga program). Är det Hamiltonska system (1) som ges av $\beta = 0$ ergodiskt?

5. Stokastisk dynamik (Uppgifterna i detta avsnitt behöver inte göras för att rapporten ska bli godkänd)

Att matematiskt bevisa när Hamiltonsk dynamik i stil med (1) är ergodisk är en utmaning som ingen klarat, än. Om dynamiken modifieras så att i varje infinitesimalt tidssteg görs också en liten stokastisk störning som sedan projiceras till ytan $\Sigma_E := \{(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \in \mathbb{R}^4 : H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = E\}$, finns bevis för ergodisk dynamik. Sådan stokastisk dynamik kan beskrivas med $\Delta t \rightarrow 0$ gränsvärdet av tidstegen $\bar{\mathbf{Z}}(n\Delta t) \mapsto \bar{\mathbf{Z}}((n+1)\Delta t)$ bestämda av

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}, \mathbf{P}) &= \bar{\mathbf{Z}}(n\Delta t) \\ \mathbf{X}_* &= \mathbf{X} + \mathbf{P}\Delta t \\ \mathbf{P}_* &= \mathbf{P} - \nabla v(\mathbf{X}_*)\Delta t \\ \mathbf{Z}^1 &= (\mathbf{X}_*, \mathbf{P}_*) \\ \mathbf{Z}^2 &= \mathbf{Z}^1 + \sqrt{\epsilon}\mathbb{P}(\mathbf{Z}^1)\Delta\mathbf{W} \\ \mathbf{Z}^3 &= \mathbf{Z}^2 + \mu\nabla H(\mathbf{Z}^2)/|\nabla H(\mathbf{Z}^2)| \\ \bar{\mathbf{Z}}((n+1)\Delta t) &= \mathbf{Z}^3, \end{aligned} \tag{6}$$

där $\mu \in \mathbb{R}$ väljs så att

$$H(\mathbf{Z}^2 + \mu\nabla H(\mathbf{Z}^2)/|\nabla H(\mathbf{Z}^2)|) = E. \tag{7}$$

Här är $\Delta\mathbf{W} = \sqrt{\Delta t}(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ och alla ξ_i är oberoende och har värdena ± 1 med sannolikhet $1/2$. Projektionen på ytan ges dels av

$$\mathbb{P}(\mathbf{Z}^1)\Delta\mathbf{W} := \Delta\mathbf{W} - (\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{Z}^1) \cdot \Delta\mathbf{W})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{Z}^1),$$

med normalen $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{Z}) := \nabla H(\mathbf{Z})/|\nabla H(\mathbf{Z})|$ till Σ_E , och av valet av μ i (7). Uttrycket $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{Z}^1) \cdot \Delta\mathbf{W}$ är den vanliga skalärprodukten i $\mathbb{R}^4$. Plotta en lösningskurva $\mathbf{X}(t)$ baserad på (6) för olika värden på ϵ , t.ex. $\epsilon = 0.25, 10^{-2}, 10^{-4}$ och $\Delta t = 0.01$ och jämför med lösningskurvorna i avsnitt 3 och 4. Studera, som i avsnitt 3, tätheten i (x_1, x_2) -planet. Jämför också tidsmedelvärdet för skattningen av observabeln med värdet från avsnitt 2, 3 och 4.

Appendix: Monte Carlo-integration

Medelvärde av en funktion f över en kvadrat $[a, b] \times [a, b]$ ges av

$$\frac{1}{(b-a)^2} \int_{[a,b] \times [a,b]} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Monte Carlo-integration innebär att detta medelvärde approximeras av summor

$$\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\mathbf{x}_i), \tag{8}$$

där $\mathbf{x}_i$ är punkter i $[a, b] \times [a, b]$ vars koordinater är oberoende likafördelade slumpstal. Eftersom integralen är tvådimensionell behövs $2M$ slumpstal för att generera summan i (8). Dessa kan genereras i MATLAB genom kommandot `a + (b-a)*rand(2*M,1)`.