

Strukturerhaltende Verfahren

Hamiltonsysteme, Symplektizität

Seminar Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen bei Prof. Bastian WS 2010

Eine Ausarbeitung von Stephan-Marian Piatkowski

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Eigenschaften von Hamiltonsystemen	3
2.1	Energieerhaltung	4
2.2	Volumenerhaltung	5
2.3	R-Reversibilität, Zeitumkehr	6
2.4	Symplektizität	8
3	Numerische Integration der Bewegungsgleichungen	10
3.1	Theorie Strukturerhaltender Verfahren	10
3.1.1	Erhaltungsgrößen	10
3.1.2	Symplektizität	12
3.1.3	Zeitumkehrinvarianz	13
3.2	Symplektischer Euler	13
3.3	Implizite Mittelpunktsregel	14
3.4	Leap frog/Störmer-Verlet Verfahren	14
3.5	FR-Algorithmus und PEFRL-Algorithmus	15
3.6	Diskussion der Verfahren	17

1 Einleitung

Wir starten mit den wohl bekannten Newtonschen Bewegungsgleichungen

$$m\ddot{\vec{x}} = \vec{F}(\vec{x}) = -\nabla V(\vec{x})$$

für die Bahnkurve $\vec{x}(t)$ eines Teilchens mit Masse m unter Einfluss einer Kraft $\vec{F}(\vec{x})$. Durch die Vorgabe von Anfangsbedingungen ist die Lösung mit Lipschitz-stetigem \vec{F} eindeutig. Die Newtonsche Physik ist also vollkommen deterministisch, d.h. wir können die Position des Teilchens zu beliebiger Zeit analytisch und/oder numerisch bestimmen. 200 Jahre nach Newton wurden abstraktere und nützlichere Formalismen entwickelt, der Lagrangeformalismus und der Hamiltonformalismus. In diesem Abschnitt präsentieren wir kurz den Hamiltonformalismus und schneiden an, dass die Formulierungen nach Lagrange und Hamilton zueinander äquivalent sind. Bei den folgenden Betrachtungen bleiben wir eindimensional. In höheren Dimensionen ändert sich die Struktur nicht. Startpunkt ist eine Funktion $L(q, \dot{q}, t)$, die von der Koordinate q , dessen Geschwindigkeit \dot{q} und der Zeit t abhängt. Die Funktion L wird Lagrangefunktion genannt. Im Allgemeinen sind an die Lagrangefunktion keine Bedingungen gestellt, doch in nahezu allen Fällen hat die Lagrangefunktion die Form

$$L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - V(q, t)$$

wobei T für die kinetische Energie des Teilchens steht und V für die potentielle Energie steht. Eine solche Lagrangefunktion heißt kanonische Lagrangefunktion. Wir werden uns im weiteren Verlauf auf die kanonische Lagrangefunktion stützen. Zu der Lagrangefunktion L kann man eine Größe

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t), t) dt$$

definieren, die Wirkung heißt. Diese Bezeichnung ist auch intuitiv, denn die Lagrangefunktion hat die Einheit J und demnach hat S die Einheit Js. Die Wirkung S ist ein Funktional, welches von der Koordinate $q(t)$ und der Geschwindigkeit $\dot{q}(t)$ abhängt. Nach dem Hamiltonschen Prinzip wählt ein Teilchen diejenige Bahnkurve $q(t)$, sodass die Wirkung extremal wird. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich aus der Extremalisierung von S . Funktionale zu extremalisieren ist Gegenstand der Variationsrechnung. Daraus resultieren die bekannten Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = \frac{\partial L}{\partial q}$$

Diese sogenannten Lagrange'schen Bewegungsgleichungen liefern gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung.

Die Größe $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$ heißt kanonischer Impuls. Mit dem kanonischen Impuls lässt sich die Legendre-Transformierte von L berechnen

$$H(p, q, t) = p\dot{q} - L(q, \dot{q}, t)$$

Die Funktion H , welche nun von p , q und t abhängt, heißt Hamiltonfunktion. Sie hat die Form

$$H(p, q, t) = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(q, t) = E$$

und repräsentiert die Gesamtenergie E des physikalischen Systems. Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen lassen sich aus den Lagrange'schen Bewegungsgleichungen zusammen mit der Legendre-Transformation herleiten und besitzen die Form

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q} \\ \frac{\partial H}{\partial q} &= -\dot{p}\end{aligned}$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen liefern ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem erster Ordnung. In höheren Dimensionen haben die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen die Form

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \vec{p} \\ \vec{q} \end{pmatrix} = J^{-1} \nabla H(\vec{p}, \vec{q}, t), \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n \times 2n}, \quad \vec{p} = (p_1, \dots, p_n)^T, \vec{q} = (q_1, \dots, q_n)^T, n \in \mathbb{N}$$

Dabei ist $\nabla H = \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{p}}, \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \right)^T$.

Das fundamentale Prinzip der extremalen Wirkung findet in der theoretischen Physik ständige Anwendung. Neben der klassischen Mechanik taucht dieser Formalismus auch in der klassischen Elektrodynamik, Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und Allgemeine Relativitätstheorie auf. Es werden dort nicht nur die Koordinaten q und dessen Geschwindigkeit \dot{q} als Argumente verwendet, sondern auch skalare Felder und Vektorfelder mit deren Ableitungen. Man erhält dann aus den Bewegungsgleichungen die zugehörigen Feldgleichungen.

Im Folgenden werden wir die Hamiltonfunktion und die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen betrachten.

2 Eigenschaften von Hamiltonsystemen

In diesem Abschnitt wollen wir die Eigenschaften von Hamiltonsystemen herleiten, wie sie in [2] angeführt werden.

Zu einem vorgegebenem AWP

$$\dot{y} = f(y, t), \quad y(t_0) = y_0 \quad (2.1)$$

lässt sich ein Zeitentwicklungsoperator oder auch Evolutionsoperator $\phi^{t_0, t}$ konstruieren, welcher aus dem Anfangswert y_0 die Werte $y(t)$ berechnet. Die diskretisierte Variante des Zeitentwicklungsoperators $\phi^{t_0, t}$ wird verwendet um die DGL numerisch zu lösen. Dabei kann der diskretisierte Zeitentwicklungsoperator vom numerischen Verfahren abhängen (z.B. expliziter Euler oder Runge Kutta 4 Verfahren).

Definition 1 Die Abbildung $\phi^{t_0, t}$ heißt Evolutionsoperator zur DGL $\dot{y} = f(y, t)$, wenn

$$t \longmapsto \phi^{s, t} z$$

Lösung des AWP

$$\dot{y} = f(y, t), \quad y(s) = z, \quad \forall s, t \text{ im Existenzbereich}$$

ist.

Die Evolutionsoperatoren zur DGL $\dot{y} = f(y, t)$, $y(t_0) = y_0$ besitzen eine Gruppeneigenschaft, denn

$$\phi^{t, t} = \text{Id}, \quad \phi^{s, t} y = (\phi^{r, t} \circ \phi^{s, r}) y, \quad \phi^{-t} \circ \phi^t = \text{Id} \quad (2.2)$$

Beispiel 1 Der Zeitentwicklungsoperator zur Schrödinger-Gleichung

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbb{H} \psi, \quad \psi(t_0) = \psi_0, \quad \hbar = 1$$

mit zeitunabhängigem Hamiltonoperator \mathbb{H} besitzt die Form

$$\phi^{t_0, t} = \exp(-i(t - t_0)\mathbb{H})$$

Man sieht schnell ein, dass der Zeitentwicklungsoperator der Schrödinger-Gleichung die drei obigen Eigenschaften (2.2) erfüllt. Die letzteren beiden folgen mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel.

Definition 2 Zu einem gegebenem Zeitentwicklungsoperator der DGL ist die Propagationsmatrix (Wronski-Matrix) $W(t, t_0, z)$ wie folgt definiert:

$$W(t, t_0, z) = \frac{\partial}{\partial y} \phi^{t_0, t} y \Big|_{y=z}$$

Behauptung 1 Die Propagationsmatrix erfüllt für festes y_0 die sogenannte Variationsgleichung

$$\frac{d}{dt} W(t, t_0, y_0) = \frac{\partial}{\partial y} f(t, \phi^{t_0, t} y_0) W(t, t_0, y_0), \quad W(t_0, t_0, y_0) = I \quad (2.3)$$

Beweis:

Für festes y gilt $\frac{d}{dt}\phi^{t_0,t}y = f(t, \phi^{t_0,t}y)$ und $\frac{d}{dt}W(t, t_0, y_0) = \frac{\partial}{\partial t}W(t, t_0, y_0)$. Deshalb sind die Differentiationen vertauschbar. Also:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}W(t, t_0, y_0) &= \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial y} \phi^{t_0,t}y \Big|_{y=y_0} \\ &= \frac{\partial}{\partial y} \frac{d}{dt} \phi^{t_0,t}y \Big|_{y=y_0} \\ &= \frac{\partial}{\partial y} f(t, \phi^{t_0,t}y_0) \\ &= Df(t, \phi^{t_0,t}y_0) \frac{d}{dy} \phi^{t_0,t}y \Big|_{y=y_0} \\ &= \frac{\partial}{\partial y} f(t, \phi^{t_0,t}y_0) W(t, t_0, y_0) \end{aligned}$$

$W(t_0, t_0, y_0) = I$ folgt aus der Tatsache, dass $\phi^{t_0,t_0} = \text{Id}$ ist. \square

2.1 Energieerhaltung

Behauptung 2 Wenn die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt, also $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, dann ist die Gesamtenergie erhalten.

Denn:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= \frac{dH}{dt} \\ &= \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= 0 + \sum_i \dot{p}_i \dot{q}_i - \dot{p}_i \dot{q}_i \\ &= 0 \quad \square \end{aligned}$$

Wir stellen im Folgenden an die Hamiltonfunktion H die Bedingungen:

- $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ damit sind die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen autonom
- $H : D \subset \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $H \in \mathcal{C}^2(D, \mathbb{R})$

Das für uns nützlichere Konzept bzgl. der Energieerhaltung beruht auf den ersten Integralen oder ersten Invarianten.

Definition 3 Sei $I : y(t) \mapsto \mathbb{R}$ ein Funktional. I heißt erstes Integral oder erste Invariante von $y(t)$, falls $I(y(t)) = \text{const} \forall t$.

Behauptung 3 Es gilt folgende Äquivalenz

$$I \text{ erstes Integral von } \dot{y} = f(y) \quad \Leftrightarrow \quad \nabla I(y) \cdot f(y) = 0 \quad \forall y$$

Folgende Formen von ersten Integralen werden interessant sein

- lineares erstes Integral: $I(y) = b^T y + c$ mit $b \in \mathbb{R}^d, c \in \mathbb{R}$
- quadratisches erstes Integral: $I(y) = \frac{1}{2} y^T A y + b^T y + c$ mit $A \in \mathbb{R}^{d \times d}, b \in \mathbb{R}^d, c \in \mathbb{R}$

Definition 4 (Polynomielle Invarianten) Ein erstes Integral $I(y)$ ist polynomial vom Grad n , $n \in \mathbb{N}$, wenn

$$I(y) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}_0^d, |\alpha| \leq n} \beta_\alpha y^\alpha, \quad \beta_\alpha \in \mathbb{R} \quad (\text{Multiindexschreibweise})$$

Behauptung 4 Die Hamiltonfunktion selbst ist erste Invariante

Beweis:

Die rechte Seite der DGL hat die Form

$$f(\vec{p}, \vec{q}) = J^{-1} \nabla H(\vec{p}, \vec{q})$$

und es gilt

$$\nabla I(\vec{p}, \vec{q}) \cdot f(\vec{p}, \vec{q}) = \nabla H(\vec{p}, \vec{q}) J^{-1} \nabla H(\vec{p}, \vec{q}) = 0$$

Denn es gilt zunächst:

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -I_n \\ I_n & 0 \end{pmatrix} = -J$$

und damit ist J^{-1} antisymmetrisch. Betrachten wir die Bilinearform β mit der Strukturmatrix J^{-1} , dann gilt $\beta(x, y) = x^T J^{-1} y = -\beta(y, x)$ und damit $\beta(x, x) = 0 \forall x$. Damit folgt, dass die Hamiltonfunktion erste Invariante ist und deshalb die Energie erhalten bleibt. \square

Definition 5 (Partitionierte Anordnung einer gewöhnlichen DGL) Ein System gewöhnlicher DGL in der partitionierten Form hat die Anordnung

$$\dot{y} = f(y, z), \quad \dot{z} = g(y, z) \tag{2.4}$$

mit

$$\begin{aligned} f(y, z) &: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}^d \\ g(y, z) &: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d'} \rightarrow \mathbb{R}^{d'} \end{aligned}$$

Mit dieser formulierten Definition sehen wir schnell ein, dass die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

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

ein System gewöhnlicher DGL in der partitionierten Form ist.

2.2 Volumenerhaltung

Definition 6 (Phasenraum) Seien $\vec{p}(t)$ und $\vec{q}(t)$ die kanonischen Impulse und verallgemeinerten Koordinaten der Hamiltonfunktion. Die Menge

$$(\vec{p}(t), \vec{q}(t))^T = \mathbb{P} \subset \mathbb{R}^{2n}$$

heißt Phasenraum

Definition 7 (Volumenerhaltung) Eine Abbildung $\phi : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ heißt volumenerhaltend, falls

$$\forall V \subset D \text{ messbar: } \text{Vol}(\phi(V)) = \text{Vol}(V)$$

Lemma 1 (Volumenerhaltende Abbildungen) Eine stetig differenzierbare Abbildung $\phi : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ ist genau dann volumenerhaltend, wenn $|\det D\phi(y)| = 1$ für alle $y \in D$.

Beweis: Nach dem Transformationssatz

$$\text{Vol}(\phi(V)) = \int_{\phi(V)} = \int_V |\det D\phi(y)|$$

Satz 1 (Satz von Liouville) Sei $f : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ stetig differenzierbar. Genau dann wenn $\nabla \cdot f = 0$ für jedes $y \in D$ ist der zu $\dot{y} = f(y)$ gehörige Zeitenwicklungsoperator ϕ^t volumenerhaltend, d.h.

$$\forall V \subset D \text{ kompakt: } \exists \delta > 0 : \text{Vol}(\phi^t(V)) = \text{Vol}(V), \quad \forall 0 \leq t < \delta$$

Beweis: siehe [2]

Lemma 2 Der Zeitentwicklungsoperator zu den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen ist auf dem Phasenraum \mathbb{P} volumenerhaltend.

Beweis:

Die rechte Seite der DGL besitzt die Form $f(\vec{p}, \vec{q}) = J^{-1} \nabla H(\vec{p}, \vec{q})$ mit $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}}, \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \right)^T$. Damit:

$$\begin{aligned} f(\vec{p}, \vec{q}) &= J^{-1} \nabla H(\vec{p}, \vec{q}) \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -I_n \\ I_n & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \\ \frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \\ \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \nabla \cdot f(\vec{p}, \vec{q}) &= \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} \right) = 0 \quad \text{da } H \in \mathcal{C}^2 \quad \square \end{aligned}$$

Eine praktische Konsequenz der Volumenerhaltung ist die folgende:

Betrachten wir die selbe Hamiltonsche Bewegungsgleichung zu verschiedenen Anfangsbedingungen. Für ein Volumen $V \subset \mathbb{P}$, welches nach einer Menge von Anfangsbedingungen entsteht, ändert sich nach Zeitentwicklung der einzelnen Anfangszustände das zugehörige Volumen nach dem Satz von Liouville nicht.

2.3 R-Reversibilität, Zeitumkehr

In diesem Abschnitt wollen wir die Zeitumkehr und das Transformationsverhalten von Hamiltonschen Systemen unter Zeitumkehr betrachten. Invarianz unter Zeitumkehr bedeutet salopp formuliert: Wenn wir die Bahnkurve $\vec{x}(t)$ eines Teilchens ab einem Zeitpunkt t_0 bis zum Zeitpunkt $t_1 > t_0$ betrachten, dann würde unter Zeitumkehr $t_1 \rightarrow t_0$ das Teilchen den selben Weg zurücknehmen.

Formal lässt sich Zeitumkehr wie folgt charakterisieren. Wir betrachten wieder die Bahnkurve

$\vec{x}(t)$ eines Teilchens ab einem Zeitpunkt t_0 bis zu einem Zeitpunkt $t_1 > t_0$. Die Anfangsbedingungen gehen dann über in

$$\begin{aligned}\vec{x}(t_0) = x_0 &\longmapsto x_1 = \vec{x}(t_1) \\ \vec{v}(t_0) = v_1 &\longmapsto v_1 = \vec{v}(t_1)\end{aligned}$$

wobei $\vec{v}(t) = \frac{d}{dt}\vec{x}(t)$ gilt. Zum Zeitpunkt t_1 stoppen wir die Zeitentwicklung. Als nächstes kehren wir das Vorzeichen von v_1 um und betrachten die Bahnkurve $\vec{x}(t)$ mit den folgenden Anfangsbedingungen

$$\vec{x}(t_0) = x_1, \quad \vec{v}(t_0) = -v_1$$

Starten wir wieder die Zeitentwicklung bei t_0 und stoppen sie bei t_1 , dann nennt man das System invariant unter Zeitumkehr, falls sich die Anfangsbedingungen wie folgt transformieren

$$\begin{aligned}\vec{x}(t_0) = x_1 &\longmapsto x_0 = \vec{x}(t_1) \\ \vec{v}(t_0) = -v_1 &\longmapsto -v_0 = \vec{v}(t_1)\end{aligned}$$

Verallgemeinert lässt sich dieses Prinzip wie folgt definieren:

Definition 8 (R-reversible Abbildung) *Es sei $R : D \rightarrow D \subset \mathbb{R}^d$ ein Automorphismus. Eine bijektive Abbildung $\phi : D \rightarrow D$ heißt R-reversibel, falls*

$$R \circ \phi = \phi^{-1} \circ R$$

Lemma 3 (R-reversible Evolution) *Die Evolution ϕ^t zu $\dot{y} = f(y)$ ist R-reversibel für alle $t \in \mathbb{R}$, falls*

$$f \circ R = -R \circ f, \quad \text{auf } D$$

Beweis: Nach den Gruppeneigenschaften (2.2) gilt:

$$\begin{aligned}\phi^{-t} \circ \phi^t &= Id \\ \Rightarrow R \circ \phi^t &= (\phi^t)^{-1} \circ R = \phi^{-t} \circ R\end{aligned}$$

Betrachte nun beide Seiten als Lösung des gleichen AWP

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} ((R \circ \phi^t)(y)) &= Rf(\phi^t(y)) = -f((R \circ \phi^t)(y)) \\ \frac{d}{dt} ((\phi^{-t} \circ R)(y)) &= -f((\phi^{-t} \circ R)(y))\end{aligned}$$

Dabei wurde in der ersten Zeile nach der Kettenregel differenziert und der Fakt verwendet, dass die Jacobi-Matrix einer linearen Abbildung die Matrix selbst ist. Das Minuszeichen in der zweiten Zeile entsteht durch die Differentiation von $-t$ nach t . Folglich sind $t \mapsto (R \circ \phi^t)(y)$ und $t \mapsto (\phi^{-t} \circ R)(y)$ Lösungen des AWP

$$\dot{z} = -f(z), \quad z(0) = Ry$$

Die R-Reversibilität folgt aus dem Eindeutigkeitsatz für gewöhnliche DGL. \square

Definition 9 *Der Automorphismus R für die Zeitumkehr hat die Gestalt*

$$\begin{aligned}R : \mathbb{P} &\rightarrow \mathbb{P} \\ (\vec{p}, \vec{q})^T &\longmapsto (-\vec{p}, \vec{q})^T\end{aligned}$$

Satz 2 Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen sind invariant unter Zeitumkehr.

Beweis: Zunächst gilt $J \circ R = -R \circ J$ und $R^2 = Id$.

$$\begin{aligned}
 -R \circ f &= -R (J^{-1} \nabla H (\vec{p}, \vec{q})) \\
 &= J^{-1} R (\nabla H (\vec{p}, \vec{q})) \\
 &= J^{-1} R R \nabla H (R (\vec{p}, \vec{q})^T) \\
 &= J^{-1} \nabla H (R (\vec{p}, \vec{q})^T) \\
 &= f \circ R
 \end{aligned}$$

Das Ergebnis in der dritten Zeile entsteht durch die Eigenschaft $H (\vec{p}, \vec{q}) = H (R (\vec{p}, \vec{q})^T)$ und darauf folgender Differentiation nach der Kettenregel. \square

2.4 Symplektizität

Definition 10 (Symplektisches Produkt)

$$\omega(v, w) := v^T J w, \quad v, w \in \mathbb{R}^{2n} \quad \text{mit} \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n \times 2n}$$

Definition 11 Eine \mathcal{C}^1 -Abbildung $\phi : D \subset \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^{2n}$ heißt symplektisch, falls

$$D\phi(y)^T J D\phi(y) = J \quad \Leftrightarrow \quad \omega(D\phi(y)v, D\phi(y)w) = \omega(v, w), \quad \forall v, w \in \mathbb{R}^{2n}, \forall y \in D$$

Satz 3 (Symplektischer Fluss Hamiltonscher Systeme) Der Zeitentwicklungsoperator einer Hamiltonschen Bewegungsgleichung ist symplektisch

Beweis: Die rechte Seite der Hamiltonschen Bewegungsgleichung hat die Form $f(y) = J^{-1} \nabla H(y)$ und die Propagationsmatrix $W(t, y) = D\phi^t y$ löst die Variationsgleichung (2.3)

$$\frac{d}{dt} W(t, y) = D (J^{-1} \nabla H(\phi^t y)) W(t, y) = J^{-1} \nabla^2 H(\cdot) W(t, y)$$

Notation: $\nabla^2 H$ entspricht der Hesse-Matrix der Hamiltonfunktion H

Mit Produktregel, da $J^T = -J$, $J^{-T} = -J^{-1} = J$

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} (W(t, y)^T J W(t, y)) &= \frac{d}{dt} W(t, y)^T J W(t, y) + W(t, y)^T J \frac{d}{dt} W(t, y) \\
 &= W(t, y)^T \nabla^2 H(\cdot) J^{-T} J W(t, y) + W(t, y)^T J J^{-1} \nabla^2 H(\cdot) W(t, y) \\
 &= -W(t, y)^T \nabla^2 H(\cdot) W(t, y) + W(t, y)^T \nabla^2 H(\cdot) W(t, y) = 0
 \end{aligned}$$

Da $W(0, y) = I \Rightarrow W(t, y)^T J W(t, y) = J, \quad \forall t \quad \square$

Lemma 4 Symplektische Abbildungen sind volumenerhaltend.

Beweis:

Zunächst gilt $\det(J^{-1}) = \det(-J) = (-1)^{2n} \det(J) = \det(J)$

Damit können wir folgern, dass $\det(J) \neq 0$, denn

$$1 = \det(I_{2n}) = \det(J^{-1} J) = (\det(J))^2$$

Und deshalb gilt:

$$\det(J) = \det(W(t, y)^T J W(t, y)) = \det(J) (\det(W(t, y)))^2 \Leftrightarrow |\det(W(t, y))| = 1 \quad \square$$

Die Volumenerhaltung ist deshalb eine notwendige, aber keine hinreichende Bedingung für Symplektizität.

Lemma 5 *Die Komposition symplektischer Abbildungen ist symplektisch.*

Beweis:

Seien ϕ, ψ symplektische Abbildungen, dann gilt:

$$D(\psi \circ \phi(y)) = D\psi(\phi(y)) D\phi(y)$$

Und damit:

$$D(\psi \circ \phi(y))^T J D(\psi \circ \phi(y)) = D\phi(y)^T D\psi(\phi(y))^T J D\psi(\phi(y)) D\phi(y) = J \quad \square$$

3 Numerische Integration der Bewegungsgleichungen

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, dass Hamiltonsysteme ein gewisse Struktur besitzen. Diese Struktur spiegelt sich in der Energieerhaltung, der Volumenerhaltung im Phasenraum, der Invarianz unter Zeitumkehr und der Symplektizität wieder. In der Vorlesung Numerik I haben wir schon gesehen, dass z.B. der explizite Euler oder das Runge Kutta 4 Verfahren die Energie nicht erhalten. Bei Langzeitintegration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen mit solchen Verfahren entfernt sich immer weiter die numerische Gesamtenergie von der exakten Gesamtenergie. Dieses Phänomen nennt man Energiedrift. Deshalb ist es wünschenswert, dass numerische Verfahren ebenfalls die Energie erhalten (kein Energiedrift), symplektisch sind, invariant unter Zeitumkehr sind und das Volumen im Phasenraum erhalten. Solche Verfahren nennt man Strukturerehaltende Verfahren. In diesem Abschnitt wollen wir einige solcher Verfahren vorstellen. Zunächst müssen wir einige theoretische Vorbereitungen machen.

3.1 Theorie Strukturerehaltender Verfahren

3.1.1 Erhaltungsgrößen

Wir greifen auf erste Integrale der Form

$$\text{lineares erstes Integral: } I(y) = b^T y + c \text{ mit } b \in \mathbb{R}^d, c \in \mathbb{R} \quad (3.1)$$

$$\text{quadratisches erstes Integral: } I(y) = \frac{1}{2} y^T A y + b^T y + c \text{ mit } A \in \mathbb{R}^{d \times d}, b \in \mathbb{R}^d, c \in \mathbb{R} \quad (3.2)$$

zurück, wie wir sie im Abschnitt über die Eigenschaften Hamiltonscher Systeme eingeführt hatten. Betrachten wir zunächst s-stufige Runge Kutta Verfahren. Dann lassen sich folgende Sätze formulieren

Satz 4 *Alle (expliziten und impliziten) Runge Kutta Verfahren erhalten lineare erste Invarianten*

Beweis: Sei $I(y) = b^T y + c$, dann gilt:

$$\nabla I(y) \cdot f(y) = 0, \quad \forall y$$

Damit

$$\begin{aligned} I(y_1) &= I(y_0 + \sum_i b_i k_i) \\ &= I(y_0) + \sum_i b_i I(k_i) \\ &= I(y_0) + \sum_i b_i \underbrace{b^T k_i}_{=0} \\ &= I(y_0) \end{aligned}$$

Durch iterative Anwendung dieses Arguments, sehen wir ein, dass alle Runge Kutta Verfahren lineare erste Invarianten erhalten \square

Satz 5 *Ein s -stufiges Runge Kutta Verfahren erhält quadratische erste Invarianten, wenn für die Koeffizienten im Butcher Tableau gilt*

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \quad (3.3)$$

ohne Beweis

Nun wollen wir partitionierte Runge Kutta Verfahren der Stufe s betrachten. Solche Verfahren erweisen sich als nützlich bei der numerischen Lösung einer gewöhnlichen DGL (2.4) in der partitionierten Form. Der Ansatz zur Lösung eines solchen Systems besteht einfach in zwei Runge Kutta Verfahren:

- (a_{ij}, b_i, c_i) zur Lösung von y
- $(\hat{a}_{ij}, \hat{b}_i, \hat{c}_i)$ zur Lösung von z

Dabei ergibt sich folgendes Schema

$$\begin{aligned} k_i &= f \left(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} l_j \right), \quad i = 1, \dots, s \\ l_i &= g \left(t_0 + \hat{c}_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} l_j \right), \quad i = 1, \dots, s \\ y_1 &= y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \\ z_1 &= z_0 + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i l_i \end{aligned}$$

Partitionierte Runge Kutta Verfahren können Invarianten der Form (3.2) nicht erhalten. Stattdessen betrachtet man erste Integrale der Form

$$I(y, z) = y^T Q z, \quad y \in \mathbb{R}^d, \quad z \in \mathbb{R}^{d'} \quad (3.4)$$

mit einer geeignet dimensionierten Matrix Q . Dann lässt sich folgender Satz formulieren

Satz 6 *Wenn für die Koeffizienten eines partitionierten Runge Kutta Verfahrens*

$$b_i \hat{a}_{ij} + \hat{b}_j a_{ji} = b_i \hat{b}_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \quad (3.5)$$

$$b_i = \hat{b}_i, \quad \forall i = 1, \dots, s \quad (3.6)$$

dann erhält es quadratische Invarianten der Form (3.4).

ohne Beweis

Man kann leider folgende ernüchternde Erkenntnis zeigen, dass es keine konsistenten Runge Kutta Verfahren und partitionierte Runge Kutta Verfahren gibt, welche polynomielle Invarianten vom Grad $n \geq 3$ erhalten.

Das bedeutet, dass die Gesamtenergie nicht exakt erhalten bleibt, denn nicht jede Hamiltonfunktion hat die Gestalt einer quadratischen Form. Wir werden im nächsten Abschnitt den Begriff "Gesamtenergie nicht exakt erhalten" präzisieren.

3.1.2 Symplektizität

Definition 12 (Symplektisches Einschrittverfahren) *Ein Einschrittverfahren ist symplektisch, wenn es, angewandt auf die Hamiltonsche Bewegungsgleichung $f(y) = J^{-1}\nabla H(y)$ eine konsistente diskrete Zeitentwicklung ψ^h erzeugt, so dass ψ^h eine symplektische Abbildung ist.*

Mit den obigen Erkenntnissen ist es für uns möglich, zwei zentralen Sätze für Strukturerhaltende Verfahren zu formulieren.

Satz 7 *Ein Runge Kutta Verfahren ist symplektisch und damit auch volumenerhaltend, wenn für die Koeffizienten im Butcher Tableau gilt*

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s$$

ohne Beweis

Satz 8 *Ein partitioniertes Runge Kutta Verfahren ist symplektisch und damit auch volumenerhaltend, wenn für die Koeffizienten gilt*

$$\begin{aligned} b_i \hat{a}_{ij} + \hat{b}_j a_{ji} &= b_i \hat{b}_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \\ b_i &= \hat{b}_i, \quad \forall i = 1, \dots, s \end{aligned}$$

ohne Beweis

Die zentralen Aussagen der beiden Sätze sind, dass die Bedingungen für die Symplektizität identisch mit den Bedingungen (3.3) bzw. (3.5) und (3.6) für die Erhaltung der Invarianten sind.

Im Abschnitt zu den Erhaltungsgrößen haben wir gesehen, dass die Energie nicht exakt erhalten wird. Experimentelle Rechnungen haben gezeigt, dass bei den meisten Integratoren ein Energiedrift auftritt. Die symplektischen Integratoren zeichnen sich durch eine Eigenschaft aus, welche sich Quasienergieerhaltung nennt. Dabei oszilliert die numerische Gesamtenergie um die exakte Gesamtenergie und bleibt dabei beschränkt. Es ist möglich die numerische Gesamtenergie gegen die exakte Energie abzuschätzen. Das Prinzip beruht auf der Rückwärtsfehleranalyse. Dort wird der Verlauf der diskreten Evolution als exakte Lösung einer gestörten Hamiltonfunktion betrachtet.

Behauptung 5 (Langzeitenergieerhaltung bei symplektischer Integration) *Für hinreichend kleine (uniforme !) Schrittweiten h existiert zu einem von Ordnung p konsistentem symplektischem Einschrittverfahren eine gestörte Hamiltonfunktion*

$$\tilde{H}_h = H + \mathcal{O}(h^p)$$

so dass die exakte Lösung des zu \tilde{H}_h gehöriger Bewegungsgleichung und die mit ψ^h berechnete diskrete Lösung bis auf einen exponentiell kleinen Fehler übereinstimmen:

$$\left\| \phi_{\tilde{H}_h}^{mh} x - (\psi^h)^m x \right\| \leq C_1 \exp(-a/h)$$

mit Konstanten $C_1, a > 0$ unabhängig von h .

Insbesondere gilt dann für die Differenz zwischen numerischer und exakter Gesamtenergie

$$\left| H(\phi^{mh} x) - H((\psi^h)^m x) \right| \leq \mathcal{O}(h^p) + \mathcal{O}(\exp(-a/h))$$

3.1.3 Zeitumkehrinvarianz

Im vorherigem Abschnitt haben wir gezeigt, dass Hamiltonsysteme invariant unter Zeitumkehr sind. Es ist wünschenswert, dass diese Eigenschaft auf das numerische Verfahren vererbt wird. Zu einem gegebenem Verfahren lässt sich mit einer bestimmtem Schrittweite h aus dem Anfangswert y_0 zum Zeitpunkt t_0 der Wert y_1 zum Zeitpunkt $t_0 + h$ berechnen. Man zeigt, dass dieses Verfahren invariant unter Zeitumkehr ist, indem man die Invarianz bei Vertauschung von

$$y_0 \leftrightarrow y_1, \quad h \leftrightarrow -h$$

überprüft. Folgender Satz hilft bei der Entscheidung, ob Runge Kutta oder partitionierte Runge Kutta Verfahren invariant unter Zeitumkehr sind.

Satz 9 *Wenn für die Koeffizienten eines s -stufigen Runge Kutta Verfahrens gilt*

$$a_{s+1-i, s+1-j} + a_{ij} = b_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s$$

dann ist es invariant unter Zeitumkehr.

ohne Beweis

Satz 10 *Wenn für die Koeffizienten eines partitionierten Runge Kutta Verfahrens gilt*

$$\begin{aligned} a_{s+1-i, s+1-j} + a_{ij} &= b_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \\ \hat{a}_{s+1-i, s+1-j} + \hat{a}_{ij} &= \hat{b}_j, \quad \forall i, j = 1, \dots, s \end{aligned}$$

dann ist es invariant unter Zeitumkehr.

ohne Beweis

Nun wollen wir einige Strukturerhaltende Verfahren vorstellen.

3.2 Symplektischer Euler

Der Symplektische Euler ist ein Verfahren mit Konsistenzordnung $p = 1$. Es ist ein partitioniertes Runge Kutta Verfahren bestehend aus einem expliziten Euler und einem impliziten Euler.

$$\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

Anhand des Butcher Tableaus sehen wir, dass es symplektisch ist und quadratische Invarianten erhält. Für die Spezialfälle $\dot{y} = f(z)$ und $\dot{z} = g(y)$ vereinfacht sich das symplektische Euler Verfahren zu

$$\begin{aligned} k_1 &= f(z_0) \\ l_1 &= g(y_0 + hk_1) \\ y_1 &= y_0 + hf(z_0) \\ z_1 &= z_0 + hg(y_1) \end{aligned}$$

Für das Transformationsverhalten bei Zeitumkehr gilt bei Vertauschung

$$\begin{aligned} \tilde{y}_0 &= y_1 - hf(z_1) \\ \tilde{z}_0 &= z_1 - hg(\tilde{y}_0) \end{aligned}$$

Die Werte y_1 und z_1 eingesetzt

$$\begin{aligned}\tilde{y}_0 &= y_0 + hf(z_0) - hf(z_1) \neq y_0 \\ \tilde{z}_0 &= z_0 + hg(y_1) - hg(y_0) \neq z_0\end{aligned}$$

Damit ist der symplektische Euler nicht invariant bei Zeitumkehr. Speziell für separierte Hamiltonfunktionen $H(\vec{p}, \vec{q}) = T(\vec{p}) + U(\vec{q})$ und der Assoziierung von $y \leftrightarrow \vec{p}$ und $z \leftrightarrow \vec{q}$ nimmt der Algorithmus für einen Zeitschritt folgende Form an

$$\begin{aligned}\vec{p}_{k+1} &= \vec{p}_k - h\nabla U(\vec{q}_k) \\ \vec{q}_{k+1} &= \vec{q}_k + h\nabla T(\vec{p}_{k+1}), \quad k \in \mathbb{N}_0\end{aligned}$$

3.3 Implizite Mittelpunktsregel

Die implizite Mittelpunktsregel ist ein Verfahren mit Konsistenzordnung $p = 2$. Die Implizite Mittelpunktsregel kann im Butcher Tableau wie folgt notiert werden:

$$\left| \begin{array}{c} \frac{1}{2} \\ 1 \end{array} \right|$$

Wir sehen sofort ein, dass es quadratische Invarianten erhält und symplektisch ist. Es ist außerdem invariant unter Zeitumkehr zur DGL $\dot{y} = f(y)$, denn

$$y_1 = y_0 + hf\left(\frac{1}{2}(y_0 + y_1)\right) \leftrightarrow y_0 = y_1 - hf\left(\frac{1}{2}(y_1 + y_0)\right)$$

und damit

$$y_0 = y_1 - hf\left(\frac{1}{2}(y_1 + y_0)\right) = y_0 + hf\left(\frac{1}{2}(y_0 + y_1)\right) - hf\left(\frac{1}{2}(y_1 + y_0)\right) = y_0$$

3.4 Leap frog/Störmer-Verlet Verfahren

Kombiniert wir die Implizite Trapezregel (linkes Butcher Tableau) und die Implizite Mittelpunktsregel (Butcher Tableau rechts), dann erhalten wir ein partitioniertes Runge Kutta Verfahren der Konsistenzordnung $p = 2$.

$$\left| \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right| \quad \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right|$$

Wir sehen anhand dem Butcher Tableau, dass das Verfahren quadratische Invarianten erhält und symplektisch ist. Weiterhin ist es invariant unter Zeitumkehr. Speziell für partitionierte DGL der Form $\dot{y} = f(z)$ und $\dot{z} = g(y)$ erhalten wir

$$\begin{aligned}k_1 &= k_2 = f\left(z_0 + \frac{1}{2}hl_1\right) \\ l_1 &= g(y_0) \\ l_2 &= g\left(y_0 + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2)\right) = g(y_0 + hk_1) \\ y_1 &= y_0 + \frac{1}{2}h(k_1 + k_2) = y_0 + hk_1 \\ z_1 &= z_0 + \frac{1}{2}h(l_1 + l_2)\end{aligned}$$

Algorithmisch lässt sich dieses Einschrittverfahren wie folgt optimieren

$$\begin{aligned} z_{1/2} &= z_0 + \frac{1}{2}hl_1 = z_0 + \frac{1}{2}hg(y_0) \\ y_1 &= y_0 + hk_1 = y_0 + hf\left(z_0 + \frac{1}{2}hl_1\right) = y_0 + hf(z_{1/2}) \\ z_1 &= z_{1/2} + \frac{1}{2}hl_2 = z_{1/2} + \frac{1}{2}hg(y_0 + hk_1) = z_{1/2} + \frac{1}{2}hg(y_1) \end{aligned}$$

Diese Implementierung des Einschrittverfahrens entspricht gerade dem Verlet-Algorithmus. Dieser ist eine Modifikation des Leap frog Algorithmus. Es werden zwar y und z abwechselnd berechnet, dennoch sind die y - und z -Werte für die selbe Zeit bekannt und das ist der wesentliche Unterschied zum Leap frog Algorithmus. Die Invarianz unter Zeitumkehr lässt sich in diesem Fall auch explizit nachrechnen. Es gilt zunächst:

$$\begin{aligned} \tilde{z}_{1/2} &= z_1 - \frac{1}{2}hg(y_1) \\ \tilde{y}_0 &= y_1 - hf(\tilde{z}_{1/2}) \\ \tilde{z}_0 &= \tilde{z}_{1/2} - \frac{1}{2}hg(\tilde{y}_0) \end{aligned}$$

Damit

$$\begin{aligned} \tilde{z}_{1/2} &= z_{1/2} + \frac{1}{2}hg(y_1) - \frac{1}{2}hg(y_1) \quad \checkmark \\ \Rightarrow \tilde{y}_0 &= y_1 - hf(z_{1/2}) = y_0 + h(z_{1/2}) - hf(z_{1/2}) \quad \checkmark \\ \Rightarrow \tilde{z}_0 &= z_{1/2} - \frac{1}{2}hg(y_0) = z_0 + \frac{1}{2}hg(y_0) - \frac{1}{2}hg(y_0) \quad \checkmark \end{aligned}$$

Speziell für separierte Hamiltonfunktionen $H(\vec{p}, \vec{q}) = T(\vec{p}) + U(\vec{q})$ und der Assoziierung $y \leftrightarrow \vec{p}$ und $z \leftrightarrow \vec{q}$ nimmt der Algorithmus folgende Gestalt an

$$\begin{aligned} \vec{q}_{k+1/2} &= \vec{q}_k + \frac{1}{2}h\nabla T(\vec{p}_k) \\ \vec{p}_{k+1} &= \vec{p}_k - h\nabla U(\vec{q}_{k+1/2}) \\ \vec{q}_{k+1} &= \vec{q}_{k+1/2} + \frac{1}{2}h\nabla T(\vec{q}_{k+1}), \quad k \in \mathbb{N}_0 \end{aligned}$$

Der Verlet-Algorithmus angewandt auf Hamiltonsysteme wird Störmer-Verlet-Algorithmus genannt.

3.5 FR-Algorithmus und PEFRL-Algorithmus

Das folgende Verfahren besitzt Konsistenzordnung $p = 4$ und wurde von E.Forest[5] und R.D. Ruth[5] entwickelt. Dieser sogenannte FR-Algorithmus ist ein partitioniertes Runge Kutta Verfahren mit den Butcher Tableaus

$$\begin{array}{c|cccc|cccc} \frac{1}{2}\Theta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}(1-\Theta) & 0 & 0 & \Theta & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}(1-\Theta) & \frac{1}{2}(1-\Theta) & 0 & \Theta & (1-2\Theta) & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}(1-\Theta) & \frac{1}{2}(1-\Theta) & 0 & \Theta & (1-2\Theta) & \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}\Theta \\ \hline \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}(1-\Theta) & \frac{1}{2}(1-\Theta) & \frac{1}{2}\Theta & \Theta & (1-2\Theta) & \frac{1}{2}\Theta & \frac{1}{2}\Theta \end{array}$$

Für Konsistenzordnung $p = 4$ muss gelten

$$\Theta = \frac{1}{2 - \sqrt[3]{2}} \approx 1,3512\dots$$

Wir sehen anhand des Butcher Tableaus ein, dass der FR-Algorithmus quadratische Invarianten erhält und symplektisch ist. Der FR-Algorithmus vereinfacht sich für partitionierte DGL der Form $\dot{x} = g(v)$ und $\dot{v} = f(x)$, sodass sich der Algorithmus für einen Zeitschritt, nach dem selbem Prinzip wie beim Verlet Verfahren, wie folgt algorithmisch leicht realisieren lässt

$$\begin{aligned} x_{1/4} &= x_0 + \Theta \frac{h}{2} g(v_0) \\ v_{1/3} &= v_0 + \Theta h f(x_{1/4}) \\ x_{2/4} &= x_{1/4} + (1 - \Theta) \frac{h}{2} g(v_{1/3}) \\ v_{2/3} &= v_{1/3} + (1 - 2\Theta) h f(x_{2/4}) \\ x_{3/4} &= x_{2/4} + (1 - \Theta) \frac{h}{2} g(v_{2/3}) \\ v_1 &= v_{2/3} + \Theta h f(x_{3/4}) \\ x_1 &= x_{3/4} + \Theta \frac{h}{2} g(v_1) \end{aligned}$$

Wir entnehmen dem Algorithmus, dass dieser symmetrisch bzgl. der Mitte, also dem Rechenschritt $v_{2/3} = v_{1/3} + (1 - 2\Theta) h f(x_{2/4})$, ist, was die Rechenoperationen betrifft. Zusammen mit der Tatsache, dass ein Rechenschritt mehr für die x -Koordinate gemacht wird, ist der FR-Algorithmus invariant bei Zeitumkehr. Die Voraussetzungen nach Satz 10 sind jedoch nicht erfüllt, denn es gilt beispielsweise

$$\begin{aligned} i = 1 \wedge j = 2 &\Rightarrow a_{43} + a_{12} = b_2 \quad \wedge \quad \hat{a}_{43} + \hat{a}_{12} = \hat{b}_2 \\ &\Rightarrow \frac{1}{2}(1 - \Theta) + 0 = \frac{1}{2}(1 - \Theta) \quad \wedge \quad \frac{1}{2}\Theta + 0 = (1 - 2\Theta) \quad \text{Widerspruch} \end{aligned}$$

Deshalb ist das Verfahren für partitionierte DGL der Form (2.4) im Allgemeinen nicht invariant unter Zeitumkehr.

Ein anderes Verfahren, welches Konsistenzordnung $p = 4$ hat, bietet der "Position Extended Forest-Ruth Like" (PEFRL) Algorithmus. Beim PEFRL-Algorithmus wird jeweils pro x -Koordinate und v -Koordinate eine Auswertung mehr gemacht als beim FR-Algorithmus. Der PEFRL-Algorithmus lässt in den Butcher Tableaus wie folgt notieren

$$\begin{array}{c|ccccc} \xi & 0 & 0 & & 0 & 0 \\ \xi & \chi & 0 & & 0 & 0 \\ \xi & \chi & 1 - 2(\chi + \xi) & & 0 & 0 \\ \xi & \chi & 1 - 2(\chi + \xi) & \chi & 0 & \\ \xi & \chi & 1 - 2(\chi + \xi) & \chi & 0 & \\ \hline \xi & \chi & 1 - 2(\chi + \xi) & \chi & \xi & \end{array} \quad \begin{array}{c|cccccc} 0 & & 0 & 0 & 0 & & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & 0 & 0 & 0 & & & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \lambda & 0 & 0 & & & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \lambda & \lambda & 0 & & & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \lambda & \lambda & \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \frac{1}{2} & & 0 \\ \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \lambda & \lambda & \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \lambda & \lambda & \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \frac{1}{2} & \frac{1}{2}(1 - 2\lambda) & \frac{1}{2} \end{array}$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned} \xi &\approx 0,1789 \\ \lambda &\approx -0,21234 \\ \chi &\approx -0,06626 \end{aligned}$$

damit das Verfahren Konsistenzordnung $p = 4$ besitzt. Aus dem Butcher Tableau können wir folgern, dass der Algorithmus quadratische Invarianten erhält und symplektisch ist. Für den Spezialfall partitionierter DGL, lässt sich der Algorithmus für einen Zeitschritt wie folgt leicht realisieren

$$\begin{aligned}
 x_{1/5} &= x_0 + \xi hg(v_0) \\
 v_{1/4} &= v_0 + (1 - 2\lambda) \frac{h}{2} f(x_{1/5}) \\
 x_{2/5} &= x_{1/5} + \chi hg(v_{1/4}) \\
 v_{2/4} &= v_{1/4} + \lambda hf(x_{2/5}) \\
 x_{3/5} &= x_{2/5} + (1 - 2(\chi + \xi)) hg(v_{2/4}) \\
 v_{3/4} &= v_{2/4} + \lambda hf(x_{3/5}) \\
 x_{4/5} &= x_{3/5} + \chi gh(v_{3/4}) \\
 v_1 &= v_{3/4} + (1 - 2\lambda) \frac{h}{2} f(x_{4/5}) \\
 x_1 &= x_{4/5} + \xi hg(v_1)
 \end{aligned}$$

Mit der selben Argumentation schließen wir, dass der PEFRL-Algorithmus in diesem Spezialfall invariant unter Zeitumkehr ist; allgemein jedoch nicht.

Wir fassen die Eigenschaften der einzelnen Verfahren noch einmal in einer Tabelle zusammen.

	Ordnung	quad. Invarianten	symplektisch	zeitumkehrinvariant
Symplektischer Euler	1	ja	ja	nein
Impl. Mittelpunktsregel	2	ja	ja	ja
Verlet-Algorithmus	2	ja	ja	ja
FR-Algorithmus	4	ja	ja	i.A. nicht
PEFRL-Algorithmus	4	ja	ja	i.A. nicht

3.6 Diskussion der Verfahren

Wir wollen die Verfahren angewandt auf partitionierte DGL der speziellen Form $\dot{y} = f(z)$ und $\dot{z} = g(y)$ zusammenfassen. Für nicht separierbare Hamiltonfunktionen (dieser Fall tritt sehr häufig auf) nehmen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen die Form nach Gleichung (2.4) an und die präsentierten Verfahren werde alle implizit.

Der symplektische Euler ist ein Verfahren mit Konsistenzordnung 1 und benötigt pro Zeitschritt zwei Funktionsauswertungen. Die implizite Mittelpunktsregel ist ein Verfahren der Ordnung 2 und braucht eine Funktionsauswertung pro Zeitschritt. Allerdings muss für jeden Zeitschritt für den Wert y_1 ein in der Regel nicht lineares Gleichungssystem numerisch gelöst werden. Der Verlet Algorithmus als Verfahren mit Ordnung 2 benötigt bei geschickter Implementierung eine Funktionsauswertung mehr als der symplektische Euler. Das Verfahren ist außerdem rein explizit. Der PEFRL-Algorithmus benötigt mit 9 Funktionsauswertungen zwei mehr als der FR-Algorithmus bei gleicher Konsistenzordnung.

Die Strukturertretenden Verfahren wurden bei der Simulation des harmonischen Oszillators mit der Hamiltonfunktion

$$H(p, q) = \frac{1}{2} (p^2 + q^2) , \quad p(0) = 0 , \quad q(0) = 1$$

mit den Standard-einschrittverfahren verglichen. Die analytische Lösung des harmonischen Oszillators zu den gegebenen Anfangsbedingungen ist eine Funktion mit Periode 2π und beschreibt

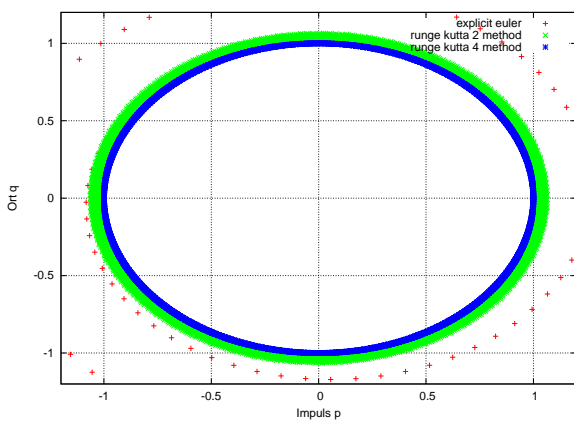


Abbildung 3.1: Diagramm im Phasenraum für den expliziten Euler, das Runge Kutta 2 Verfahren und das Runge Kutta 4 Verfahren

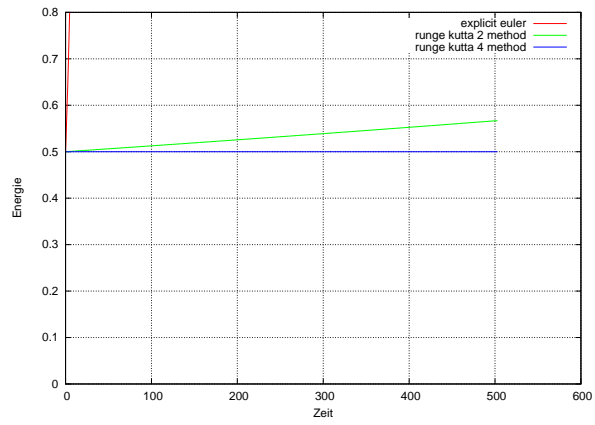


Abbildung 3.2: Zeitentwicklung der Gesamtenergie für den expliziten Euler, das Runge Kutta 2 Verfahren und das Runge Kutta 4 Verfahren

den Einheitskreis im Phasenraum. Die Gesamtenergie sei $1/2$. Jedes Verfahren hat die Zeitentwicklung für die Dauer von 80 Perioden berechnet. Die Abbildungen 3.1 und 3.2 präsentieren das Verhalten der Standardeinschrittverfahren. Die berechneten Werte mit dem expliziten Euler entfernen sich bereits nach einer Periode von der analytischen Lösung. Die berechnete Gesamtenergie steigt sehr schnell an, sodass der Kurvenlauf nur auf der linken Seite im Darstellungsbereich des Diagramms liegt. Beim Runge Kutta 2 Verfahren sehen wir besonders gut den auftretenden Energiedrift. Beim Runge Kutta 4 Verfahren tritt ein minimaler Energiedrift nach unten ein, welcher nicht auf dem Diagramm zu erkennen ist. Die berechnete Gesamtenergie beträgt beim Runge Kutta 4 Verfahren zum Endzeitpunkt 0,499965. Die Abbildungen 3.3

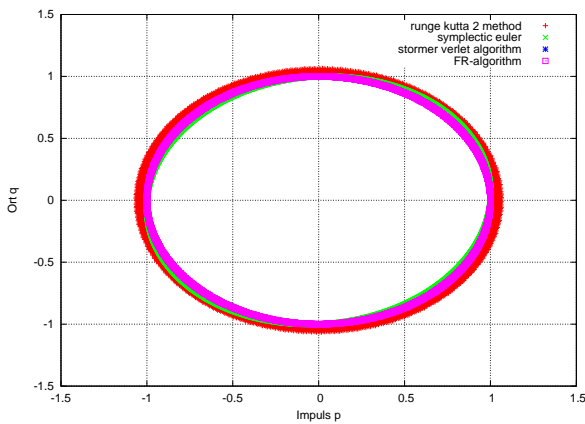


Abbildung 3.3: Diagramm im Phasenraum für das Runge Kutta 2 Verfahren, den symplektischen Euler, den Verlet-Algorithmus und den FR-Algorithmus

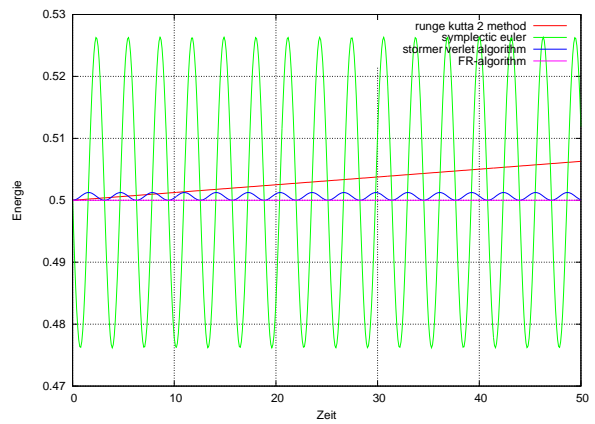


Abbildung 3.4: Zeitentwicklung der Gesamtenergie für das Runge Kutta 2 Verfahren, den symplektischen Euler, den Verlet-Algorithmus und den FR-Algorithmus

und 3.4 vergleichen das Verhalten der Strukturerehaltenden Verfahren mit dem Runge Kutta 2 Verfahren. Besonders gut erkennen wir die Oszillation der berechneten Gesamtenergie, dessen

Amplitude vom symplektischen Euler zum FR-Algorithmus immer schwächer wird. Die Energiezeitentwicklung wurde auf das Zeitintervall $[0, 50]$ eingeschränkt. Die berechnete Energie oszilliert in guter Näherung mit der selben Periode wie die analytische Lösung. Es ist interessant zu bemerken, dass das Runge Kutta 2 Verfahren zunächst näher an der exakten Gesamtenergie liegt als der symplektische Euler und als der Verlet Algorithmus. Tatsächlich liegt die Stärke Strukturerhaltender Verfahren in der Langzeitenergieerhaltung.

Außerdem wurde die maximale Abweichung ΔE_{max} der numerischen Gesamtenergie von der exakten Gesamtenergie für die Dauer von 80 Perioden für den Symplektischen Euler, den Verlet Algorithmus, den FR-Algorithmus und den PEFRL-Algorithmus berechnet.

	Syml. Euler	Verlet	FR	PEFRL
$h = 0,02$	0,0050505	5,0005e-05	6,05809e-09	2,30947e-10
$h = 0.005$	0,00125313	3,12502e-06	2,19253e-11	8,6392e-13

Der PEFRL Algorithmus besitzt die beste Genauigkeit, was die Abweichung zwischen numerischer und exakter Gesamtenergie betrifft. An zweiter Stelle ist der FR-Algorithmus und danach das Verlet Verfahren und der symplektische Euler. Der PEFRL-Algorithmus benötigt pro Zeitschritt jedoch 3-mal so viele Funktionsauswertungen wie das Verlet Verfahren. Um die Effizienz fair zu vergleichen, rechnet der PEFRL-Algorithmus mit 3-mal so großer Schrittweite als das Verlet Verfahren, so dass für das Zeitintervall $[t, t + h]$ die selbe Anzahl an Funktionsauswertungen benötigt werden.

	Verlet	FR	PEFRL
ΔE_{max}	3,12502e-06	1,90929e-09	7,29032e-11

Der PEFRL-Algorithmus ist unter diesen Umständen viel genauer als das Verlet-Verfahren ist. Die Genauigkeit des FR-Algorithmus unterscheidet sich bei dreimal so großer Schrittweite um 3 Größenordnungen vom Verlet Algorithmus.

Wenn sich die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen nicht auf die spezielle Form einer partitionierten DGL bringen lassen, dann verlieren der FR-Algorithmus und der PEFRL-Algorithmus im Allgemeinen die strukturerhaltende Eigenschaft der Zeitumkehr. In diesem Fall behalten nur die Implizite Mittelpunktsregel und das Verlet Verfahren alle strukturerhaltenden Eigenschaften.

Literaturverzeichnis

- [1] Vorlesungsmitschrieb Theoretische Physik II bei Prof. Salmhofer SS 2009
- [2] Ralf Hiptmair. Numerische Mathematik (Numerik der ODEs)
- [3] P. Young. The leapfrog method and other symplectic algorithms for integrating Newton's laws of motion
- [4] B. Schmidt und C. Schütte. Hamilton'sche Systeme und klassische Molekulardynamik
- [5] E. Forest and R.D. Ruth. Fourth order symplectic integration