

## 6 Strukturerhaltende Integratoren

### 6.1 Motivation

Das zentrale Anliegen von strukturerhaltenden (“geometrischen”) Integratoren ist gewisse qualitative Eigenschaften des betrachteten dynamischen Systems ins Diskrete zu vererben. Mit den Konzepten von A-Stabilität und B-Stabilität haben wir bereits zwei Beispiele kennengelernt, bei denen (gewissen) Eigenschaften des Lösung einer ODE ins Diskrete vererbt werden. Wesentliche Eigenschaften von dynamischen Systemen, die in der klassischen Mechanik auftreten sind Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung auf. Es ist deshalb von Interesse, numerische Verfahren zu betrachten, die diese Eigenschaften ebenfalls haben.

Wir betrachten im gesamten Kapitel nur *autonome* Systeme, d.h. Differentialgleichungen der Form

$$\mathbf{y}' = f(\mathbf{y}) \quad (6.1.1)$$

bei denen die rechte Seite nicht explizit von  $t$  abhängt. Weiterhin nehmen wir in diesem Kapitel an, daß  $f$  hinreichend glatt ist.

**Beispiel 6.1.** Wir betrachten das *mathematische Pendel*, welches der Gleichung

$$q'' + \frac{g}{\ell} \sin q = 0 \quad (6.1.2)$$

genügt. Hier stellt  $q$  die Winkelauslenkung von der Ruhelage dar,  $\ell$  ist die Länge des Fadens und  $g$  die Erdschleunigung.  $q'$  stellt entsprechend die Winkelgeschwindigkeit dar. Die linke Graphik in Fig. 6.1 zeigt das (erwartete) periodische Verhalten für den Fall  $g = \ell = 1$ ,  $q(0) = \pi/2$ ,  $q'(0) = 0$ .

Die Gesamtenergie ist  $H(q', q)$ , wobei die *Hamilton-Funktion*  $H$  definiert ist als

$$H(p, q) = \underbrace{\frac{1}{2}\ell^2 p^2}_{\text{kin. Energie}} - \underbrace{g\ell \cos q}_{\text{pot. Energie}} \quad (6.1.3)$$

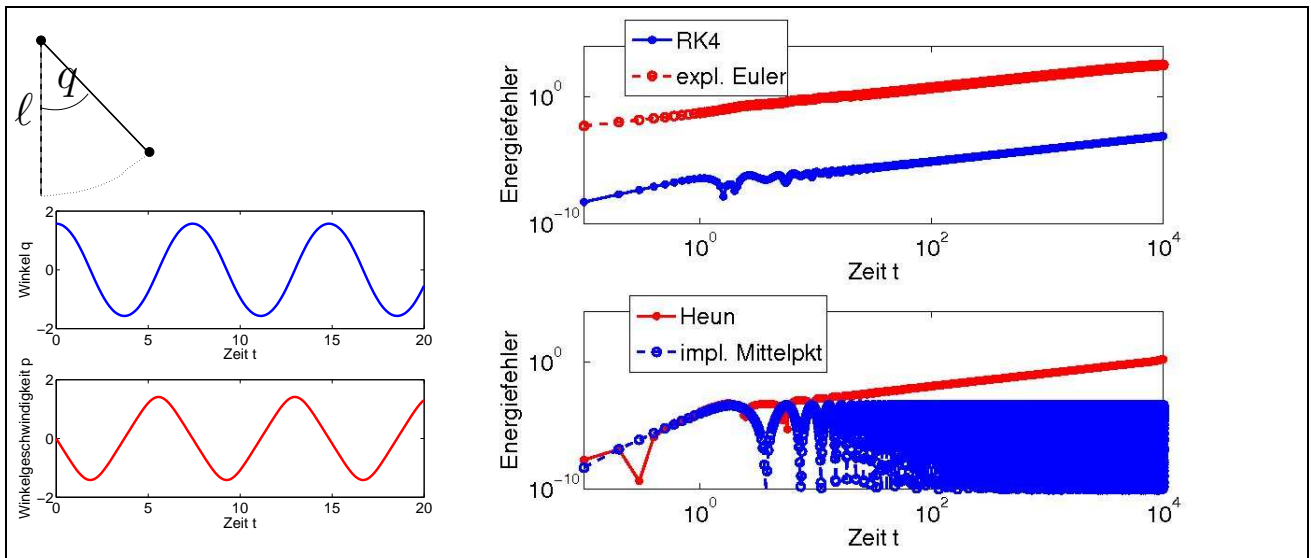
Die rechte Graphik in Fig. 6.1 zeigt das *Langzeitverhalten* verschiedener Integratoren. Es werden  $10^5$  Zeitschritte mit  $h = 0.1$  für das RK4, das explizite Eulerverfahren, das Heunverfahren und die implizite Mittelpunktsregel (d.h. das  $\theta$ -Schema mit  $\theta = 1/2$  bzw. das 1-stufige Gauß-Verfahren) verglichen. Wir sehen, daß mit Ausnahme der Mittelpunktsregel der Energiefehler in der Zeit wächst. Bei der Mittelpunktsregel ist der Energiefehler nicht Null, bleibt aber in der Zeit beschränkt. ■

**Beispiel 6.2.** Wir betrachten das Keplerproblem

$$\mathbf{q}'' = -\frac{1}{\|\mathbf{q}\|_2^3} \mathbf{q},$$

wobei  $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$ . Dabei beschreibt  $\mathbf{q}$  den Ort eines Körpers unter dem Einfluß der Anziehung eines zweiten Körpers. Das Koordinatensystem wurde so gewählt, daß der Ursprung im Zentrum des zweiten Körpers ist (man stelle sich das System Sonne-Erde vor). Alle Konstanten wurden zu 1 gewählt. Die Anfangsdaten sind

$$\mathbf{q}(0) = \begin{pmatrix} 1 - e \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}'(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \end{pmatrix},$$



**Figur 6.1:** Links:  $q$  und  $q'$  über  $t$ ; rechts: Energiefehler für verschiedene Verfahren

Die Bahn ist dann eine Ellipse mit Exzentrizität  $e \in [0, 1)$ . ■

### 6.1.1 Hamiltonsche Systeme

Ein wichtiges Beispiel autonomer System sind *Hamiltonsche Systeme*<sup>1</sup> in der klassischen Mechanik. Sie haben die folgende Form:

$$\mathbf{p}' = -\nabla_{\mathbf{q}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (6.1.4a)$$

$$\mathbf{q}' = \nabla_{\mathbf{p}}H(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (6.1.4b)$$

Hier ist  $H$  ein reellwertige Funktion (die *Hamilton-Funktion*);  $p \in \mathbb{R}^d$  heißt (verallgemeinerter) Impuls und  $q \in \mathbb{R}^d$  die (verallgemeinerte) Ortskoordinate. Man schreibt das System (6.1.4) auch in der Form

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}' = \mathbf{J}^{-1}\nabla H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad \left( \implies \mathbf{J}^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \right) \quad (6.1.5)$$

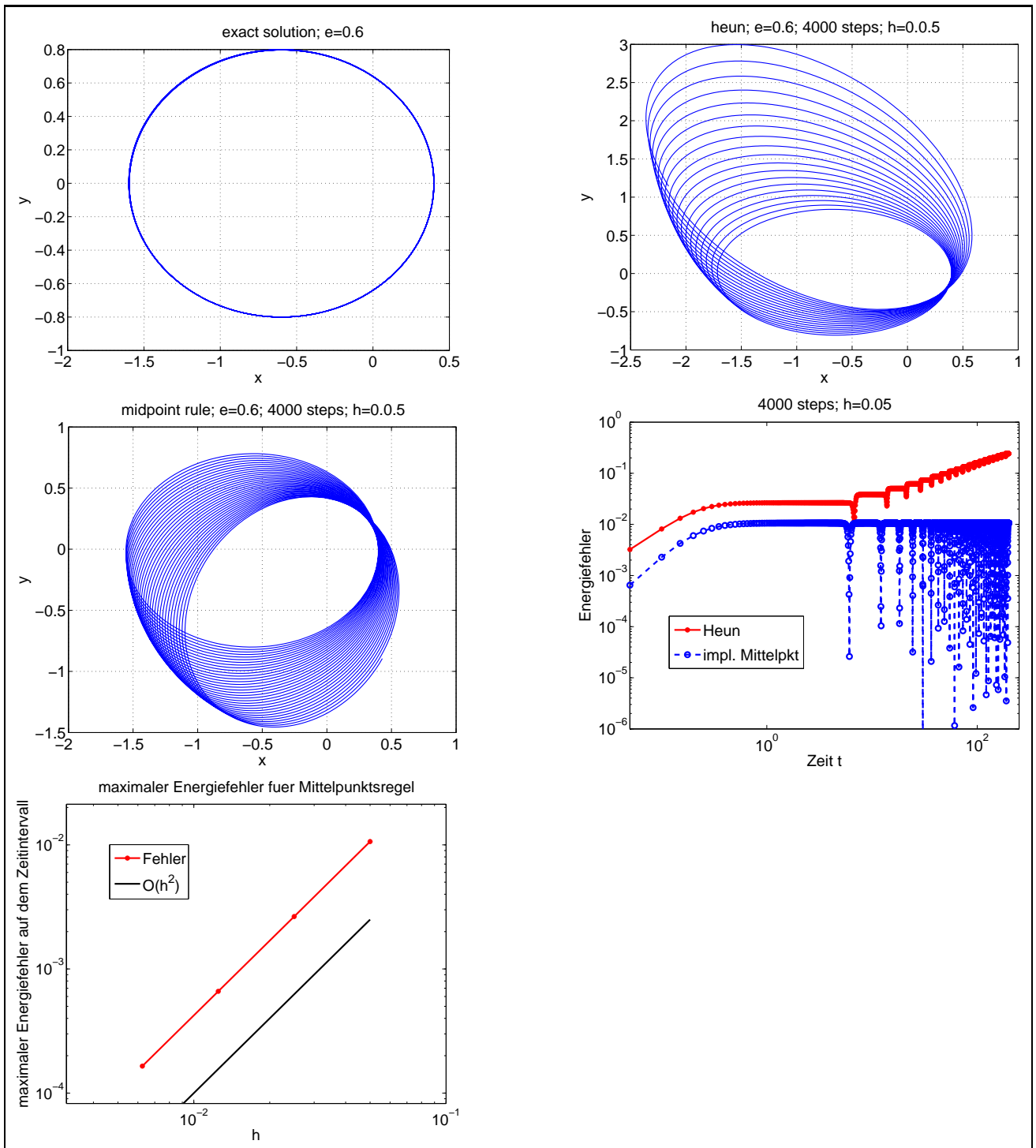
Beispiele von hamiltonschen Systemen haben wir in Beispielen 6.1 und 6.2 kennengelernt. Dort hatte  $H$  die physikalische Bedeutung der Gesamtenergie des Systems, die ja erhalten wird. Allgemein ist  $H$  eine Invariante eines hamiltonschen Systems: Eine große Klasse von Hamilton-Funktionen hat die folgende additive Form:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q}). \quad (6.1.6)$$

Hier ist  $T$  die kinetische Energie, welche im Beispiel (6.1.6) *nur* vom Impuls abhängt und  $U$  die potentielle Energie, welche in (6.1.6) nur vom Ort abhängt. Die Hamilton-Funktion stellt als Summe von kinetischer und potentieller Energie gerade die Gesamtenergie dar.

---

<sup>1</sup>William Rowan Hamilton, 1805–1865



**Figur 6.2:** Das Keplerproblem. Bahn ist eine Ellipse mit Exzentrizität  $e = 0.6$

**Beispiel 6.3.** Ein typisches Beispiel ist ein Vielteilchensystem unter dem Einfluß gegenseitiger Anziehung (z.B. Gravitation). Seien  $N \geq 2$  Teilchen<sup>2</sup> mit Massen  $m_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , Positionen  $\mathbf{q}_i \in \mathbb{R}^3$ ,  $i = 1, \dots, N$  und Impulsen  $\mathbf{p}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  (d.h.  $\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{q}'_i$ ). Definiere die Hamilton-Funktion

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^\top \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} + U(\mathbf{q}), \quad U(\mathbf{q}) = - \sum_{\ell=2}^N \sum_{n=1}^{\ell-1} \gamma m_\ell m_n \frac{1}{\|\mathbf{q}_\ell - \mathbf{q}_n\|},$$

wobei  $\mathbf{M} = \text{diag}(m_1, \dots, m_N)$  und  $\gamma$  ist die Gravitationskonstante. Hier stellt die Hamilton-Funktion  $H$  die Gesamtenergie des Systems dar. Betrachtet man für diese Hamilton-Funktion das System (6.1.4), so ergeben sich die klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}'_i &= \partial_{\mathbf{p}_i} H = m_i^{-1} \mathbf{p}_i \\ \mathbf{p}'_i &= -\partial_{\mathbf{q}_i} H = -\gamma \sum_{\ell=2}^N \sum_{n=1}^{\ell-1} m_\ell m_n \frac{1}{\|\mathbf{q}_\ell - \mathbf{q}_n\|^2} \frac{\mathbf{q}_\ell - \mathbf{q}_n}{\|\mathbf{q}_\ell - \mathbf{q}_n\|} (\delta_{\ell,i} - \delta_{n,i}) \\ &= \dots = \gamma \sum_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq i}}^N m_\ell m_i \frac{\mathbf{q}_\ell - \mathbf{q}_i}{\|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_\ell\|^3} \end{aligned}$$

**Übung 6.4.** Zeigen sie: Das System aus Beispiel 6.3 erfüllt neben der bekannten Energieerhaltung (siehe Übung 6.6) auch:

- (i) Impulserhaltung:  $P = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i(t) = \text{const}$
- (ii) Drehimpulserhaltung:  $L = \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i(t) \times \mathbf{p}_i(t) = \text{const}$

■

## 6.2 Einfache Invarianten

Wir bezeichnen (für hinreichend kleine  $h$ ) mit  $\Phi^h$  den *Fluß*, d.h.

$$\Phi^h(\mathbf{y}_0) = \mathbf{y}_{t_0, \mathbf{y}_0}(t_0 + h) \tag{6.2.7}$$

wobei  $t_0$  beliebig ist<sup>3</sup>. In der Folge werden wir deshalb

$$t_0 = 0$$

wählen. Wir bezeichnen  $t \mapsto \Phi^t(\mathbf{y}_0)$  auch als (*kontinuierliche*) *Evolution* des Startwerte  $\mathbf{y}_0$ . Entsprechend erhält man einen *numerischen Fluß*  $\Psi^h$ : Mit  $\Psi^h(\mathbf{y}_0)$  bezeichnen wir die numerische Approximation  $\mathbf{y}_1$  an  $\Phi^h(\mathbf{y}_0)$ , die durch einen Schritt der Länge  $h$  eines numerischen Verfahrens erhalten wird (im konkreten Kontext ist dann immer klar, um welches numerische Verfahren es sich handelt). Wir nennen  $h \mapsto \Psi^h(\mathbf{y}_0)$  entsprechend die *diskrete Evolution*.

Wir nennen eine Funktion  $I : G \rightarrow \mathbb{R}$  eine *Invariante/erstes Integral* des autonomen Systems (6.1.1), falls  $t \mapsto I(\Phi^t(\mathbf{y})) = \text{const}$  für *jeden* Startwert  $\mathbf{y} \in G$ . Es gilt:

<sup>2</sup>das können auch Planeten oder Sterne sein...

<sup>3</sup>man überzeuge sich von dieser Eigenschaft autonomer Systeme

**Satz 6.5.** Sei  $G \subset \mathbb{R}^d$  offen. Sei  $f \in C(G; \mathbb{R}^d)$  und  $I \in C^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{R})$ . Dann gilt:  $I$  ist eine Invariante für (6.1.1) genau dann, wenn

$$\nabla I(\mathbf{y}) \cdot f(\mathbf{y}) = 0 \quad \mathbf{y} \in G. \quad (6.2.8)$$

**Beweis:** Übung. □

Für Hamiltonsche Systems ist die Hamilton-Funktion eine Invariante:

**Übung 6.6.** Die Hamilton-Funktion  $H$  ist eine Invariante des autonomen Systems (6.1.4).

Praktisch wichtig sind *lineare* und *quadratische* Invarianten. Wir sagen, daß  $I$  eine lineare bzw. quadratische Invariante ist, falls sie von der folgenden Form sind:

$$\begin{aligned} I(\mathbf{y}) &= \mathbf{c}^\top \mathbf{y} + g \\ I(\mathbf{y}) &= \frac{1}{2} \mathbf{y}^\top \mathbf{Q} \mathbf{y} + \mathbf{c} \mathbf{y} + g \end{aligned}$$

für geeignete  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ ,  $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^d$ ,  $g \in \mathbb{R}$ .

**Beispiel 6.7.** Laut Übung 6.4 sind die 3 Komponenten des Impulses in Bsp. 6.3 Beispiele für lineare Invarianten, die 3 Komponenten des Drehimpulses in Bsp. 6.3 sind quadratische Invarianten des Systems. ■

Runge-Kutta-Verfahren erhalten lineare Invarianten und können quadratische Invarianten erhalten:

**Satz 6.8.** (i) Jedes RK-Verfahren erhält lineare Invarianten

(ii) Die Gauß-Verfahren erhalten quadratische Invarianten.

**Beweis:** ad (i): Übung

ad (ii): Die Kernidee wurde bereits in den Übungen beim Beweis der B-Stabilität der Gauß-Verfahren vorgeführt. Das  $s$ -stufige Gauß-Verfahren ist ein Kollokationsverfahren, d.h.  $\pi \in (\mathcal{P}_s)^d$  wird so bestimmt, daß

$$\pi'(c_i h) = f(\pi(c_i h)), \quad i = 1, \dots, s \quad \text{und} \quad \pi(0) = \mathbf{y}_0 \quad (6.2.9)$$

gilt. Ein Schritt des Verfahrens ist damit gegeben durch  $\mathbf{y}_1 = \pi(1)$ . Für quadratische Invarianten  $I$  ist die Funktion  $t \mapsto d(t) := I(\pi(t))$  ein Polynom vom Grad  $2s$ . Damit ist  $d'$  ein Polynom vom Grad  $2s - 1$ , welches exakt mit der Gaußquadratur integriert wird. Es gilt damit

$$\begin{aligned} I(\mathbf{y}_1) &= I(\pi(1)) = d(1) = d(0) + \int_{t=0}^1 d'(t) dt = d(0) + \sum_{i=1}^s b_i d'(c_i) \\ &\stackrel{(6.2.9)}{=} d(0) + \sum_{i=1}^s b_i \underbrace{\nabla I(\pi(c_i h)) \cdot f(\pi(c_i h))}_{\stackrel{(6.2.8)}{=} 0} = d(0) = I(\pi(0)) = I(\mathbf{y}_0). \end{aligned}$$

□

**Bemerkung 6.9.** RK-Verfahren erhalten typischerweise nicht andere Invarianten (also z.B. kubische Invarianten). I.a. erhalten RK-Verfahren deshalb *nicht* die Energie, auch wenn bei typischen Hamiltonschen Systemen die Energie über sehr, sehr lange Zeiten fast erhalten wird. ■

## 6.2.1 Differenzierbarkeitseigenschaften des Flußes

Wir führen für vektorwertige Funktionen  $g \in C^1(G; \mathbb{R}^d)$  (mit  $G \subset \mathbb{R}^d$ ) die Notation  $Dg$  für die Ableitung (“Jacobische”) ein. Dabei ist  $Dg(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{d \times d}$  mit

$$(Dg(\mathbf{y}))_{ij} = \partial_j g_i(\mathbf{y}).$$

Weil  $\Phi^h(\mathbf{y}_0) = \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(h)$  ist, bedeutet das Differenzieren von  $\Phi^h$  nach seinem Argument gerade das Differenzieren der Lösung eines Anfangswertproblems nach seinen Startwerten. Diese Aufgabe haben wir bereits in Übung 1.7 für den skalaren Fall betrachtet. Diese Aussage gilt auch für vektorwertige Funktionen:

**Lemma 6.10.** *Es sei  $t \mapsto \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)$  Lösung des Anfangswertproblems  $\mathbf{y}' = f(\mathbf{y})$ ,  $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$ . Dann erfüllt die Abbildung  $W : t \mapsto W(t) = D_{\mathbf{y}_0} \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)$  das Anfangswertproblem*

$$W' = Df(\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t))W(t), \quad W(0) = I$$

**Beweis:** Wir zeigen hier nicht, daß  $\mathbf{y}_0 \mapsto \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)$  differenzierbar ist—der Beweis funktioniert genau wie in den Übungen. Daß diese Ableitung dann tatsächlich die angegebene Form hat, folgt wie im Beweis von Lemma 5.5 durch Differenzieren der ODE nach  $\mathbf{y}_0$  und Vertauschen der Differentiationen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t) &= f(\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)) \\ W(t) &= D_{\mathbf{y}_0} \frac{d}{dt} \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t) = D_{\mathbf{y}_0} f(\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)) = Df(\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)) D_{\mathbf{y}_0} \mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t) = Df(\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t)) W(t). \end{aligned}$$

Die Anfangsbedingung folgt aus dem Differenzieren (nach  $\mathbf{y}_0$ ) der Gleichung  $\mathbf{y}_{0, \mathbf{y}_0}(t_0) = \mathbf{y}_0$ .  $\square$

Wir formulieren diese Aussage noch als Aussage für  $\Phi^h$ :

**Korollar 6.11.** *Sei  $\Phi^h$  der Fluß zur ODE  $\mathbf{y}' = f(\mathbf{y})$ . Dann gilt:*

$$D_{\mathbf{y}} \Phi^h(\mathbf{y}) = I + O(h)$$

**Beweis:** In der Notation von Lemma 6.10 ist  $D_{\mathbf{y}} \Phi^h(\mathbf{y}) = W(h)$ . Weil  $W(0) = I$  und  $W$  stetig differenzierbar ist, gilt  $W(h) = W(0) + O(h)$ , d.h.  $D_{\mathbf{y}} \Phi^h(\mathbf{y}) = W(h) = I + O(h)$ .  $\square$

## 6.3 Reversible Systeme

**Satz 6.12.** *Sei  $f$  (lokal) lipschitzstetig. Dann erfüllt der Fluß  $\Phi^h$  (für hinreichend kleine  $h$ ) die Beziehung*

$$\Phi^{-h} \circ \Phi^h = \text{Id} \tag{6.3.10}$$

**Beweis:** Übung. *Hinweis:* Eindeutigkeit der Lösung von Anfangswertproblemen.  $\square$

Die Reversibilität (“Symmetrie bzgl. Zeitumkehr”) von autonomen Systemen ist eine Eigenschaft, die nicht automatisch ins Diskrete vererbt wird. Wir sagen deshalb das ein Einschrittverfahren reversibel/symmetrisch ist, falls

$$\Psi^{-h} \circ \Psi^h = \text{Id} \quad (\text{für hinreichend kleine } h) \tag{6.3.11}$$

**Bemerkung 6.13.** Praktisch ist es einfach zu testen, ob ein RK-Verfahren symmetrisch/reversibel ist: man schaut, ob bei Vertauschung  $y_1 \leftrightarrow y_0$  und  $h \leftrightarrow -h$  das gleiche Verfahren entsteht. Beispiel: die implizite Mittelpunktsregel (Crank-Nicholson-Verfahren) ist

$$y_1 = y_0 + hf((y_0 + y_1)/2) \quad \leftrightarrow \quad y_0 = y_1 - hf((y_1 + y_0)/2)$$

■

Es gilt allgemeiner

**Satz 6.14.** *Ein  $s$ -stufiges RK-Verfahren ist reversibel/symmetrisch, falls gilt:*

$$a_{s+1-i, s+1-j} + a_{ij} = b_j \quad \forall 1 \leq i, j \leq s. \quad (6.3.12)$$

**Beweis:** Übung. □

**Korollar 6.15** (Symmetrie der Gauß-Verfahren). *Die Gauß-Verfahren sind symmetrisch/reversibel.*

**Beweis:** Übung. *Hinweis:* Die Gaußverfahren sind das Kollokationsverfahren zu den Gaußpunkten. Diese sind symmetrisch bzgl. dem Intervallmittelpunkt  $1/2$ . □

Die Reversibilität (6.3.10) kann auch geschrieben werden als

$$\Phi^{-h} = (\Phi^h)^{-1}. \quad (6.3.13)$$

Dies motiviert, die folgende Definition:

**Definition 6.16** (adjungierte Methode). *Sei  $\Psi^h$  die von einem Einschrittverfahren induzierte diskrete Evolution. Dann ist die adjungierte Evolution  $(\Psi^h)^*$  definiert durch*

$$(\Psi^h)^* = (\Psi^{-h})^{-1} \quad (6.3.14)$$

**Beispiel 6.17.** Praktisch ist es einfach, die adjungierte Methode zumindest hinzuschreiben: man macht die Vertauschungen  $y_1 \leftrightarrow y_0$  und  $h \leftrightarrow -h$ . Z.B. ist das implizite Eulerverfahren gerade das adjungierte zum expliziten Eulerverfahren:

$$y_1 = y_0 + hf(y_0) \quad \xleftrightarrow{y_1 \leftrightarrow y_0, h \leftrightarrow -h} \quad y_0 = y_1 - hf(y_1)$$

■

Die Bezeichnung “adjungiert” suggeriert einige Eigenschaften, die auch von Matrizen (und allgemeiner linearen Operatoren) gelten. In der Tat:

**Satz 6.18.** *Seien  $\Psi_1^h$  und  $\Psi_2^h$  zwei diskrete Evolutionen, die von Einschrittverfahren herrühren. Dann gilt (für  $h$  hinreichend klein):*

$$(i) \quad ((\Psi_1^h)^*)^*$$

$$(ii) \quad (\Psi_1^h \circ \Psi_2^h)^* = (\Psi_2^h)^* \circ (\Psi_1^h)^*$$

**Beweis:** Übung. □

Eine Anwendung der adjungierten Methode ist, reversible/symmetrische Verfahren zu konstruieren:

**Übung 6.19.** Sei  $\Psi^h$  die Evolution, die von einem Einschrittverfahren herrührt. Dann sind die Verfahren

$$\Psi_1^{2h} := (\Psi^h)^* \circ \Psi^h \quad \text{und} \quad \Psi_2^{2h} := \Psi^h \circ (\Psi^h)^*$$

reversible/symmetrisch. ■

**Beispiel 6.20.** In Übung 6.19 ergibt sich durch Verkettung zweier Verfahren, die je einen Schritt der Länge  $h$  machen, ein neues Verfahren, welches einen Schritt der Länge  $2h$  macht. Man macht deshalb üblicherweise 2 Schritte der Länge  $h/2$ . Z.B. ergibt sich, falls  $\Psi^h$  durch das explizite Eulerverfahren gegeben ist (nach Beispiel 6.17 ist das zum expliziten Eulerverfahren adjungierte Verfahren gerade das implizite Eulerverfahren) für die Komposition  $(\Psi^{h/2})^* \circ \Psi^{h/2}$ :

$$\begin{aligned} y_{1/2} &= y_0 + h/2 f(y_0) && \text{expl. Euler mit Schrittlänge } h/2 \\ y_1 &= y_{1/2} + h/2 f(y_1) && \text{impl. Euler mit Schrittlänge } h/2 \\ \implies y_1 &= y_0 + h/2 (f(y_0) + f(y_1)), \end{aligned}$$

was gerade die implizite Trapezregel ist. Diese ist in der Tat symmetrisch (vgl. Satz 6.18, Bemerkung 6.13). ■

Ein Verfahren, welches sich aus der Verkettung von verschiedenen Verfahren ergibt ist natürlich komplizierter zu implementieren. Andererseits kann sich auch die Ordnung erhöhen wie Beispiel 6.20 zeigt: das explizite (und implizite) Eulerverfahren hat Ordnung 1 während die Mittelpunktsregel Ordnung 2 hat. Allgemein gilt, daß reversible/symmetrische Verfahren nur eine gerade Ordnung haben können (weshalb die Ordnung des in Beispiel 6.20 gerade sein muß, d.h. mindestens 2):

**Satz 6.21.** Sei  $\Psi^h$  die diskrete Evolution zu einem Verfahren der Ordnung  $p$ , und es gelte für den Konsistenzfehler

$$\Psi^h(\mathbf{y}_0) - \Phi^h(y_0) = C(\mathbf{y}_0)h^{p+1} + O(h^{p+2}), \quad |h| \rightarrow 0,$$

für eine  $C^1$ -Funktion  $\mathbf{y}_0 \mapsto C(\mathbf{y}_0)$  (beachte: wir verlangen hier, daß  $h$  auch negative Werte annehmen darf). Weiterhin nehmen wir an, daß die diskrete Evolution  $\Psi^h$  hinreichend glatt ist. Dann gilt für den Konsistenzfehler des adjungierten Verfahrens  $(\Psi^h)^*$  mit derselben Konstante  $C(y_0)$ :

$$(\Psi^h)^*(\mathbf{y}_0) - \Phi^h(\mathbf{y}_0) = (-1)^p C(\mathbf{y}_0)h^{p+1} + O(h^{p+2}).$$

Insbesondere gilt für reversible/symmetrische Verfahren, daß  $p$  gerade sein muß.

**Beweis:** Gesucht ist eine Abschätzung für

$$e^* := (\Psi^h)^*(\mathbf{y}_0) - \Phi^h(\mathbf{y}_0).$$

Hierzu betrachten wir (vgl. Fig. 6.3)

$$e = \Psi^{-h}(\Phi^h(\mathbf{y}_0)) - \Phi^{-h}(\Phi^h(\mathbf{y}_0)) \stackrel{Vor.}{=} C(\Phi^h(\mathbf{y}_0))(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \quad (6.3.15)$$

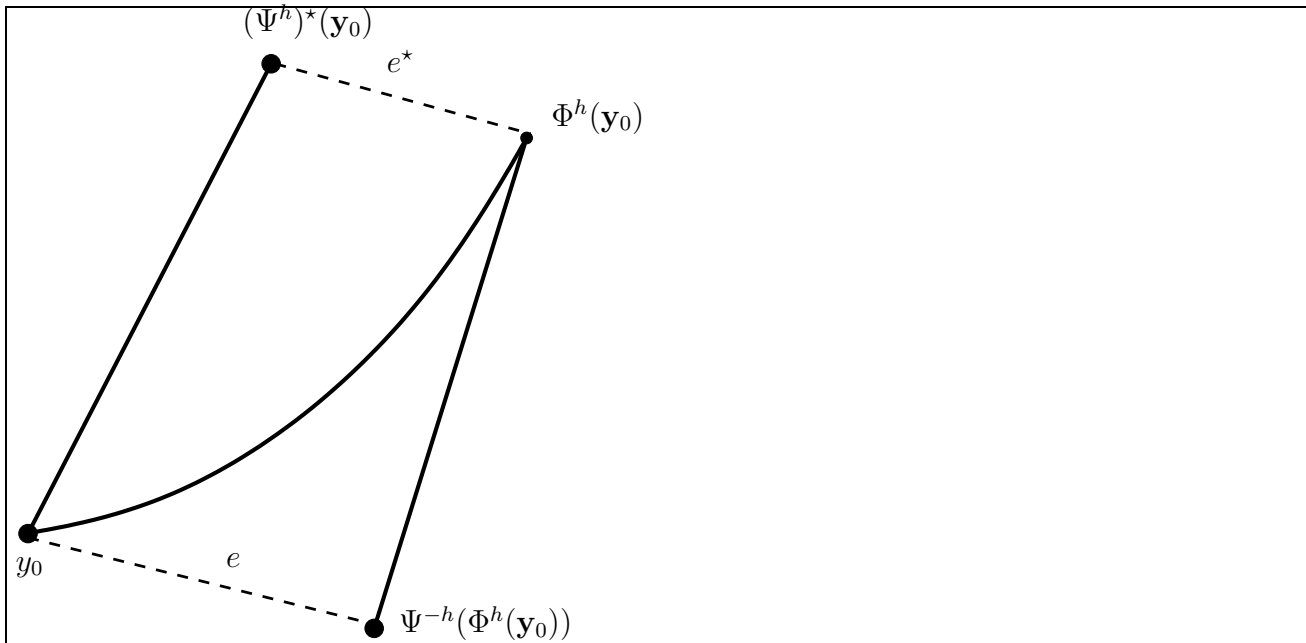


Figure 6.3: Skizze zum Beweis von Satz 6.21.

Weiters ergibt sich nach Definition von  $(\Psi^h)^*(y_0)$

$$\Psi^{-h}((\Psi^h)^*(y_0)) = y_0.$$

Somit erhalten wir für  $e$

$$\begin{aligned} e &= \Psi^{-h}(\Phi^h(y_0)) - y_0 = \Psi^{-h}(\Phi^h(y_0)) - \Psi^{-h}((\Psi^h)^*(y_0)) = \Psi^{-h}(\Phi^h(y_0)) - \Psi^{-h}(\Phi^h(y_0) + e^*) \\ &\stackrel{Vor.}{=} \Phi^{-h}(\Phi^h(y_0)) + C(\Phi^h(y_0))(-h)^{p+1} - \Phi^{-h}(\Phi^h(y_0) + e^*) - C(\Phi^h(y_0) + e^*)(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ &= \Phi^{-h}(\Phi^h(y_0)) + C(\Phi^h(y_0))(-h)^{p+1} - \Phi^{-h}(\Phi^h(y_0)) - D\Phi^{-h}(\Phi^h(y_0))e^* + O(\|e^*\|^2) \\ &\quad - C(\Phi^h(y_0) + e^*)(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ &\stackrel{Cor. 6.11}{=} -(1 + O(h))e^* + O(\|e^*\|^2) + C(\Phi^h(y_0))(-h)^{p+1} - C(\Phi^h(y_0) + e^*)(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ &= -(1 + O(h))e^* + O(\|e^*\|^2) + (-1)^p C'(\Phi^h(y_0))h^{p+1}e^* + O(h^{p+2}) \\ &= -(1 + O(h))e^* + O(\|e^*\|^2) + O(h^{p+2}). \end{aligned}$$

Weil  $e^* = O(h)$  sein muß und  $e = O(h^{p+1})$ , kann man sich nun durch eine einfache Iteration davon überzeugen<sup>4</sup>, daß

$$\begin{aligned} e^* &= -e + O(h^{p+2}) = -C(\Phi^h(y_0))(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) = -C(y_0 + O(h))(-h)^{p+1} + O(h^{p+2}) \\ &= (-1)^p C(y_0)h^{p+1} + O(h^{p+2}). \end{aligned}$$

Die Aussage, daß die Ordnung für symmetrische Verfahren gerade sein muß folgt nun aus der Tatsache, daß wegen  $\Psi^h = (\Psi^h)^*$  gelten muß

$$C(y_0)h^{p+1} = (-1)^p C(y_0)h^{p+1},$$

<sup>4</sup>es gilt für  $e^*$ :

$$e^* = -e + O(h)e^* + O(\|e^*\|^2) + O(h^{p+2}).$$

für, z.B.  $p = 2$  folgt dann aus  $e = O(h^{p+2}) = O(h^4)$  und  $e^* = O(h)$ , daß  $e^* = -e + O(h^2)$ . Erneutes Einsetzen in die Darstellung für  $e^*$  bringt  $e^* = -e + O(h^3)$ . Nochmaliges Einsetzen in die Darstellung von  $e^*$  schließlich  $e^* = -e + O(h^4)$ .

d.h.  $p$  muß gerade sein (oder es tritt der degenerierte Fall auf, daß  $C(y_0) = 0$ ). □

## 6.4 R-Reversible Systeme

Reversibilität der kontinuierlichen Evolution heißt, daß die inverse der Evolution sich gerade durch Zeitumkehr ergibt:  $(\Phi^h)^{-1} = \Phi^{-h}$ .

R-Reversibilität stellt eine Verallgemeinerung dieser Beobachtung dar. Zur Motivation betrachten wir ein hamiltonsches System von der Form wie sie in Beispiel 6.3 betrachtet wurde.

**Beispiel 6.22.**

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^\top M^{-1} \mathbf{p} + U(\mathbf{q}), \quad (6.4.16)$$

wobei  $M$  eine SPD-Matrix ist. Die wesentliche Eigenschaft von  $H$  ist, daß

$$H(-\mathbf{p}, \mathbf{q}) = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \quad (6.4.17)$$

Wir betrachten nun die zwei Evolutionen, die im folgenden kommutativen Diagramm dargestellt sind (daß es sich wirklich um ein kommutatives Diagramm handelt, zeigen wir unten in Übung 6.25)

$$\begin{array}{ccc} (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) & \xrightarrow[\text{von } 0 \text{ bis } t]{\text{Evolution}} & (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \\ \text{Geschwindigkeitsumkehr} \downarrow & & \downarrow \text{Geschwindigkeitsumkehr} \\ (-\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) & \xleftarrow[\text{von } 0 \text{ bis } t]{\text{Evolution}} & (-\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \end{array} \quad (6.4.18)$$

Weiters definieren wir die Geschwindigkeitsumkehrfunktion  $R$ :

$$R(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (-\mathbf{p}, \mathbf{q}) \quad (6.4.19)$$

Die Aussage, daß das Diagramm kommutiert bedeutet, daß

$$R \circ \Phi^t = \Phi^{-t} \circ R.$$

■

**Definition 6.23** (R-reversible Abbildungen). Sei  $G \subset \mathbb{R}^d$  offen. Sei  $R : G \rightarrow G$  eine bijektive und lineare Abbildung. Eine bijektive Abbildung  $\Phi : G \rightarrow G$  (mit  $G \subset \mathbb{R}^d$ ) heißt R-reversibel, falls

$$R \circ \Phi = \Phi^{-1} \circ R.$$

**Lemma 6.24.** Die Evolution  $\Phi^t$  zur Differentialgleichung  $\mathbf{y}' = f(\mathbf{y})$  ist R-reversibel für alle hinreichend kleinen  $t$ , falls

$$f \circ R = -R \circ f.$$

**Beweis:** Weil  $\Phi^{-t} = (\Phi^t)^{-1}$ , müssen wir zeigen:

$$R \circ \Phi^t = \Phi^{-t} \circ R.$$

Wir betrachten nun:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(R \circ \Phi^t)(\mathbf{y}) &= Rf(\Phi^t(\mathbf{y})) \stackrel{Vor.}{=} -f(R \circ \Phi^t(\mathbf{y})) \\ \frac{d}{dt}((\Phi^{-t} \circ R)(\mathbf{y})) &= -f((\Phi^{-t} \circ R)(\mathbf{y})).\end{aligned}$$

Damit lösen  $t \mapsto (R \circ \Phi^t)(\mathbf{y})$  und  $t \mapsto (\Phi^{-t} \circ R)(\mathbf{y})$  die gleiche ODE<sup>5</sup>. Weil sie zudem den gleichen Anfangswert bei  $t = 0$  haben (nämlich  $R\mathbf{y}$ ), stimmen sie überein.  $\square$

**Übung 6.25.** Zeigen Sie für die Geschwindigkeitsumkehrfunktion  $R$  aus (6.4.19) in Beispiel 6.22, daß  $f \circ R = -R \circ f$ , wobei  $f$  durch die Hamilton-Funktion aus Beispiel 6.22 gegeben ist. Schließen Sie mit Lemma 6.24, daß das Diagramm (6.4.18) kommutativ ist.  $\blacksquare$

Die Eigenschaft einer kontinuierlichen Evolution  $R$ -reversibel zu sein, kann auch ins Diskrete vererbt werden. Insbesondere gilt, daß reversible/symmetrische RK-Verfahren sogar  $R$ -reversibel sind:

**Satz 6.26.** Sei das RK-Verfahren symmetrisch und es gelte  $f \circ R = -R \circ f$ . Dann ist die vom RK-Verfahren induzierte diskrete Evolution  $\Psi^h$  auch  $R$ -reversibel.

**Beweis:** Es ist z.z.:  $R \circ \Psi^h = (\Psi^h)^{-1} \circ R$ . Die diskrete Evolution  $\Psi^h$  ist symmetrisch, d.h.  $\Psi^{-h} = (\Psi^h)^{-1}$ . Damit müssen wir zeigen:

$$R \circ \Psi^h = \Psi^{-h} \circ R.$$

Das RK-Verfahren ist definiert durch

$$\begin{aligned}\Psi^h(\mathbf{y}) &= \mathbf{y} + h \sum_{i=1}^s b_i k_i, \\ k_i &= f(\mathbf{y} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j), \quad i = 1, \dots, s.\end{aligned}$$

Unter Ausnutzung der Linearität von  $R$  gilt deshalb für  $\tilde{k}_i := -Rk_i$ :

$$\tilde{k}_i = -Rk_i = -Rf(\mathbf{y} + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \stackrel{Vor.}{=} f(R\mathbf{y} - h \sum_{j=1}^s a_{ij} \tilde{k}_j), \quad i = 1, \dots, s.$$

Damit folgt für  $(R \circ \Psi^h)(\mathbf{y})$

$$R(\Psi^h(\mathbf{y})) = R\mathbf{y} + h \sum_{i=1}^s b_i Rk_i = R\mathbf{y} - h \sum_{i=1}^s b_i \tilde{k}_i.$$

Somit erkennen wir, daß  $R\Psi^h(\mathbf{y}) = \Psi^{-h}(R\mathbf{y})$ , d.h.  $R \circ \Psi^h = \Psi^{-h} \circ R$ .  $\square$

---

<sup>5</sup>nämlich  $z' = -f(z)$

## 6.5 Symplektizität

### 6.5.1 Symplektizität

#### Symplektizität

Auf dem  $\mathbb{R}^{2d}$  betrachten wir die Bilinearform

$$\omega : \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^d : \quad \omega(\xi, \eta) = \xi^\top J \eta \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.5.20)$$

**Beispiel 6.27.** Im Fall  $d = 1$  beschreibt  $\omega$  gerade die von den Vektoren  $\xi$  und  $\eta$  eingeschlossene (orientierte) Fläche:

$$\omega\left(\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix}\right) = -\xi_1 \eta_2 + \xi_2 \eta_1 = \begin{vmatrix} \xi_1 & \eta_1 \\ \xi_2 & \eta_2 \end{vmatrix}$$

Für den Fall  $d > 1$  stellt die Bilinearform  $\omega$  eine Summe von (orientieren) Flächen von Projektionen auf gewisse 2-dimensionale Unterräume dar: Für  $\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{p}', \mathbf{q}' \in \mathbb{R}^d$  gilt

$$\omega\left(\begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{p}' \\ \mathbf{q}' \end{pmatrix}\right) = -\mathbf{p}^\top \mathbf{q}' + \mathbf{q}^\top \mathbf{p}' = \sum_{i=1}^d -\mathbf{p}_i \mathbf{q}'_i + \mathbf{p}'_i \mathbf{q}_i = \sum_{i=1}^d \begin{vmatrix} \mathbf{p}_i & \mathbf{p}'_i \\ \mathbf{q}_i & \mathbf{q}'_i \end{vmatrix}$$

■

**Lemma 6.28** (Eigenschaften von  $J$ ). *Es gilt:*

$$J^2 = -I \quad (6.5.21)$$

$$J^\top = -J \quad (6.5.22)$$

$$J^{-1} = -J = J^\top \quad (6.5.23)$$

**Beweis:** Übung. □

**Definition 6.29.** Eine lineare Abbildung  $A : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  heißt symplektisch, falls

$$\omega(A\xi, A\eta) = \omega(\xi, \eta) \quad \forall \xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d} \quad (6.5.24)$$

Äquivalent hierzu ist:

$$A^\top J A = J. \quad (6.5.25)$$

**Übung 6.30** (symplektische Gruppe). Zeigen Sie, daß die Menge der symplektischen (linearen) Abbildungen  $\mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  eine Gruppe (bzgl. der Verkettung) bilden (die “symplektische Gruppe”). Zeigen Sie hierzu: (a)  $I$  ist symplektisch; (b) falls  $A$  nicht injektiv ist, dann kann es nicht symplektisch sein; (c) die Verkettung zweier symplektischer Abbildungen ist wieder symplektisch. ■

**Bemerkung 6.31.** Die symplektische Gruppe ist die Gruppe der (linearen) Abbildungen, die die Bilinearform  $\omega$  erhalten. Betrachtet man als Bilinearform das “Standardskalarprodukt”  $(\cdot, \cdot)_2$ , so kann man auch nach den linearen Abbildungen  $A$  fragen, die dieses erhalten, d.h. für die gilt:  $(A\xi, A\eta)_2 = (\xi, \eta)_2$  für alle Vektoren  $\xi, \eta$ . Diese Forderung ist äquivalent zu  $A^\top I A = I$ , d.h.  $A$  muß orthogonal sein. Die “orthogonale Gruppe” (= Gruppe der orthogonalen Matrizen) erhält somit das Standardskalarprodukt. ■

Auch für nichtlineare Abbildungen kann man das Konzept der Symplektizität einführen, indem man fordert, daß “lokal” (“im Kleinen”) die Abbildung symplektisch sei:

**Definition 6.32.** Sei  $G \subset \mathbb{R}^{2d}$  offen. Eine glatte Abbildung  $\Phi : G \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  heißt symplektisch, falls für jedes  $\mathbf{y} \in G$  die Ableitung (die “Jakobische”)  $D\Phi(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^{2d \times 2d}$  die Bedingung

$$(D\Phi(\mathbf{y}))^\top J D\Phi(\mathbf{y}) = J$$

erfüllt. Äquivalent hierzu ist  $\omega(D\Phi(\mathbf{y})\xi, D\Phi(\mathbf{y})\eta) = \omega(\xi, \eta)$  für alle  $\xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d}$ .

**Übung 6.33.** Seien  $\Phi_1, \Phi_2 : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  zwei symplektische Abbildungen. Zeigen Sie: Die Verkettung  $\Phi_1 \circ \Phi_2$  ist wiederum symplektisch. ■

Symplektizität ist eine wesentliche Eigenschaft von Hamiltonschen Systemen. Genauer: sei  $\Phi^h$  der Fluß, der zu einem Hamiltonschen System gehört. Dann ist für jedes  $h$  die Abbildung  $\Phi^h$  eine symplektische Abbildung:

**Satz 6.34** (Poincaré, 1899). Sei  $H \in C^2$  und  $\Phi^h$  sei der zugehörige Fluß. Dann ist für jedes  $h$  (für das  $\Phi^h$  definiert ist) eine symplektische Abbildung, d.h.

$$(D\Phi^h(\mathbf{y}))^\top J D\Phi^h(\mathbf{y}) = J.$$

**Beweis von Satz 6.34:** Der Beweis der Aussage von Satz 6.34 stützt sich auf die Variationsgleichung für  $W(t) = D\Phi^t(\mathbf{y})$  und die Tatsache, daß die Hessesche Matrix  $D^2H$  einer Hamilton-Funktion  $H$  eine symmetrische Matrix ist.

1. *Schritt:* Nach Definition gilt für  $h = 0$ , daß  $\Phi^0(\mathbf{y}) = \mathbf{y}$ . Damit ist  $D\Phi^0(\mathbf{y}) = I$  und somit trivialerweise  $(D\Phi^0(\mathbf{y}))^\top J D\Phi^0(\mathbf{y}) = I J I = J$ .

2. *Schritt:* Wir zeigen nun, daß die Abbildung  $h \mapsto (D\Phi^h(\mathbf{y}))^\top J D\Phi^h(\mathbf{y})$  konstant ist. Hierzu beobachten wir, daß in der Notation von Lemma 6.10 gilt:  $D\Phi^t(\mathbf{y}_0) = W(t)$ . Damit folgt aus Lemma 6.10 für beliebiges aber festes  $\mathbf{y}_0$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(D\Phi^t(\mathbf{y}_0))^\top J D\Phi^t(\mathbf{y}_0) &= \frac{d}{dt}W(t)^\top J W(t) = (W'(t))^\top J W(t) + W(t)^\top J W'(t) \\ &= W(t)^\top (Df(\mathbf{y}(t)))^\top J W(t) + W(t)^\top J Df(\mathbf{y}(t))W(t) \\ &= W(t)^\top (D^2H(\mathbf{y}(t)))^\top J^{-\top} J W(t) + W(t)^\top J J^{-1} D^2H(\mathbf{y})W(t). \end{aligned}$$

Nutzt man nun aus, daß  $D^2H$  symmetrisch ist und daß  $J^{-\top} J = -I$ , so folgt

$$\frac{d}{dt}(D\Phi^t(\mathbf{y}_0))^\top J D\Phi^t(\mathbf{y}_0) = W(t)^\top Df(\mathbf{y}(t)) [-I + I] W(t) = 0.$$

□

Satz 6.34 zeigt, daß ein hamiltonsches System einen symplektischen Fluß  $\Phi^h$  erzeugt. In der Tat gilt auch eine Umkehrung, d.h. Symplektizität eines Flusses ist ein Charakteristikum von hamiltonschen Systemen:

**Satz 6.35.** Sei  $G \subset \mathbb{R}^{2d}$  konvex<sup>6</sup> und  $f : G \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$  stetig. Dann ist der zugehörige Fluß  $\Phi^h$  symplektisch genau dann wenn  $f = J^{-1}\nabla H$  für ein  $H \in C^1(G; \mathbb{R})$ .

---

<sup>6</sup>sternförmig reicht

**Beweis:** Satz 6.34 gibt die eine Richtung: Falls  $f = J^{-1}\nabla H$ , dann ist der erzeugte Fluß symplektisch. Für die Umkehrung betrachten wir die Funktion  $W(t) = D_{\mathbf{y}}\Phi^t(\mathbf{y})$ . Dann löst  $W$  das Anfangswertproblem

$$W'(t) = Df(\Phi^t(\mathbf{y}))W(t), \quad W(0) = I.$$

Weil nach Voraussetzung für jedes feste  $t$  die Abbildung  $\mathbf{y} \mapsto \Phi^t(\mathbf{y})$  symplektisch ist, gilt

$$W(t)^\top JW(t) = J.$$

Insbesondere ist die Abbildung  $t \mapsto W(t)^\top JW(t)$  konstant. Daher:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} (W(t)^\top JW(t)) = W'(t)^\top JW(t) + W(t)^\top JW'(t) \\ &= W(t)^\top (Df(\Phi^t(\mathbf{y})))^\top JW(t) + W(t)^\top JDf(\Phi^t(\mathbf{y}))W(t) \end{aligned}$$

Wegen  $W(0) = I$  und  $\Phi^0(\mathbf{y}) = \mathbf{y}$  schließen wir damit insbesondere

$$(Df(\mathbf{y}))^\top J + JDf(\mathbf{y}) = 0.$$

Wegen  $J = -J^\top$  folgt schließlich

$$(JDf(\mathbf{y}))^\top = JDf(\mathbf{y}).$$

Weil  $JDf(\mathbf{y}) = D(Jf(\mathbf{y}))$ , schließen wir, daß  $DJf(\mathbf{y})$  symmetrisch ist, d.h. Lemma 6.36 liefert, daß  $Jf = \nabla H$  für eine geeignete skalare Funktion  $H$ .  $\square$

**Lemma 6.36** (integrability lemma). *Sei  $G \subset \mathbb{R}^d$  offen und konvex<sup>7</sup> und  $f \in C^1(G; \mathbb{R}^d)$ . Sei  $Df(\mathbf{y})$  eine symmetrische Matrix für jedes  $\mathbf{y} \in G$ . Dann existiert ein  $H \in C^2(G; \mathbb{R})$  mit  $f = \nabla H$ .*

**Beweis:** OBdA sei  $G$  sternförmig bzgl. 0. Dann definieren wir für  $\mathbf{y} \in G$ :

$$H(\mathbf{y}) := \int_{t=0}^1 f(t\mathbf{y}) \cdot \mathbf{y} dt$$

und rechnen (die Symmetrievoraussetzung impliziert  $\partial_k f_i = \partial_i f_k$ )

$$\begin{aligned} \partial_k H(\mathbf{y}) &= \int_{t=0}^1 \sum_i t \partial_k f_i(t\mathbf{y}) y_i + f_k(t\mathbf{y}) dt = \int_{t=0}^1 \sum_i t \partial_i f_k(t\mathbf{y}) y_i + f_k(t\mathbf{y}) dt \\ &= \int_{t=0}^1 \frac{d}{dt} (t f_k(t\mathbf{y})) dt = f_k(\mathbf{y}). \end{aligned}$$

$\square$

---

<sup>7</sup>sternförmig reicht

## 6.5.2 symplektische Integratoren

Wir haben gesehen, daß Symplektizität des erzeugten Flusses eine (charakterisierende) Eigenschaft von Hamiltonschen Systemen ist. Symplektische Integratoren erhalten diese Eigenschaft, d.h. die diskrete Evolution ist wiederum eine symplektische:

**Definition 6.37** (symplektische Einschrittverfahren). *Ein Einschrittverfahren heißt symplektisch, wenn es, angewendet auf die hamiltonsche Differentialgleichung (6.1.4) eine konsistente Evolution  $\Psi^h$  erzeugt, so daß für alle kompakten Mengen  $K \subset G$  und alle hinreichend kleinen  $h$  die Abbildung  $K \ni \mathbf{y} \mapsto \Psi^h(\mathbf{y})$  symplektisch ist, d.h.*

$$D\Psi^h(\mathbf{y})^\top J D\Psi^h(\mathbf{y}) = J \quad \forall \mathbf{y} \in K.$$

**Beispiel 6.38.** Die implizite Mittelpunktsregel führt auf einen symplektischen Integrator, wie implizites Differenzieren zeigt.

1. *Schritt:* Für symmetrische Matrizen  $M$  und  $\alpha \in \mathbb{R}$  hinreichend klein gilt:

$$(\mathbf{I} + \alpha J^{-1}M)^\top J (\mathbf{I} + \alpha J^{-1}M) = (\mathbf{I} - \alpha J^{-1}M)^\top J (\mathbf{I} - \alpha J^{-1}M), \quad (6.5.26)$$

denn die linke Seite von (6.5.26) ist eine symmetrische Funktion von  $\alpha$ : hierzu rechnen wir (Lemma 6.28 impliziert  $J^{-\top} = J$  und  $J^2 = -\mathbf{I}$ )

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} + \alpha J^{-1}M)^\top J (\mathbf{I} + \alpha J^{-1}M) &= J + \mathbf{I} \alpha J J^{-1}M + \alpha M^\top J^{-\top} J + \alpha^2 M^\top J^{-\top} J J^{-1}M \\ &= J + \alpha M + \alpha M^\top J^2 + \alpha^2 M^\top J^{-\top} M \\ &= J + \alpha^2 M^\top J M = J + (-\alpha)^2 M^\top J M = \dots \\ &= (\mathbf{I} - \alpha J^{-1}M)^\top J (\mathbf{I} - \alpha J^{-1}M). \end{aligned}$$

2. *Schritt:* Wir bezeichnen mit  $D^2H$  die Hessesche Matrix von  $H$ , d.h.

$$(D^2H)_{i,j=1}^{2d} = (\partial_i \partial_j H)_{i,j=1}^{2d}$$

wobei wir der Einfachheit halber die Variablen  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  von 1 bis  $2d$  durchnummeriert haben. Wir bemerken, daß  $D^2H$  eine symmetrische Matrix ist.

Es ist  $f = J^{-1} \nabla H$  und damit (man bestätige dies!)

$$Df(\mathbf{y}) = J^{-1} D \nabla H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J^{-1} D^2 H(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad \mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q}).$$

Die implizite Mittelpunktsregel ist  $\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + hf((\mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1)/2)$ , so daß sich für  $\Psi^h(\mathbf{y}_0) = \mathbf{y}_1$  durch (implizite) Differentiation nach  $\mathbf{y}_0$  ergibt:

$$D\Psi^h(\mathbf{y}_0) = \mathbf{I} + h Df((\mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1)/2) \frac{1}{2} (\mathbf{I} + D\Psi^h(\mathbf{y}_0)),$$

oder, nach  $D\Psi^h(\mathbf{y}_0)$  aufgelöst (mit  $z = \frac{1}{2}(\mathbf{y}_0 + \mathbf{y}_1)$ )

$$D\Psi^h(\mathbf{y}_0) = \left( \mathbf{I} - \frac{1}{2} h Df(z) \right)^{-1} \left( \mathbf{I} + \frac{h}{2} Df(z) \right).$$

3. *Schritt:* Es ist zu zeigen:

$$D\Psi^h(\mathbf{y}_0)^\top J D\Psi^h(\mathbf{y}_0) = J$$

Setzen wir  $M = D^2H(z)$ , so ist dies äquivalent zu

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right)^{-\top} J \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right)^{-1} &= \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right)^{-\top} J \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right)^{-1}, \\ \Leftrightarrow \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right) J \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right)^{\top} &= \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right) J \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right)^{\top}, \\ \Leftrightarrow \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right)^{\top} J \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2}hM\right) &= \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right)^{\top} J \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2}hM\right), \end{aligned}$$

was aber aus dem 1. Schritt folgt, weil  $M$  symmetrisch ist. ■

Die implizite Mittelpunktsregel ist gerade das einstufige Gaußverfahren. In der Tat sind alle Gaußverfahren symplektisch:

**Satz 6.39.** *Alle Runge-Kutta-Verfahren, die quadratische Invarianten erhalten, sind symplektisch. Insbesondere sind die Gauß-Verfahren symplektisch, d.h. die Folge  $(\mathbf{y}_k)_{k=0}^N$ , die durch das Gauß-Verfahren entsteht, erfüllt*

$$(D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k)^{\top} J D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k = J \quad \forall k \in \{0, \dots, N\}.$$

**Übung 6.40.** Die Symplektizität eines Einschrittverfahrens bezieht sich auf einen Schritt: Es gilt für  $\mathbf{y}_1 = \Psi^h(\mathbf{y}_0)$ , daß  $(D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1)^{\top} J (D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1) = J$ . Ein Einschrittverfahren erzeugt eine Folge  $(\mathbf{y}_k)_k$ , bei denen die Folgenglieder  $\mathbf{y}_k$  implizit vom Startwert  $\mathbf{y}_0$  abhängen. Zeigen Sie:  $(D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k)^{\top} J (D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k) = J$  ■

Bevor wir Satz 6.39 beweisen, benötigen wir ein Lemma:

**Lemma 6.41.** *Betrachte die Anwendung eines RK-Verfahrens auf die beiden AWP*

$$\mathbf{y}' = f(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \tag{6.5.27}$$

und

$$\mathbf{y}' = f(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \tag{6.5.28a}$$

$$W' = Df(\mathbf{y})W, \quad W(0) = \mathbf{I}. \tag{6.5.28b}$$

Seien  $(\mathbf{y}_k)_{k=0}^N$  und  $(\tilde{\mathbf{y}}_k, W_k)_{k=0}^N$  die beiden Folgen, die durch Einsatz (des gleichen) RK-Verfahrens für die AWP (6.5.27) und (6.5.28) entstehen. Dabei sind die  $\mathbf{y}_k$ ,  $\tilde{\mathbf{y}}_k$  und  $W_k$  Funktionen des Anfangsdatums  $\mathbf{y}_0$ . Dann gilt:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{y}}_k &= \mathbf{y}_k \quad \forall k \in \{1, \dots, N\}, \\ W_k &= D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k \quad \forall k \in \{1, \dots, N\}. \end{aligned}$$

**Beweis:** Man kann die Aussage von Lemma 6.41 auch als kommutatives Diagramm schreiben:

$$\begin{array}{ccc} \mathbf{y}' = f(\mathbf{y}), \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 & \xrightarrow{W(t) := D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}(t)} & \mathbf{y}' = f(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \\ & & W' = Df(\mathbf{y})W, \quad W(0) = \mathbf{I} \\ \text{RK-Verfahren} \downarrow & & \downarrow \text{RK-Verfahren} \\ (\mathbf{y}_k)_{k=0}^N & \xrightarrow{W_k := D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k} & (\mathbf{y}_k, W_k)_{k=0}^N \end{array} \tag{6.5.29}$$

Die allgemeinere Aussage zeigen wir lediglich für das explizite Eulerverfahren—der allg. Fall basiert auf implizitem Differenzieren der RK-Inkrementfunktion.

Das explizite Eulerverfahren für (6.5.27) liefert

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + hf(\mathbf{y}_k) \quad \implies D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_{k+1} = D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k + hDf(\mathbf{y}_k)D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k$$

Damit erfüllen die beiden Folgen  $(\mathbf{y}_k, D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k)_{k=0}^N$  die Rekurrenzrelationen

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + hf(\mathbf{y}_k), \quad \mathbf{y}_0 = \mathbf{y}_0 \quad (6.5.30a)$$

$$D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_{k+1} = D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k + hDf(\mathbf{y}_k)D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k, \quad D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_0 = \mathbf{I}. \quad (6.5.30b)$$

Andererseits liefert das explizite Eulerverfahren für das System (6.5.28)

$$\tilde{\mathbf{y}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{y}}_k + hf(\tilde{\mathbf{y}}_k), \quad \tilde{\mathbf{y}}_0 = \mathbf{y}_0, \quad (6.5.31a)$$

$$W_{k+1} = W_k + hDf(\tilde{\mathbf{y}}_k)W_k, \quad W_0 = \mathbf{I}. \quad (6.5.31b)$$

Wir erkennen, daß die Folgen  $(\mathbf{y}_k, D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k)_{k=0}^N$  und  $(\tilde{\mathbf{y}}_k, W_k)_{k=0}^N$  dieselbe Rekurrenzrelation erfüllen. Damit gilt  $\tilde{\mathbf{y}}_k = \mathbf{y}_k$  und  $D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_k = W_k$  für  $k = 0, \dots, N$ .  $\square$

**Beweis von Satz 6.39:** Sei  $\Phi^h$  die (kontinuierliche) Evolution für das hamiltonsche System

$$\mathbf{y}' = f(\mathbf{y}) = J^{-1}\nabla H(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0,$$

wobei wir  $\mathbf{y} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$  setzen. Weil die Evolution symplektisch ist, gilt

$$J = (D_{\mathbf{y}_0}\Phi^t(\mathbf{y}_0))^\top J(D_{\mathbf{y}_0}\Phi^t(\mathbf{y}_0)) = W(t)^\top JW(t), \quad (6.5.32)$$

wobei  $W : t \mapsto D\Phi^t(\mathbf{y})$  die Lösung der Variationsgleichung

$$W'(t) = Df(\Phi^t(\mathbf{y}))W(t), \quad W(0) = \mathbf{I}. \quad (6.5.33)$$

ist. Wir zeigen nun, daß für  $\mathbf{y}_1$  und  $\mathbf{y}_0$  gilt:

$$(D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1)^\top J(D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1) = J.$$

In Hinblick auf das kommutative Diagramm (6.5.29) betrachten wir das erweiterte System

$$\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ W \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} f(\mathbf{y}) \\ f(\mathbf{y})W \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{y}(0) \\ W(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_0 \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (6.5.34)$$

wobei die “Zustände”  $(\mathbf{y}, W) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$ . Lemma 6.41 (siehe das kommutative Diagramm (6.5.29)) besagt, daß ein Schritt des RK-Verfahrens angewandt auf das erweiterte System (6.5.34) ein  $(\mathbf{y}_1, W_1)$  liefert, wobei  $\mathbf{y}_1$  mit dem  $\mathbf{y}_1$  übereinstimmt, welches durch Anwenden des RK-Verfahrens auf  $\mathbf{y}' = f(\mathbf{y})$  entsteht und  $W_1 = D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1$ .

Auf dem Raum  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$  definieren wir die quadratische Form

$$I((\mathbf{y}, W)) := W^\top JW.$$

Wegen (6.5.32) wissen wir, daß das so definierte  $I$  eine Invariante des erweiterten Systems (6.5.34) ist. Damit ist

$$J = I(\mathbf{y}_0, W_0) = I(\mathbf{y}_1, W_1) = W_1^\top JW_1 = (D_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1)^\top JD_{\mathbf{y}_0}\mathbf{y}_1,$$

was zu zeigen war.  $\square$

Weitere wichtige symplektische Integratoren sind das symplektische Eulerverfahren (1. Ordnung) sowie das Störmer-Verlet-Verfahren (2. Ordnung).

**Übung 6.42.** Zeigen Sie, daß das die beiden symplektischen Eulerverfahren

$$p_{i+1} = p_i - h \nabla_{\mathbf{q}} H(p_{i+1}, q_i) \quad (6.5.35a)$$

$$q_{i+1} = q_i + h \nabla_{\mathbf{p}} H(p_{i+1}, q_i) \quad (6.5.35b)$$

sowie

$$p_{i+1} = p_i - h \nabla_{\mathbf{q}} H(p_i, q_{i+1}) \quad (6.5.36a)$$

$$q_{i+1} = q_i + h \nabla_{\mathbf{p}} H(p_i, q_{i+1}) \quad (6.5.36b)$$

symplektisch und von 1. Ordnung sind. ■

**Übung 6.43.** Die Störmer-Verlet-Verfahren sind definiert als

$$p_{i+1/2} = p_i - \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{q}} H(p_{i+1/2}, q_i) \quad (6.5.37a)$$

$$q_{i+1} = q_i + \frac{h}{2} (\nabla_{\mathbf{p}} H(p_{i+1/2}, q_i) + \nabla_{\mathbf{p}} H(p_{i+1/2}, q_{i+1})) \quad (6.5.37b)$$

$$p_{i+1} = p_{i+1/2} - \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{q}} H(p_{i+1/2}, q_{i+1}) \quad (6.5.37c)$$

sowie

$$q_{i+1/2} = q_i + \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{p}} H(p_i, q_{i+1/2}) \quad (6.5.38a)$$

$$p_{i+1} = p_i - \frac{h}{2} (\nabla_{\mathbf{q}} H(p_i, q_{i+1/2}) + \nabla_{\mathbf{q}} H(p_{i+1}, q_{i+1/2})) \quad (6.5.38b)$$

$$q_{i+1} = q_{i+1/2} - \frac{h}{2} \nabla_{\mathbf{p}} H(p_{i+1}, q_{i+1/2}) \quad (6.5.38c)$$

Zeigen Sie, daß die beiden Störmer-Verlet-Verfahren (a) symplektisch und (b) symmetrisch sind. Schließen Sie, daß die Verfahren von der Ordnung 2 sind. *Hinweis:* für die Symplektizität reicht es zu sehen, daß die Verfahren durch Verkettung des symplektischen Eulerverfahrens (mit Schrittweite  $h/2$ ) entstehen. ■

### 6.5.3 Splitting-Methoden

Eine wichtige Klasse von Integratoren entsteht durch “Splitting-Methoden”. Wir betrachten das System

$$\mathbf{y}' = f(\mathbf{y}) = f^{[1]}(\mathbf{y}) + f^{[2]}(\mathbf{y});$$

hier ist das “Splitting”  $f = f^{[1]} + f^{[2]}$  beliebig gewählt. Nehmen wir nun an, daß es so gewählt ist, daß die Evolutionen  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$ , die zu den ODEs  $\mathbf{y}' = f^{[1]}(\mathbf{y})$  und  $\mathbf{y}' = f^{[2]}(\mathbf{y})$  gehören, bekannt sind. Dann kann eine diskrete Evolution  $\Psi^h$  für das Gesamtsystem definiert werden als

$$\Psi_{LT}^h(\mathbf{y}) := \Phi_1^h \circ \Phi_2^h \quad \text{oder seine adjungierte Version} \quad (\Psi_{LT}^h)^*(\mathbf{y}) = \Phi_2^h \circ \Phi_1^h \quad (6.5.39)$$

In der Literatur ist dieses Splitting als *Lie-Trotter-Splitting* bekannt. Es ist von erster Ordnung:

**Übung 6.44.** Zeigen Sie: Für glatte  $f$ ,  $f^{[1]}$ ,  $f^{[2]}$  ist das Lie-Trotter-Splitting ein Verfahren erster Ordnung, d.h. der Konsistenzfehler  $\Phi^h(\mathbf{y}_0) - \Phi_{LT}^h(\mathbf{y}_0) = \Phi^h(\mathbf{y}_0) - \Phi_1^h \circ \Phi_2^h(\mathbf{y}_0) = O(h^2)$ . ■

**Übung 6.45.** In der Definition (6.5.39) ist die Aussage  $(\Phi_1^h \circ \Phi_2^h)^* = \Phi_2^h \circ \Phi_1^h$  versteckt. Zeigen Sie dies mithilfe von Satz 6.12.

**Beispiel 6.46.** Die Motivation für die Splitting-Methoden ergibt sich z.B. aus “separierten” Hamiltonschen Systemen, d.h.  $H$  hat die Form einer Summe von Funktionen, die lediglich von  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{q}$  abhängen:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + U(\mathbf{q})$$

Dann hat  $f$  die Form

$$f = \begin{pmatrix} -\nabla_{\mathbf{q}} H \\ \nabla_{\mathbf{p}} H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla U(\mathbf{q}) \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla T(\mathbf{p}) \end{pmatrix} =: f^{[1]} + f^{[2]}$$

Ausgeschrieben sind die Differentialgleichungen für die Evolutionen  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$  damit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{p}^{[1]} \\ \mathbf{q}^{[1]} \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} -\nabla U(\mathbf{q}^{[1]}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{p}^{[2]} \\ \mathbf{q}^{[2]} \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla T(\mathbf{p}^{[2]}) \end{pmatrix},$$

mit Lösungen

$$\Phi_1^t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_0 - t\nabla U(\mathbf{q}_0) \\ \mathbf{q}_0 \end{pmatrix}, \quad \Phi_2^t(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_0 \\ \mathbf{p}_0 + t\nabla T(\mathbf{p}_0) \end{pmatrix}$$

Eine einfache Rechnung (Übung!) zeigt, daß die Evolutionen  $\Phi_1^t$  und  $\Phi_2^t$  symplektisch sind, d.h.

$$(D_{(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)} \Phi_1^h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0))^\top JD_{(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)} \Phi_1^h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = J, \quad (D_{(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)} \Phi_2^h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0))^\top JD_{(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0)} \Phi_2^h(\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) = J$$

Damit ist nach Übung 6.33 auch  $\Psi_{LT}^h$  eine symplektische (diskrete) Evolution. ■

Das Lie-Trotter-Splitting ist nur von erster Ordnung (vgl. Übung 6.44). Öfter verwendet wird das sog. *Strang-Splitting*, welches eine der beiden folgenden Formen hat:

$$\Psi_S^h = \Phi_2^{h/2} \circ \Phi_1^h \circ \Phi_2^{h/2} \quad \text{oder} \quad \Psi_S^h = \Phi_1^{h/2} \circ \Phi_2^h \circ \Phi_1^{h/2}. \quad (6.5.40)$$

Der Grund für die Popularität des Strang-Splittings ist, daß ein symmetrisches Verfahren ist (und damit 2. Ordnung ist!), während das Lie-Trotter-Splitting lediglich erster Ordnung ist.

**Satz 6.47.** *Das Strang-Splitting ist symmetrisch und von Ordnung 2.*

**Beweis:** Übung. Überlegen Sie sich, daß das Strang-Splitting sich als  $(\Psi_{LT}^{h/2})^* \circ (\Psi_{LT}^{h/2})$  schreiben läßt. □

Die Bedeutung der Splittings von Lie-Trotter und vor allem des Strang-Splitting ergibt sich aus der Tatsache, daß einige Eigenschaften der Evolutionen  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$  sich auf die diskreten Evolutionen  $\Psi_{LT}^h, \Psi_S^h$  übertragen:

**Satz 6.48.** *Habe die Hamilton-Funktion wie in Beispiel 6.46 separierte Struktur. Dann sind die diskreten Evolutionen  $\Psi_{LT}^h$  und  $\Psi_S^h$  symplektisch.*

**Beweis:** Die Symplektizität der Lie-Trotter-Splittings  $\Psi_{LT}^h$  und  $(\Psi_{LT}^h)^*$  wurde bereits in Beispiel 6.46 nachgerechnet. Da  $\Psi_S^h = \Psi_{LT}^{h/2} \circ (\Psi_{LT}^{h/2})^*$ , ist es als Verkettung symplektischer Abbildung ebenfalls symplektisch. □

## 6.5.4 partitionierte RK-Verfahren

Hamiltonsche Systeme sind ODEs von der folgenden Form:

$$\mathbf{p}' = f_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (6.5.41a)$$

$$\mathbf{q}' = f_{\mathbf{q}}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (6.5.41b)$$

wobei hier  $f_{\mathbf{p}}$  und  $f_{\mathbf{q}} : G \rightarrow \mathbb{R}^d$  einfach zwei Funktionen sind (nicht zu verwechseln mit der Ableitung!).

Die spezielle Struktur von ODEs der Form (6.5.41) suggeriert den Einsatz von speziellen RK-Verfahren, den sog. *partitionierten* RK-Verfahren:

**Definition 6.49** (partitionierte RK-Verfahren). *Seien zwei  $s$ -stufige RK-Verfahren mit Butcher-Tableaus*

$$\frac{c^p \mid A^p}{\mid (b^p)^T} \quad \frac{c^q \mid A^q}{\mid (b^q)^T}$$

gegeben. Ein Schritt eines  $s$ -stufigen partitionierten RK-Verfahrens für das Hamiltonsche System (6.1.4) ist definiert durch

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_0 + h \sum_{j=1}^s b_j^p k_j^p, \quad \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 + h \sum_{j=1}^s b_j^q k_j^q,$$

wobei die Stufen  $k_j^p$  und  $k_j^q$  definiert sind als Lösungen der Gleichungssysteme

$$\begin{aligned} k_i^p &= f_{\mathbf{p}}\left(\mathbf{p}_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij}^p k_j^p, \mathbf{q}_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij}^q k_j^q\right), \quad i = 1, \dots, s \\ k_i^q &= f_{\mathbf{q}}\left(\mathbf{p}_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij}^p k_j^p, \mathbf{q}_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij}^q k_j^q\right), \quad i = 1, \dots, s. \end{aligned}$$

**Beispiel 6.50** (symplektisches Eulerverfahren). Das einfachste partitionierte RK-Verfahren ist das symplektische Eulerverfahren der Ordnung 1 aus Übung 6.42. Es hat die Butchertableaus

$$\frac{0 \mid 0}{\mid 1} \quad \frac{1 \mid 1}{\mid 1} \quad (6.5.42)$$

■

**Beispiel 6.51** (Störmer-Verlet-Verfahren). Das bekannteste partitionierte RK-Verfahren ist das Störmer-Verlet-Verfahren der Ordnung 2 aus Übung 6.43. Es hat die Butchertableaus

$$\frac{0 \mid 0 \quad 0}{1 \mid 1/2 \quad 1/2} \quad \frac{1/2 \mid 1/2 \quad 0}{1/2 \mid 1/2 \quad 0} \quad (6.5.43)$$

■

## 6.5.5 Langzeitverhalten symplektischer Integratoren

Eine wichtige Anwendung von symplektischen Integratoren sind Langzeitintegrationen (z.B. in der Himmelsmechanik, in der Moleküldynamik). Hier ist man daran interessiert, daß die Hamilton-Funktion (in den genannten Beispielen ist das Gesamtenergie des Systems) (nahezu) erhalten bleibt. Wie wir in den Beispielen 6.1, 6.2 gesehen haben, ist dies nicht automatisch erfüllt.

Die Hamilton-Funktion ist eine Invariante des Systems, die oft nicht erhalten werden kann (zur Erinnerung: Gauß-Verfahren z.B. erhalten nur quadratische Invarianten). Symplektische Integratoren (wie z.B. die Gauß-Verfahren) haben jedoch eine besondere Eigenschaft: Sie erhalten den Wert der Hamilton-Funktion nahezu über sehr lange Zeiten (d.h. viele Zeitschritte). Bevor wir das als Satz formulieren, motivieren wir dieses Verhalten mit einem Übungsbeispiel:

**Übung 6.52.** Betrachte das Hamiltonsche System

$$\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}' = J^{-1} \nabla H(p, q), \quad H(p, q) = \frac{1}{2} (p^2 + q^2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}^\top \mathbf{I} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}.$$

Es gilt bekanntlich für die Lösung:  $H(p(t), q(t)) = H(p(0), q(0))$  für alle  $t$ .

Sei  $(p_n, q_n)_{n=0}^\infty$  die Folge, die durch Anwenden des symplektischen Eulerverfahrens (6.5.35) mit (konstanter) Schrittweite  $h$  entsteht. Zeigen Sie:  $H_h(p_n, q_n) = H_h(p_0, q_0)$  für alle  $n$ , wobei die gestörte Hamilton-Funktion die folgende Form hat:

$$H_h(p, q) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}^\top \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2}h \\ -\frac{1}{2}h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

M.a.W.: während  $H$  eine Invariante des kontinuierlichen hamiltonschen Systems ist, ist  $H_h$  eine Invariante der diskreten Evolution. Wir beobachten weiter:

$$|H(p, q) - H_h(p, q)| = O(h),$$

was gerade die Ordnung des symplektischen Eulerverfahrens ist. ■

Übung 6.52 zeigt, daß der symplektische Euler zwar nicht die Hamilton-Funktion  $H$  erhält, aber eine Hamilton-Funktion, die nur  $O(h)$  von  $H$  entfernt ist. Dies ist durchaus typisch, wie der folgende Satz zeigt:

**Satz 6.53.** Sei die Hamilton-Funktion  $H \in C^\infty(G; \mathbb{R})$ . Es werde ein symplektisches RK-Verfahren (oder partitioniertes RK-Verfahren) der Ordnung  $p$  verwendet und eine konstante Schrittweite  $h$ .

Es mögen die Iterierten  $(p_i, q_i)$ ,  $i = 0, \dots$ , in einer kompakten Menge  $K \subset\subset G$  bleiben. Dann existiert für jedes  $m \in \mathbb{N}$  Konstanten  $C_m, C'_m > 0$  und eine Funktion  $H_m \in C^\infty(G; \mathbb{R})$  so daß für alle  $t_i = ih$  mit  $t_i \leq C_m h^{-m}$  gilt:

$$\begin{aligned} |H_m(p_i, q_i) - H_m(p_0, q_0)| &\leq C_m t_i h^m, \\ |H(p_0, q_0) - H_m(p_0, q_0)| &\leq C'_m h^p. \end{aligned}$$

**Beweis:** Siehe Literatur. Es ist hervorzuheben, daß im Fall von analytischem  $H$  die Aussage verschärft werden kann: die (faktische) Erhaltung der Hamilton-Funktion gilt für  $t_i$  mit  $t_i \leq e^{\gamma/h}$  für ein  $\gamma > 0$ , welches nicht von  $h$  abhängt. □