

**StV4 : Ein symplektisches zeitreversibles
Störmer-Verlet-Verfahren vierter Ordnung
für Hamiltonsche Mehrteilchensysteme
mit zwei Anwendungsbeispielen
(Gas, T-Rohr-Anordnung)**

Dissertation

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Eberhard Karls Universität Tübingen
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von
Dipl.-Math. Klaus Sonnleitner
aus Erftstadt-Frauenthal bei Köln

Tübingen
2010

Tag der mündlichen Qualifikation:

08.12.2010

Dekan:

Prof. Dr. Wolfgang Rosenstiel

1. Berichterstatter

Prof. Dr. Dr. h.c. Otto E Rössler

2. Berichterstatter

Prof. Dr. Nils Schopohl

Einleitung

Hamiltonsche Differentialgleichungen besitzen bekannterweise einen symplektischen Fluss. Das heißt, die nach dem Parameter Anfangswert differenzierte Lösung der Anfangswertaufgabe erfüllt eine gewisse Konstanz-Beziehung mit der sogenannten Struktur-Matrix (genaue Beschreibung im Text).

Bei numerischen Lösungsverfahren spielte die Suche nach Verfahren, die ebenfalls symplektisch sind, bis in die 90-er Jahre eine untergeordnete Rolle. Aus der verwirrenden Vielfalt der angebotenen (hauptsächlich Runge-Kutta-verwandten) Verfahren wurden empirisch stets solche vom Störmer-Verlet-Typ als besonders empfehlenswert (einfach, wirksam, stabil und hinreichend genau) bevorzugt (vgl. Ciccotti und Hoover 1986).

In der Folgezeit befasste sich die numerische Mathematik ausführlich mit der Frage der Vorteile, die symplektische numerische Verfahren boten, und man versuchte diese Vorteile durch backward-analysis-Methoden als überlegen zu beweisen. Hier ist der Kreis um Gerhard Wanner (Genf), Robert I McLachlan (Neu Seeland) und aus neuerer Zeit Sergio Blanes (Valencia) zu nennen.

Von der bloßen Empfindung her und, wie praktische Rechnungen zeigen, sind numerische Verfahren, die möglichst viele Eigenschaften mit der exakten Lösung gemeinsam haben, sicherlich zu bevorzugen. Zu dem Eigenschaftskatalog eines solchen Verfahrens gehört nach diesen zunächst nur in der Praxis gewonnenen Erkenntnissen die Symplektizität (und bei reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion auch die Zeitreversibilität) des zu wählenden numerischen Verfahrens. Die sich einstellenden Vorteile sind gute Langzeit-Approximation bei relativ großer Schrittweite, keine wesentliche Energie-Drift, sowie Erhalt vieler Integrale der exakten Lösung auch bei der numerischen Verarbeitung. Beispiele hierzu werden angegeben.

Es war schon immer sehr erstaunlich, dass das (gewöhnliche) explizite Euler-Verfahren, angewendet auf eine mechanische Hamilton-Differentialgleichung, durch eine kleine, fast unscheinbare Änderung symplektisch gemacht werden kann (Übergang von $n \rightarrow n+1$ in jeweils einer der beiden Bestimmungsgleichungen). Der so entstandene symplektische Euler-Schritt (mit all seinen Vorzügen eines symplektischen Verfahrens) ist sogar noch einfacher zu programmieren als das (gewöhnliche) Euler-Verfahren, weil die Iterationswerte innerhalb eines Schrittes auf dem alten Platz überschrieben werden können. Überspitzt könnte man sogar behaupten, dass dieses eigentlich falsche Überschreiben der Werte bei der Programmierung des gewöhnlichen Euler-Verfahrens zur Entdeckung der außerordentlichen Eigenschaften des dabei zufällig symplektisch gewordenen Euler-Verfahrens geführt hat.

Ebenso erstaunlich ist, dass die zwei möglichen Arten der symplektischen Euler-Verfahren (EulerA und EulerB) zu einander adjungiert sind, so dass deren Zusammensetzung ein explizites, symplektisches und sogar zeitreversibles Verfahren erzeugt. Dies ist gerade das oben gelobte Störmer-Verlet-Verfahren 2.Ordnung, wobei traditionell jedoch zwei Kraftauswertungen je Iterationsschritt benötigt werden.

Eine veränderte Reihenfolge der Verknüpfung der beiden Euler-Verfahren führt sogar zu einer starken Reduzierung der Rechenoperationen, weil je Iterationsschritt nur noch eine einzige Kraftauswertung benötigt wird (vgl. den entsprechenden Nachtrag S.53). Gerade bei Mehrteilchensystemen (mit ihrem hohen Rechenaufwand bei der Kraftbestimmung) ist dieser Störmer-Verlet-Varianten der Vorzug zu geben. Ein weiterer Vorteil dabei ist ein verminderter Rundungsfehlereinfluss.

Hinsichtlich der aufwändigen genauen mathematischen Beweise der aus der Symplektizität folgenden günstigen Eigenschaften – im wesentlichen die Aussage, dass das numerische Verfahren die exakte Lösung einer Differentialgleichung mit leicht veränderter Hamilton-Funktion ist mit zur ursprünglichen Hamilton-Funktion benachbarten Höhenlinien, und dies über exponentiell lange Zeiträume – wird auf die im Anhang angegebene Literatur verwiesen (insbesondere [HLW,2002], [McQ,2006] und [BCM,2008]).

Zur Vermeidung der Aufsummierung gleichgerichteter Rundungsfehler bei Verfahren 2. Ordnung empfiehlt das bereits oben genannte Buch von Ciccotti und Hoover die Verwendung von numerischen Verfahren höherer als 2. Konvergenz-Ordnung.

Im theoretischen ersten Teil dieser Arbeit werden die Eigenschaften "symplektisch" und "zeitreversibel" für die exakte Hamilton-Differentialgleichungslösung genauer erläutert und auch bei den hierfür geeigneten numerischen Verfahren aufgezeigt und unter Verwendung elementarer mathematischer Methoden nachgewiesen.

Auf Grund der Vererbungseigenschaften bei symmetrischer Verknüpfung gelingt es dann, mit dem Baustein des einfachen Störmer-Verlet-Verfahrens ein zeitreversibles symplektisches numerisches Verfahren der 4. Ordnung anzugeben.

Im zweiten praktischen Teil der Arbeit wird dieser symplektische Algorithmus 4. Ordnung als "robustes Arbeitspferd" auf zwei verschiedene Klassen von Beispielen angewendet.

Das erste Beispiel belegt das traditionelle Rücklaufverhalten (die Rückkehr in den Ausgangszustand) bei einem Mehrteilchensystem: $21 \times 21 = 441$ Gasmoleküle unter Lennard-Jones-Potential in einer Kreis-Berandung.

Das zweite Beispiel untersucht das Langzeit-Energie-Austauschverhalten eines Zweiteilchen-Systems von stark verschiedenen Massen unter anziehender bzw. abstoßender Paar-Kraft. Bei abstoßender Paar-Kraft zeigen die kinetischen Energien ein Bestreben, sich anzugleichen. Bei anziehender Paar-Kraft verhält sich die kinetische Energie der Teilchen jedoch im Widerspruch zu dem bei Mehrteilchensystemen gewohnten Äquipartitionsbestreben. Damit wird der Begriff der "dynamischen Reibung" von Chandrasekhar erstmals an einem Hamiltonschen Zweiteilchensystem aufgezeigt.

Übersicht

Das erste Kapitel "Mathematische Grundlagen für Hamilton-Systeme" erläutert die Gewinnung der Hamilton-Differentialgleichung (Hamilton-Dgl) aus der Hamilton-Funktion (Gesamt-Energie des mechanischen Systems). Die Lösung (Phasenraumkurve) der Hamilton-Dgl beschreibt dann die Bewegung der Massenpunkte in der Zeit.

Die rechte Seite der Hamilton-Dgl wird mithilfe der sogenannten schiefssymmetrischen Struktur-Matrix J erzeugt: Die rechte Seite der Dgl ist dabei das Produkt dieser schiefssymmetrischen Struktur-Matrix und des Gradienten der Hamilton-Funktion.

Mechanische Systeme (im Gegensatz zu elektromagnetischen Systemen) besitzen Hamilton-Funktionen mit zwei Zusatz-Eigenschaften: Additive Zerlegbarkeit in (nur von p -abhängige) kinetische und (nur von q -abhängige) potentielle Energie:

$$H(q; p) = T(p) + V(q) \text{ und dazu noch Reflektions-Symmetrie: } H(q; p) = H(q; -p).$$

Die aus der Hamilton-Funktion gebildeten Dgln werden genauer betrachtet und ihre Eigenschaften festgestellt: die Symplektizitäts-Eigenschaft sowie (bei Reflektions-Symmetrie der Hamilton-Funktion) die entsprechende Zeit-Reversibilitäts-Eigenschaft der abgeleiteten Hamilton-Dgl. (Allgemeinere Dgln haben diese Eigenschaften natürlich nicht.)

Dann werden charakteristische Eigenschaften der Flüsse (exakte Lösungen) von Hamilton-Dgln untersucht: Zuzüglich zu der Zeit-Symmetrie-Eigenschaft, die den kontinuierlichen Flüssen aller Dgln gemeinsam ist, besitzen die Flüsse von Hamilton-Dgln stets die Symplektizitätseigenschaft. Diese besagt im Wesentlichen, dass die Verbindung des nach dem Anfangswert differenzierten Flusses mit der Struktur-Matrix J eine Konstante der Bewegung ist (genaue Beschreibung im Text S.8).

Ist die Hamilton-Funktion reflektionssymmetrisch (wie stets bei mechanischen Systemen), so folgt aus der Zeit-Reversibilität der Dgl zunächst nur die schwache Zeit-Reversibilität des Flusses. Zusammen mit der stets vorhandenen Zeit-Symmetrie von kontinuierlichen Dgl-Flüssen ergibt sich daraus die (volle) Zeit-Reversibilität des Flusses.

Die Begriffe Zeit-Symmetrie, Zeit-Reversibilität und schwache Zeit-Reversibilität werden anschaulich in ihren Beziehungen zueinander dargestellt.

Die Unterscheidung zwischen schwach zeitreversibel und zeitreversibel ist für das Verständnis des Kapitels 2 wichtig: Für die kontinuierlichen Flüsse des Kapitels 1 gibt es diese Unterscheidung nicht, da die stets vorhandene Zeit-Symmetrie der kontinuierlichen Flüsse den Unterschied aufhebt. Numerisch erzeugte diskrete Flüsse dagegen besitzen i.a. nur die Eigenschaft der schwachen Zeit-Reversibilität und nicht von selbst Zeit-Symmetrie und auch nicht (volle) Zeit-Reversibilität. Um auch mit ihnen die (bei den kontinuierlichen Flüssen stets vorhandene) Rücklauf-Eigenschaft realisieren zu können, müssen sie zeitreversibel gemacht werden bzw. auf Zeit-Symmetrie geprüft werden.

Im Hinblick auf die am Ende zu betrachtenden zwei Beispiele werden die zugehörigen Hamilton-Funktionen und die daraus resultierenden Dgln konkret angegeben, wobei im zweiten Beispiel der Übergang zu generalisierten Koordinaten vollzogen wird (mit dem Vorteil eines Zwangskräfte-freien, Dimensions-reduzierten Dgl-Systems).

Das zweite Kapitel "Numerische Methoden für Hamilton-Systeme" führt in die numerischen Verfahren ein. Ausgangspunkt ist das klassische Euler-Verfahren, welches durch eine leichte¹ Änderung (EulerA-Verfahren bzw. EulerB-Verfahren genannt) in ein symplektisches numerisches Verfahren überführt werden kann. Obwohl die Auswirkungen der Symplektizität hier nur oberflächlich wiedergegeben werden, zeigen erste praktische Phasenraumkurven-Berechnungen einen deutlichen Unterschied bei der Anwendung eines symplektischen gegenüber einem nicht-symplektischen Verfahren. (Man vergleiche zum Verständnis des Gesagten die unterschiedlich berechneten Phasenraumkurven eines einzelnen Körpers im Anlauf gegen einen zweiten, im Ursprung fest verankerten Körper, zwischen denen ein Lennard-Jones-Potential herrscht = Lennard-Jones-Oszillator: Abbildungen S.38)

Beide jeweils individuell nicht zeitsymmetrischen Verfahren (das EulerA-Verfahren und das EulerB-Verfahren) werden nun durch Hintereinanderausführung² zu einem neuen Verfahren, dem sogenannten Störmer-Verlet-Verfahren *StV*, zusammengeführt. Weil EulerA- und EulerB-Verfahren glücklicherweise adjungiert zueinander sind, d.h. es gilt $(EulerA(-\Delta t))^{-1} = EulerB(\Delta t)$, ist das aus ihnen zusammengesetzte Störmer-Verlet-Verfahren sogar zeitsymmetrisch. Darüberhinaus bleibt es bei mechanischen Hamilton-Funktionen explizit.

Jedes andere Verfahren könnte auch durch Verknüpfung mit seiner Adjungierten zeitsymmetrisch gemacht werden, allerdings nur um den Preis, dass durch das Einbringen der (impliziten) Adjungierten (deren Ausführung die Lösung einer Gleichung verlangt) das zusammengesetzte Verfahren nicht mehr explizit bleibt. Dem günstigen Zufall der wechselseitigen Adjungiertheit von EulerA- und EulerB-Verfahren und der sich ergebenden Zeit-Symmetrie bei der Verknüpfung dieser beiden Verfahren sowie dem Explizit-Bleiben der Rechenvorschrift verdankt das bekannte Störmer-Verlet-Verfahren seine Einzigartigkeit: Es ist sogar noch von 2. Konvergenz-Ordnung. (Mit einer als Nachtrag gekennzeichneten Änderung kann erreicht werden, dass je Schritt nur eine einzige Kraftauswertung benötigt wird.)

Da beide Eigenschaften "symplektisch" und "schwach zeitreversibel" ganz allgemein bei Zweifach-Verknüpfung erhalten bleiben, die Eigenschaften "zeitsymmetrisch" und "zeitreversibel" jedoch nur bei symmetrischer Dreifach-Verknüpfung³, kann versucht werden, durch entsprechende symmetrische Dreifach-Kombination zweier verschiedener numerischer Verfahren (mit gleichen Eigenschaften) ein Verfahren höherer Konvergenz-Ordnung zu erzeugen.

¹ Man kann die Änderung als den (in der numerischen Mathematik bei partitionierter Iteration wohlbekanntem) Übergang vom Gesamtschritt-Verfahren zum Einzelschritt-Verfahren beschreiben.

² Die Verknüpfung von numerischen Verfahren ist ein beliebtes Vorgehen: Es zeigt sich, dass bei Zweifach-Verknüpfung Symplektizität und schwache Zeit-Reversibilität erhalten bleiben, die Zeit-Symmetrie und (volle) Zeit-Reversibilität aber im allgemeinen nicht.

³ $A^B A$ bzw. $B^A B$ ist eine symmetrische Dreifach - Verknüpfung zweier Verfahren A und B.

Diese Überlegung führt (ausgehend von dem Störmer-Verlet-Verfahren $StV(\Delta t; q; p)$ mit Symplektizitäts- und Zeit-Reversibilitäts-Eigenschaft) zur Konstruktion einer symmetrischen Dreifach-Verknüpfung $StV\{\alpha \cdot \Delta t; StV[\beta \cdot \Delta t; StV(\alpha \cdot \Delta t; q; p)]\}$ mit ebenfalls diesen Eigenschaften für beliebige Parameter α, β .

Durch richtige Wahl der Parameter α, β gelingt es sogar, ein Verfahren 4. Konvergenz-Ordnung zu erzeugen. Dies ergibt das hier neu vorgestellte $StV4$ -Verfahren als symmetrische Dreifach-Verknüpfung von StV -Verfahren mit geeigneten Parametern.

Die Darstellung der Kapitel 1 und 2 lehnt sich an Leimkuhler und Reich [LR,2005] an, wobei versucht wurde, zu allen Aussagen die Beweise hinzuzufügen, soweit dies mit einfacher Rechnung möglich war. Im Hinblick auf mehr theoretische Fragestellungen (z.B. die Bedeutung der Symplektizität für die Langzeit-Stabilität) wurden mit Gewinn die reichhaltigen Beiträge von Hairer und Lubich [HL,1997], Hairer, Lubich und Wanner [HLW,2002], McLachlan und Quispel [McQ,2006] und Blanes, Casas und Murua [BCM,2008] zu Rate gezogen.

Das dritte Kapitel "MatLab-Rechnungen für Hamilton-Systeme" befasst sich mit zwei konkreten Anwendungen des $StV4$ -Verfahrens.

Im ersten Fall wurden Gasmoleküle unter Lennard-Jones-Potential nach Geschwindigkeitsumkehr wieder in den Anfangszustand zurück laufen gelassen. Hierzu war die Zeit-Reversibilität des $StV4$ -Verfahrens wichtig.

Zum anderen wurde die Phasenraumkurve von zwei Teilchen in einer T-Rohr-Anordnung bis zu einem im allgemeinen erst nach Tagen Realzeit eintretenden numerischen Stabilitäts-Zustand verfolgt. Untersucht wurde dabei in Abhängigkeit von der Art der Paar-Kraft, anziehend oder abstoßend, das unterschiedliche Energieaustausch-Verhalten dieses von einer mechanischen Hamilton-Funktion gesteuerten Systems. Hierbei war die Langzeit-Stabilität des $StV4$ -Verfahrens wichtig.

Mehr physikalisch orientierte Bemerkungen hinsichtlich der behandelten Beispiele beenden das Kapitel.

Zur Ausführung der numerischen Rechnungen wurde das Programmier-System MatLab 7.5.0.342 von August 15, 2007(R2007b) verwendet. Die Programmtexte sind beigefügt.

Die kürzeren Rechnungen wurden auf einem 500MHz-PC ausgeführt, die längeren auf dem Cluster-Rechner des ZDV der Universität Tübingen.

Schlussbemerkungen und Ausblick, ein Literatur- und Stichwort-Verzeichnis, Liste der akademischen Lehrer, Lebenslauf und eine Danksagung schließen die Arbeit ab.

Einleitung und Überblick	S. I - V
Inhaltsverzeichnis	S. VI
Symbole und Darstellung	S.VII - VIII
1. Mathematische Grundlagen für Hamilton-Systeme	S. 1 - 28
Aufbau	
Von den Newton- zu den Hamilton-Bewegungsgleichungen	3
Die Eigenschaften "additiv aufgeteilt" und "reflektionssymmetrisch"	4
Eigenschaften des Hamilton-Dgl-Systems bei allgemeiner bzw. additiv aufgeteilter oder reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion	5
Der symplektische Fluss einer Hamilton-Dgl	6
Der Fluss als Verknüpfung der Flüsse von Hamilton-Dgln bei additiv aufgeteilter Hamilton-Funktion	10
Der zeitreversible Fluss bei reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion	11
Beispiel : Das N-Körper-System bei Paar-Abstands-Potentialen	20
Systeme mit geometrischen, global parameterisierbaren Zwangsbedingungen	22
Beispiel : Zwei Körper in einem T-Rohr	25
2. Numerische Methoden für Hamilton-Systeme	S. 29 - 64
Aufbau	
Das Euler-Verfahren, Eigenschaften	33
Auswirkungen der Symplektizität eines numerischen Verfahrens	35
Auswirkungen der Zeit-Reversibilität eines numerischen Verfahrens	39
Auswirkung der Symplektizität und der Zeit-Reversibilität auf die Energie	41
Das EulerA- und EulerB-Verfahren, Eigenschaften, Verknüpfung	43
Das Störmer-Verlet-Verfahren als Verknüpfung EulerA°EulerB, Eigenschaften	51
Symmetrische Dreifach-Verknüpfung von Störmer-Verlet-Schritten zur Erzeugung des <i>StV4</i> -Verfahrens vierter Ordnung	54
Zusammenfassende Übersicht der vorgestellten Verfahren mit ihren wesentlichen Eigenschaften	64
3. MatLab-Rechnungen für Hamilton-Systeme	65
a) Gas	S. 67 - 81
Rücklauf-Verhalten des <i>StV4</i> -Verfahrens bei N-Körper System	67
Programm-Schema für N-Koerper	70
Programm-Quell-Text	71
Rechen-Beispiele	76
Zusätze	80
b) T-Rohr-Anordnung	S. 82 -107
Behandlung des Rückstoßes	83
Typisches Langzeit-Verhalten der numerischen Dgl-Lösungen	85
Unterschiedliches Verhalten der kinetischen Energien der beiden Körper bei abstoßender bzw. anziehender Paar-Kraft	93
Tabelle mit den Parametern und Ergebnissen der einzelnen Simulationen	99
Programm-Schema für T-Rohr	101
Programm-Quell-Text	102
Bemerkungen hinsichtlich der behandelten Beispiele	108
Schlussbemerkungen und Ausblick	S. 110
Literaturverzeichnis, Stichwortverzeichnis, Liste der akademischen Lehrer	S. 112
Lebenslauf und Danksagung	S. 116

Symbole und Darstellung

Symbole :

a^T	Transposition eines Vektors bzw. einer Matrix a
I_k	$k \times k$ Einheitsmatrix
0_k	$k \times k$ Nullmatrix
$id_{\mathbb{R}^n}$	Identität, d.h. $id(x) := x \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$
$f'(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$	Ableitung von $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ als $m \times n$ Matrix (Zusammenfassung aller partiellen Ableitungen als $m \times n$ Matrix)
$f''(x) := (f'_{x_1}, \dots, f'_{x_n})$	2.Ableitung von $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ als $m \times n^2$ Matrix
$a_{mn} \times b_{rs}$	Kronecker Produkt als $m \times r \times n \times s$ Matrix
$(v_1; v_2) := \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$	untereinanderbeschriebene Vektoren (Vektor-Verkettung)
$a \cdot b$	(Matrizen-)Multiplikation (verträglicher Matrizen)
$L \cdot x := L(x)$	Auswertung bei linearer Abbildung L durch Matrix-Multiplikation
$f \circ g$	Hintereinanderausführung von g und f mit $[f \circ g](x) := f(g(x))$ ¹
f^m	m -fach Anwendung einer Abbildung $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$
$\Phi_f(t; z_0)$	Flussabbildung (exakte Lösung) zur AWA $\frac{d}{dt} z(t) = f(z(t)), \quad z(0) = z_0$
$\Psi_f(\Delta t; z_0)$	numerische Approximation der Flussabbildung $\Phi_f(\Delta t; z_0)$
$\Psi_f^2(\Delta t; z_0)$	Zweifach-Iteration := $\Psi_f(\Delta t; \Psi_f(\Delta t; z_0))$, analog für n -fach Iteration
$(\Psi_f(\Delta t; z))^{-1}$	Urbild := y , wenn $\Psi_f(\Delta t; y) = z$

- Einsetzungsstelle bei Funktionen mehrerer Variablen :

Erläuterung : Sei

$f : \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$, d.h. $(x; y) \rightarrow f(x; y)$

dann wird bezeichnet

$f(x; \bullet) : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ durch $y \rightarrow f(x; y)$ (Auswertung bei festem x , als Funktion von y)

und $f'(x; \bullet) := \frac{\partial}{\partial y} f(x; y)$ (Ableitung nach dem variablen y bei festem x) ;

$f(\bullet; y) : \mathbb{R}^l \rightarrow \mathbb{R}^n$ durch $x \rightarrow f(x; y)$ (Auswertung bei festem y , als Funktion von x)

und $f'(\bullet; y) := \frac{\partial}{\partial x} f(x; y)$ (Ableitung nach dem variablen x bei festem y) .

Folge für (gemischte und vertauschbare) zweite partielle Ableitung :

$$\frac{\partial}{\partial y} f'(\bullet; y) = \frac{\partial}{\partial x} f'(x; \bullet) := \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} f(x; y) = \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} f(x; y)$$

¹ sinngemäß $f(\bullet; y) \circ g(\bullet; y)$ als $[f(\bullet; y) \circ g(\bullet; y)](x) := f(g(x; y); y)$

Zur Darstellung :

Die Beweise sind ausgeführt mit dem gebräuchlichen mathematischen Hilfsmitteln (Funktionen, Ableitungen, Ineinandersetzen von Potenzreihen, Matrizenoperationen, Kronecker-Produkt) :

1. Besonderer Wert muss dabei auf die explizite Bezeichnung der Transposition von Matrizen gelegt werden : Statt der (sonst in der Physik verwendeten) symmetrischen Größen treten hier öfter schiefsymmetrische Matrizen (z.B. die Struktur-Matrix) auf : Sie ändern bei Transposition ihr Vorzeichen, d.h. $J^T = -J$.

2. Durch Verwendung des Kronecker-Produktes ist eine eindeutige, und mit bekannten eindimensionalen Regeln verträgliche Notation möglich :
z.B.

Die Produktregel der Differentiation bei Funktionen mehrerer Veränderlicher lautet:

$$(f(x) \cdot g(x))' = f'(x) \cdot (id \times g(x)) + f(x) \cdot g'(x)$$

oder

höhere Ableitungen sind auf das Kronecker-Produkt der Argumente anzuwenden:

$$f''(x) \cdot h \times h \quad (\text{statt } h^T \cdot f''(x) \cdot h \text{ mit } f''(x) \text{ Hesse-Matrix}).$$

3. Die (etwas ungewöhnliche) Notation der Symplektizitäts-Eigenschaft

$d\hat{q} \wedge d\hat{p} = dq \wedge dp$ von Abbildungen $\hat{q}, \hat{p} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ wurde nicht über das Dach-Produkt von Differentialformen $da(z) \wedge db(z) := (a'(z))^T \cdot b'(z) - (b'(z))^T \cdot a'(z)$, d.h. über eine schiefsymmetrische bilineare Zuordnung, erklärt² und es wurde auch keine (der sicherlich formal einfachen, aber merkwürdigen) Differential-Formen Rechen-Regeln (z.B. $da(z) \wedge A \cdot da(z) = 0$ bei symmetrischem A) verwendet.

² vgl. [LR,2005], S.64.

Es ist in einfacher Notation

$$da \wedge db := a'(z)^T \cdot b'(z) - b'(z)^T \cdot a'(z) = \begin{pmatrix} a'(z) \\ b'(z) \end{pmatrix}^T \cdot J \cdot \begin{pmatrix} a'(z) \\ b'(z) \end{pmatrix} \in \text{Mat}(n, n) \text{ für } a, b : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m .$$

Also bedeutet $d\hat{q} \wedge d\hat{p} = dq \wedge dp$ explizit: $\begin{pmatrix} \hat{q}'(q; p) \\ \hat{p}'(q; p) \end{pmatrix}^T \cdot J \cdot \begin{pmatrix} \hat{q}'(q; p) \\ \hat{p}'(q; p) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix}^T}_{=I_{2n}} \cdot J \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix}}_{=I_{2n}}$ oder

$$\left(\begin{pmatrix} \hat{q}(q; p) \\ \hat{p}(q; p) \end{pmatrix} \right)' \cdot J \cdot \begin{pmatrix} \hat{q}(q; p) \\ \hat{p}(q; p) \end{pmatrix}' = J \text{ vgl. Definition der Symplektizität S. 7}$$

Kapitel 1

Mathematische Grundlagen für Hamilton-Systeme

Überblick

Mathematische Grundlagen für Hamilton-Systeme

Hamilton-Funktion erzeugt Hamilton-Dgl erzeugt Fluss der Dgl/Bewegung
 ↓ ↓

<p>stets: (passend gewählte) Hamilton-Funktion (<u>Gesamtenergie</u>) $H(q; p)$</p>	<p>$(\dot{q}; \dot{p}) = J \cdot H'^T(q; p)$ (~ Newton-Dgl bei konservativen Kräften als Dgl-System 1.Ordnung) Rechte Seite Dgl hat $(J \cdot H'^T)'^T = -H'^T \cdot J$ (<u>symplektische Dgl</u>)</p>	<p>$(\Phi'_H(t; \bullet))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; \bullet) = J$ (<u>symplektischer Fluss</u>)</p>
<p>zusätzlich: $H(q; p) = H_1(q; p) + H_2(q; p)$ mit <u>additiver Aufteilung</u> und <u>$\{H_1, H_2\} = 0$</u></p>	<p>$H_i(q; p)$ ist <u>Integral</u> der mit $H_j(q; p)$ erzeugten Hamilton-Dgl</p>	<p>Die Flüsse <u>vertauschen</u> u. erzeugen als Verknüpfung den <u>Fluss der urspr. Hamilton-Dgl</u> $\Phi_{H=H_1+H_2} = \Phi_{H_1} \circ \Phi_{H_2} = \Phi_{H_2} \circ \Phi_{H_1}$</p>
<p>zusätzlich: $H(q; p) = H(q; -p)$ mit <u>Reflektions-Symmetrie</u></p>	<p>Rechte Seite Dgl hat $f(q; p) = -S \cdot f(S \cdot (q; p))$ (<u>zeitreversible Dgl</u>)</p>	<p>Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ hat $S \cdot \Phi_H(-t; S \cdot \bullet) = \Phi_H(+t; \bullet)$ (<u>schwach zeitreversibler Fluss</u>) Mit $\Phi(-t; \bullet) \circ \Phi(t; \bullet) = id$ (Zeit-Symmetrie des Flusses jeder Dgl) : Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ hat $S \cdot \Phi_H(t; \bullet) \circ S \cdot \Phi_H(t; \bullet) = id$ bzw. Bewegung auf $[0, T]$ $(q(t); p(t))$ hat <u>Rücklaufbewg. auf $[T, 2 \cdot T]$</u> $(q(2 \cdot T - t); -p(2 \cdot T - t))$</p>

Mathematische Grundlagen für Hamilton-Systeme

Aufbau

- 1) Von den Newton- zu den Hamilton-Bewegungsgleichungen
- 2) Die Eigenschaften "additiv aufgeteilt" und "reflektionssymmetrisch"
- 3) Eigenschaften des Hamilton-Dgl-Systems bei allgemeiner bzw. additiv aufgeteilter oder reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion
- 4) Der symplektische Fluss einer Hamilton-Dgl
- 5) Der Fluss als Verknüpfung der Flüsse der Hamilton-Dgln bei additiv aufgeteilter Hamilton-Funktion
- 6) Der zeitreversible Fluss bei reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion
- 7) Beispiel : Das N-Körper-System bei Paar-Abstands-Potentialen
- 8) Systeme mit geometrischen, global parameterisierbaren Zwangsbedingungen
- 9) Beispiel : Zwei Körper in einem T-Rohr

1) Von den Newton-Bewegungsgleichungen zu den Hamilton-Bewegungsgleichungen

Die Bewegungsgleichungen für ein N-(Punkt-)Körper-System im \mathbb{R}^d ($d=1,2,3$) lauten

$$M \cdot \frac{d^2}{dt^2} q(t) = F(q(t)) \quad (\text{Newton-Dgl-System}).$$

Dabei ist

$q(t) := (q_1(t); \dots; q_N(t)) \in \mathbb{R}^{N \cdot d}$ der Gesamt-Ort, d.h.

der Vektor der – untereinander geschriebenen – Körper-Orte $q_i(t) \in \mathbb{R}^d$,

$M := \text{diag}(m_1, \dots, m_N) \times I_d$ die $Nd \times Nd$ – Masse-Matrix,

$F(q) := (F_1(q); \dots; F_N(q)) \in \mathbb{R}^{N \cdot d}$ der Gesamt-Kraft-Vektor, d.h.

die – untereinander geschriebenen¹ – Kräfte $F_i(q) \in \mathbb{R}^d$, die auf die einzelnen Körper wirken.

Mit der Einführung der Hilfsgröße²

$$p := M \cdot \dot{q} \quad (\text{Gesamt-Impuls})$$

lassen sich die Bewegungsgleichungen als gew. Dgl-System 1. Ordnung schreiben :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q(t) &= M^{-1} \cdot p(t) \\ \frac{d}{dt} p(t) &= F(q(t)) \end{aligned}$$

Mit den Definitionen

1. $T(p) := \frac{1}{2} p^T \cdot M^{-1} \cdot p$ (kinetische Energie) , mit $T'^T(p) = M^{-1} \cdot p$
2. $V(q)$ (potentielle Energie) derart, dass $V'^T(q) = -F(q)$ (bei konservativer Kraft),
3. $H(q; p) := T(p) + V(q)$
(Gesamt-Energie oder mechanische Hamilton-Funktion)

¹ Für die Theorie ist diese Untereinander=Vektor-Schreibweise vorteilhaft, für die Programmierung eher die Nebeneinander=Matrix-Schreibweise, vgl. Kapitel MatLab-Rechnungen.

² Der Impuls ist hier linear verbunden mit der Gesamtgeschwindigkeit.

lässt sich die rechte Seite des Dgl-Systems 1. Ordnung in der (zweigeteilten) Form

$$\dot{q}(t) = T'^T(p)$$

$$\dot{p}(t) = -V'^T(q)$$

schreiben, bzw. nach Einführung der schief-symmetrischen³ Struktur-Matrix

$$J := \begin{pmatrix} 0_{Nd} & I_{Nd} \\ -I_{Nd} & 0_{Nd} \end{pmatrix}_{(2Nd, 2Nd)} \quad (\text{Struktur-Matrix})$$

auch als

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}_{2Nd, 1} = J_{2Nd, 2Nd} \cdot \begin{pmatrix} V'^T(q(t)) \\ T'^T(p(t)) \end{pmatrix}_{2Nd, 1} \quad (\text{Hamilton-Dgl-System})$$

oder (in kompakter Form⁴) als

$$\frac{d}{dt}(q(t); p(t)) = J \cdot H'^T(q(t); p(t)).$$

Allgemein heißt jede Dgl, deren rechte Seite aus der Struktur-Matrix J und dem Gradienten einer reellwertigen Hamilton-(Stamm-)Funktion $H(q; p)$ gebildet ist, eine Hamilton-Dgl.

2) Zusätzliche Eigenschaften der Hamilton-Funktion

("additiv aufgeteilt in Summanden mit verschwindender Poisson-Klammer" bzw. "reflektionssymmetrisch")

a) Additive Aufteilung in Summanden mit verschwindender Poisson-Klammer bedeutet :

Die Hamilton-Funktion hat eine Darstellung der Form

$$H(q; p) = H_1(q; p) + H_2(q; p)$$

mit verschwindender Poisson-Klammer der Summanden

$$\{H_1(q; p), H_2(q; p)\} := H_1'(q; p) \cdot J \cdot H_2'^T(q; p) = 0.$$

b) Reflektions-Symmetrie bedeutet :

Es gilt :

$$H(q, p) = H(q, -p)$$

d.h.

$$T(p) = T(-p).$$

Mit der involutorischen⁵ Reflektions-Matrix

$$S := \begin{pmatrix} +I_{Nd} & 0_{Nd} \\ 0_{Nd} & -I_{Nd} \end{pmatrix}_{(2Nd, 2Nd)}$$

kann die Reflektions-Symmetrie als

$$H(q; p) = H(S \cdot (q; p))$$

beschrieben werden.

³ Es gilt $J^T = -J$ (Schief-Symmetrie der Struktur-Matrix J)

⁴ Für theoretische Untersuchungen hinsichtlich der Eigenschaften der Lösung wird diese Form (der untereinander geschriebenen Komponenten) bevorzugt :
Rechte und linke Seite ist je ein Vektor des \mathbb{R}^{2Nd} (für N Körper im \mathbb{R}^d) (bzgl. einer anderen Schreibweise, vgl. Kapitel MatLab Rechnungen.)

⁵ Es gilt $S \cdot S = I$ (Die Reflektions-Matrix S ist eine Involution).

3) Eigenschaften des Hamilton-Dgl-Systems bei allgemeiner bzw. additiv aufgeteilter oder reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion

Die rechte Seite einer Hamilton-Dgl $J \cdot H'^T(q; p)$ erfüllt als Matrixprodukt aus schiefssymmetrischer Struktur-Matrix und dem Gradienten einer skalaren Hamilton-Funktion die folgende Beziehung

$$(J \cdot H'^T(q; p))'^T = -H'^T(q; p) \cdot J \quad (\text{Symplektizitäts-Eigenschaft der Hamilton-Dgl})$$

Denn (unter Verwendung⁶ von $H'^T(q; p) = H'^{T,T}(q; p)$) folgt

$$(J \cdot H'^T)^T = (J \cdot H'^T)^T = H'^{T,T} \cdot J^T = H'^T \cdot J^T = -H'^T \cdot J$$

■

Diese Eigenschaft in Verbindung mit der Dgl für die 1. Variation des Flusses wird im Wesentlichen die Symplektizität des Flusses begründen (s. im Beweis S.8).

a) Die additive Zerlegbarkeit mit verschwindender Poisson-Klammer der Summanden besagt, dass H_i ein Integral längs der Lösungen der mit H_j gebildeten Hamilton-Dgl ist (allgemeine Eigenschaft bei verschwindender Poisson-Klammer).

b) Auswirkung der Reflektions-Symmetrie der Hamilton-Funktion auf die Dgl :
Definition :

Eine beliebige zweigeteilte Dgl

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} z_1(t) \\ z_2(t) \end{pmatrix} = f(z_1(t); z_2(t))$$

heißt zeitreversibel, wenn für die rechte Seite der Dgl gilt

$$f(z_1; z_2) = -S \cdot f\left(S \cdot \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}\right) .$$

Satz :

Die von einer reflektionssymmetrischen Hamilton-Funktion gebildete Hamilton-Dgl ist zeitreversibel; es gilt also :

$$J \cdot H'^T(q; p) = -S \cdot J \cdot H'^T(S \cdot (q; p)) \quad (\text{Zeit-Reversibilität der Hamilton-Dgl}).$$

Denn aus der Reflektions-Symmetrie $H(q; p) = H(S \cdot (q; p))$ ergibt sich

$$\begin{aligned} J \cdot H'^T(q; p) &= J \cdot (H(S \cdot (q; p)))'^T = J \cdot (H'(S \cdot (q; p))) \cdot S^T = \\ &= J \cdot S^T \cdot H'^T(S \cdot (q; p)) \underset{J \cdot S^T = -S \cdot J}{=} -S \cdot J \cdot H'^T(S \cdot (q; p)) \end{aligned}$$

■

Die Zeit-Reversibilität der Dgl bewirkt für den Fluss (die Lösungen der Dgl) zunächst nur die schwache Zeit-Reversibilität, welche mit einer Zusatzeigenschaft von Dgl-Flüssen sogar die (eigentliche) Zeit-Reversibilität des Flusses ergibt (s. S.12).

⁶ Die Ableitung eines Gradienten H'^T ergibt stets eine symmetrische (Hesse-)Matrix; denn Symmetrie ist eine allgemeine Eigenschaft von zweiten Ableitungen (wegen der Vertauschbarkeit der Reihenfolge bei partiellen Ableitungen).

Im Folgenden werden nun die Eigenschaften des Flusses einer Hamilton-Dgl betrachtet, und dann die weiteren Auswirkungen auf den Fluss, wenn die Hamilton-Funktion zusätzliche Eigenschaften (additiv zerlegbar, reflektionssymmetrisch) hat.

4) Der symplektische Fluss einer Hamilton-Dgl

Allgemeines zum Fluss einer beliebigen Dgl, Eigenschaften :

Der Fluss $\Phi_f(t; \bullet)$ einer Dgl $\frac{d}{dt} z(t) = f(z(t))$ ist eine von der Zeit t als Parameter abhängige Schar von Abbildungen. Die einzelne Abbildung $\Phi_f(t; \bullet)$ ordnet (zu einer bestimmten festen Zeit t) dem (Start-)Wert z den (End-)Wert $z(t)$ zu, den die Lösung der AWA

$$\frac{d}{dt}(z(t)) = f(z(t)), \quad z(0) = z$$

zu dieser Zeit erreicht hat, also

$$\Phi_f(t; z) := z(t)^7.$$

(Die explizite Angabe des Wertes $\Phi_f(t; z)$ setzt also die explizite Kenntnis der Lösung aller AWAn voraus. Dies ist aber fast nie der Fall, so dass numerische Methoden anzuwenden sind, um eine Vorstellung vom Bewegungsablauf zu bekommen.)

Theoretische Eigenschaften des Flusses einer jeden Dgl :

a1) Der Fluss einer Dgl ist bzgl. Funktionsverknüpfung eine ein-parametrische Gruppe mit⁸

$$\Phi_f(t_2; \bullet) \circ \Phi_f(t_1; \bullet) = \Phi_f(t_1 + t_2; \bullet),$$

insbesondere gilt :

$$\Phi_f(-t; \bullet) \circ \Phi_f(+t; \bullet) = id \quad (\text{oder } (\Phi_f(-t; z))^{-1} = \Phi_f(t; z) \quad \forall z)$$

Diese letzte Eigenschaft einer parametrisierten Abbildungsschar heißt Zeit-Symmetrie (der Abbildungsschar).

a2) Der Fluss $\Phi_f(t; z)$ erfüllt als Funktion von t (bei festem z) die Anfangswertaufgabe (AWA)

$$\frac{d}{dt} \Phi_f(t; z) = f(\Phi_f(t; z)), \quad \Phi_f(t=0; z) = z.$$

Dies auf Grund der Definition des Flusses.

a3) Durch Differentiation (nach z bei festem t) der beiden Gleichungen folgt :

Die Ableitung des Flusses nach z (bei festem t) $\frac{\partial}{\partial z} \Phi_f(t; z)$ ⁹ genügt als Funktion von t

(bei festem z) der "Dgl für die 1.Variation des Flusses" :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial z} \Phi_f(t; z) = f'(\Phi_f(t; z)) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Phi_f(t; z), \quad \frac{\partial}{\partial z} \Phi_f(t; z)|_{t=0} = I_k.$$

⁷ Bei linearer Dgl ist $\Phi_L(t; z) := FM(t) \cdot z$ ($FM(t)$ Fundamentalmatrix mit $FM(0) = id$).

⁸ Begründung : Existenz- und Eindeutigkeit der AWA bei einer Dgl, deren rechte Seite eine Lipschitz-Bedingung erfüllt (z.B. stetig diffbar ist).

⁹ $\frac{\partial}{\partial z} \Phi_f(t; z)$ heißt die 1.Variation des Flusses $\Phi_f(t; z)$.

Das Bisherige gilt für den Fluss einer jeden Dgl, also auch für den Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ ¹⁰ einer Hamilton-Dgl, d.h.

b1) Der Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ einer Hamilton-Dgl erfüllt die Zeit-Symmetrie

$$\Phi_H(-t; \bullet) \circ \Phi_H(+t; \bullet) = id \text{ oder } (\Phi_H)^{-1}(-t; q; p) = \Phi_H(t; q; p) .$$

b2) Der Fluss $\Phi_H(t; q; p)$ einer Hamilton-Dgl erfüllt als Funktion von t (bei festem q und p) die AWA

$$\frac{d}{dt} \Phi_H(t; q; p) = J \cdot H'^T(\Phi_H(t; q; p)), \quad \Phi_H(t=0; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} .$$

b3) Durch Differentiation der beiden Gleichungen (nach q und p bei festem t) folgt :

Die Ableitung des Flusses nach q und p (bei festem t) $(\frac{\partial}{\partial q} \Phi_H(t; q; p), \frac{\partial}{\partial p} \Phi_H(t; q; p))$

genügt als Funktion von t (bei festem q u. p) der "Dgl für die 1.Variation des Flusses":

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial q} \Phi_H(t; q; p), \frac{\partial}{\partial p} \Phi_H(t; q; p) \right) &= J \cdot H'^T(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial q} \Phi_H(t; q; p), \frac{\partial}{\partial p} \Phi_H(t; q; p) \right) \\ \left(\frac{\partial}{\partial q} \Phi_H(t; q; p), \frac{\partial}{\partial p} \Phi_H(t; q; p) \right)_{t=0} &= I_{2 \cdot N \cdot d} \end{aligned}$$

b4) Speziell gilt jedoch für den Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ einer Hamilton-Dgl die Eigenschaft der Symplektizität :

Definition :

Eine Abbildung $f : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ heißt symplektisch, wenn für ihre Ableitung f' gilt :

$$(f'(z))^T \cdot J \cdot f'(z) = J \quad \forall z \in \mathbb{R}^{2d}$$

Beispiel : Sei $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ mit symmetrischem $(F'(q))_{d,d}$ (d.h. F^T hat Stammfunktion), dann gilt

$$f(q; p) := \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ F(q + p \cdot \varepsilon) \end{pmatrix} \cdot \varepsilon$$

ist symplektisch.

Eine einfache Eigenschaft von symplektischen Abbildungen :

Eine Verknüpfung $f \circ g$ zweier symplektischer Abbildungen ist selbst wieder symplektisch (Vererbung der Symplektizität bei Zweifach-Verknüpfung); denn

$$\begin{aligned} ([f \circ g]'(z))^T \cdot J \cdot ([f \circ g]'(z)) &= \\ &= (f'(g(z)) \cdot g'(z))^T \cdot J \cdot f'(g(z)) \cdot g'(z) = \\ &= g'(z)^T \cdot [f'(g(z))^T \cdot J \cdot f'(g(z))] \cdot g'(z) = \\ &= g'(z)^T \cdot J \cdot g'(z) = J \end{aligned}$$

Die (nach b3) allgemeine Eigenschaft der 1.Variation des Flusses einer Hamilton-Dgl liefert zusammen mit (der speziellen Beziehung)

$(J \cdot H'^T(q; p))^T = -H'^T(q; p) \cdot J$ (Symplektizitäts-Eigenschaft der Hamilton-Dgl) die Symplektizität des Flusses einer Hamilton-Dgl; denn es gilt :

¹⁰ Die korrekte Bezeichnung des Flusses einer Hamilton-Dgl wäre $\Phi_{J \cdot H^T}(t; \bullet)$.

Bei festen q und p ist der Ausdruck $(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p)$, als Funktion von t betrachtet, $= \text{const}(t) = J$. (Dabei steht $\Phi'_H(t; q; p)$ für $(\frac{\partial}{\partial q} \Phi_H(t; q; p), \frac{\partial}{\partial p} \Phi_H(t; q; p))$).

Es ist also

$$(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p) = J$$

(Symplektizitäts-Eigenschaft des Flusses einer Hamilton-Dgl).

Tatsächlich gilt :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} ((\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p)) &= \\ &= \underbrace{\left(\frac{d}{dt} \Phi'_H(t; q; p) \right)^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p)}_{\text{Produktregel}} + (\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \frac{d}{dt} \Phi'_H(t; q; p) = \\ &= [J \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \Phi'_H(t; q; p)]^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p) + \\ &\quad + (\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot [J \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \Phi'_H(t; q; p)] = \\ &= (\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot \underbrace{(J \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p)}_{=-H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot J} + \\ &\quad + (\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot J \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \Phi'_H(t; q; p) = \\ &= -(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \underbrace{J \cdot J}_{=-I} \cdot \Phi'_H(t; q; p) + \\ &\quad + (\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot \underbrace{J \cdot J}_{=-I} \cdot H'^{T'}(\Phi_H(t; q; p)) \cdot \Phi'_H(t; q; p) = \\ &\quad \equiv 0 \end{aligned}$$

Also ist

$$(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p) = \text{const}(t) .$$

Aus der Anfangsbedingung $\Phi'_H(t=0; q; p) = I$ folgt :

$$(\Phi'_H(t=0; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t=0; q; p) = I^T \cdot J \cdot I = J$$

und damit insgesamt

$$\text{const}(t) = J ,$$

d.h.

$$(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p) = J .$$

■

Ergebnis (vgl. Kästchen 3 im Überblick S.2) :

Der Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ eines Hamilton-Dgl-Systems ist symplektisch (genauer : eine symplektische Abbildungsschar) :

Für $\Phi'_H(t; q; p)$ (den nach den Parametern q und p differenzierten Fluss einer Hamilton-Dgl) gilt die Beziehung :

$$(\Phi'_H(t; q; p))^T \cdot J \cdot \Phi'_H(t; q; p) = J \quad (\text{Symplektizität des Flusses einer Hamilton-Dgl}).$$

Bemerkung zur Symplektizitäts-Eigenschaft :

Die mit dem (t, q, p) -abhängigen Fluss Φ_H gebildete linke Seite ergibt stets die konstante Struktur-Matrix J (und dies sogar bei beliebiger Hamilton-Ausgangs-Funktion).

Satz (Symplektizität des Flusses einer Hamilton-Dgl) :
 Jedes Hamilton-Dgl-System, dessen rechte Seite sich als
 (schiefsymmetrische Struktur-Matrix J) \times (Gradient einer skalaren Funktion)
 darstellen lässt, hat einen symplektischen Fluss.

Deutung der Symplektizitäts-Eigenschaft des Flusses ("verschärfter Liouville")

1) Volumenerhalt des Flusses :

Es mögen sich zur Zeit $t = 0$ die Orts-Koordinaten und ihre zugehörigen Impuls-Koordinaten mit fest ausgewählten Indizes $(q_{0i_1}, \dots, q_{0i_k}, p_{0i_1}, \dots, p_{0i_k})$ in einer $2k$ dimensionalen Menge $M_{i_1, \dots, i_k}(0) \in \mathbb{R}^{2k}$ befinden mit einem (euklidischen) Inhalt $\mu(M_{i_1, \dots, i_k}(0))$. Betrachte nun $M_{i_1, \dots, i_k}(t)$ (definiert als die zur Zeit t erreichten Punkte¹¹ aus der Bewegung nach der Hamilton-Dgl mit je einem Anfangswert, dessen ausgewählte Koordinaten in $M_{i_1, \dots, i_k}(0)$ lagen), so ist $\mu(M_{i_1, \dots, i_k}(t)) = \mu(M_{i_1, \dots, i_k}(0))$: Die Form von $M_{i_1, \dots, i_k}(t)$ wird sich mit der Zeit verändern, aber ihr $2k$ -dimensionaler Inhalt ändert sich nicht.
 Werden alle Orts- und Impuls-Koordinaten gewählt, so ist dies die Aussage des Satzes von Liouville [Arn, 1989].

2) Eigenwerte der Ableitung der rechten Seite bzw. der 1. Variation des Flusses einer Hamilton-Dgl :

Die Ableitung der rechten Seite einer Hamilton-Dgl $J \cdot H'^{T'}$ besitzt (als Produkt von schiefsymmetrischem J und symmetrischem $H'^{T'}$) Eigenwerte mit der Eigenschaft :
 Mit λ (Eigenwert) sind auch $-\lambda$ und $\bar{\lambda}, -\bar{\lambda}$ Eigenwerte¹²,
 so dass Spur $(J \cdot H'^{T'}) =$ Summe aller Eigenwerte $= 0$ ist.

Daraus als Folge für die Ableitung des Flusses nach den Anfangswerten :

Die 1. Variation des Flusses $\Phi'_H(t; \bullet)$ besitzt Eigenwerte, welche sich zu Paaren mit Produkt gleich 1 anordnen lassen.

3) Lyapunov-Exponenten des Flusses :

Der Fluss $\Phi_H(t; \bullet)$ einer Hamilton-Dgl besitzt Lyapunov-Exponenten, welche paarweise mit entgegengesetztem Vorzeichen auftreten.

(zu 2) und 3) vgl. [AFH, 1994, S.189, dort nach Benettin, 1980]).

¹¹ Es werden viele Anfangswertaufgaben betrachtet, d.h. eine feste Hamilton-Dgl mit allen Anfangswerten, deren Koordinaten mit ausgewähltem Index in $M_{i_1, \dots, i_k}(0)$ liegen.

Insbesondere heißt das, dass das zeitliche Verhalten der nicht-ausgewählten Koordinaten keinen Einfluss auf $\mu(M_{i_1, \dots, i_k}(t))$ hat.

¹² Doppelte Spiegel-Symmetrie der Eigenwerte von $J \cdot H'^{T'}$. Im Vergleich dazu sind die Eigenwerte einer reellen Matrix i.a. nur spiegelsymmetrisch zur x-Achse (in der komplexen Zahlenebene).

5) Der Fluss als Verknüpfung der Flüsse von Hamilton-Dgln bei additiv aufgeteilter Hamilton-Funktion

Bei additiver Aufteilung einer Hamilton-Funktion in Summanden mit verschwindender Poisson-Klammer, $H(q; p) = H_1(q; p) + H_2(q; p)$ mit $\{H_1(q; p), H_2(q; p)\} = 0$, werden die Hamilton-Dgln zu den Funktionen $H_1(q; p)$ bzw. $H_2(q; p)$ betrachtet :

$$\frac{d}{dt}(q(t); p(t)) = J \cdot H_1'^T(q(t); p(t))$$

bzw.

$$\frac{d}{dt}(q(t); p(t)) = J \cdot H_2'^T(q(t); p(t)).$$

Die zugehörigen Flüsse

$$\Phi_{H_1}(t; \bullet) \text{ bzw. } \Phi_{H_2}(t; \bullet)$$

sind dann vertauschbar bei Verknüpfung

$$\Phi_{H_1}(t; \bullet) \circ \Phi_{H_2}(t; \bullet) = \Phi_{H_2}(t; \bullet) \circ \Phi_{H_1}(t; \bullet).$$

Außerdem gilt merkwürdiger Weise

$$\Phi_H(t; \bullet) = \Phi_{H_1}(t; \bullet) \circ \Phi_{H_1}(t; \bullet),$$

d.h. der Fluss der Hamilton-Dgl, gebildet aus der Gesamt-Hamilton-Funktion, kann (bei verschwindender Poisson-Klammer der Teil-Summanden) durch Verknüpfung aus den Flüssen der Hamilton-Dgln, gebildet aus den Teil-Hamilton-Funktionen, gewonnen werden.

(Vgl. zu diesem tiefliegenden Ergebnis [LR,2005 S.78,100,135 mit BCH-Formel].)

Bemerkung : Dieses Vorgehen (bei $t \rightarrow \Delta t$ klein) kann bei mechanischer Hamilton-Funktion $H(q; p) = T(p) + V(q)$ auf die Summanden $T(p)$ und $V(q)$ angewendet werden, auch wenn die Voraussetzung der verschwindenden Poisson-Klammer an die Summanden $\{T(p), V(q)\} = 0$ nicht erfüllt ist : Die Verknüpfung der analytisch angebbaren Flüsse¹³ ist dann zwar kein exaktes, aber, weil Δt klein ist, ein brauchbares symplektisches numerisches Verfahren mindestens erster Ordnung. [LR,2005 S.78].

Obige Eigenschaft, (bei gegebenen Voraussetzungen) den Fluss als Verknüpfung von Teilflüssen zu sehen, liefert die Motivation, ähnlich auch bei der Konstruktion numerischer Verfahren vorzugehen (auch wenn die Voraussetzungen nur näherungsweise erfüllt sind; vgl. dazu das Vorgehen in Kap.2).

¹³ Der erste Fluss ist die Bewegung bei Abwesenheit aller Kräfte, der andere Fluss ist die Bewegung bei unendlich schwerer Masse (vgl. S.45,46).

6) Der zeitreversible Fluss bei reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion

Eine reflektionssymmetrische Hamilton-Funktion mit $H(q; p) = H(S \cdot (q; p))$ erzeugt eine zeitreversible Hamilton-Dgl (s. S.5).

Dies bedeutet für die Lösungen der zeitreversiblen Hamilton-Dgl :

Mit $(q(t); p(t))$ ist auch $(\hat{q}(t); \hat{p}(t)) := (q(-t); -p(-t))$ eine Lösung ; denn es gilt :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} (t) &= \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (-t) = \left(\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (\tau) \right)_{\tau \leftarrow -t} \cdot \frac{d}{dt} (-t) = \\ &= \begin{pmatrix} T'^T(p(\tau)) \\ +V'^T(q(\tau)) \end{pmatrix}_{\tau \leftarrow -t} \cdot (-1) = \begin{pmatrix} -T'^T(p(-t)) \\ -V'^T(q(-t)) \end{pmatrix} \stackrel{*}{=} \begin{pmatrix} T'^T(-p(-t)) \\ -V'^T(q(-t)) \end{pmatrix} =^{14} \\ &= \begin{pmatrix} T'^T(\hat{p}(t)) \\ -V'^T(\hat{q}(t)) \end{pmatrix} = J \cdot H'^T(\hat{q}(t); \hat{p}(t)) \end{aligned}$$

d.h. $(\hat{q}(t); \hat{p}(t))$ ist eine (mit $(\hat{q}(0) = q_0; \hat{p}(0) = -p_0)$ gestartete Lösung der Hamilton-Dgl und sie erreicht zur Zeit $-T$ den Zustand $(\hat{q}(-T); \hat{p}(-T)) = (q(T); -p(T))$.

■

In ähnlicher Weise folgt :

Der Fluss $\Phi_H(t; q; p)$ und die Funktion $\hat{\Phi}_H(t; q; p) := S \cdot \Phi_H(-t; S(q; p))$ genügen derselben AWA :

Der Fluss $\Phi_H(t; q; p)$ genügt nach 4)b2) der AWA

$$\frac{d}{dt} \Phi_H(t; q; p) = J \cdot H'^T(\Phi_H(t; q; p)), \quad \Phi_H(t=0; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}.$$

Den gleichen Anfangswert zur Zeit $t=0$ hat auch $\hat{\Phi}_H(t; q; p) := S \cdot \Phi_H(-t; S(q; p)) :$

$$\hat{\Phi}_H(t=0; q; p) = S \cdot \Phi_H(t=0; S \cdot (q; p)) = S \cdot S \cdot (q; p) = S^2 \cdot (q; p) \stackrel{S^2=I}{=} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

und erfüllt auch dieselbe Dgl :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\Phi}_H(t; q; p) &= S \cdot \frac{d}{dt} \Phi_H(-t; S \cdot (q; p)) = \\ &= S \cdot \frac{d}{dt} \Phi_H(\tau(t); S \cdot (q; p)) = S \cdot \left(\frac{d}{d\tau} \Phi_H(\tau; S \cdot (q; p)) \right)_{\tau \leftarrow \tau(t)} \cdot \tau'(t) = \\ &= S \cdot J \cdot H'^T(\Phi_H(\tau; S \cdot (q; p)))_{\tau \leftarrow -t} \cdot (-1) = \\ &= -S \cdot J \cdot H'^T(\Phi_H(-t; S \cdot (q; p))) = -S \cdot J \cdot H'^T(S \cdot S \cdot \Phi_H(-t; S \cdot (q; p))) = \\ &= \underset{-S \cdot J \cdot H'^T, S=J \cdot H'^T}{=} J \cdot H'^T(S \cdot \Phi_H(-t; S \cdot (q; p))) = J \cdot H'^T(\hat{\Phi}_H(t; q; p)) \end{aligned}$$

■

¹⁴ Bei * wurde verwendet : $T(p) = T(-p)$, also $T'(p) = T'(-p) \cdot (-I)$ oder $-T'(p) = T'(-p)$.

Folgerung :

Wegen der Eindeutigkeit der AWA-Lösung gilt die Gleichheit beider Funktionen :

$$S \cdot \Phi_H(-t; \bullet) \circ S = \Phi_H(+t; \bullet) \quad (\text{schwache Zeit-Reversibilität})$$

(oder äquivalente Formulierung durch Umstellung $S \cdot (\Phi_H(-t; \bullet))^{-1} \circ S \cdot \Phi_H(+t; \bullet) = id$).

Diese Eigenschaft heißt schwache Zeit-Reversibilität des Flusses.

Mit der stets (!)¹⁵ gegebenen Zeit-Symmetrie des Flusses einer jeden Dgl (vgl 4)a1))

$$\Phi_H(-t; \bullet) \circ \Phi_H(+t; \bullet) = id \quad \text{oder} \quad (\Phi_H(-t; \bullet))^{-1} = \Phi_H(t; \bullet)$$

gilt zusammen mit der schwachen Zeit-Reversibilität :

$$S \cdot \Phi_H(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Phi_H(+t; \bullet)) = id \quad ((\text{volle})\text{Zeit-Reversibilität})$$

Diese Eigenschaft heißt Zeit-Reversibilität des Flusses.¹⁶

Satz :

Der kontinuierliche Fluss eines Hamilton-Dgl-Systems, gebildet mit reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion, ist zeitreversibel.

Eine erste Deutung der Zeit-Reversibilität als "Rücklauf-Eigenschaft in doppelter Zeit"

Die Beziehung

$$(S \cdot \Phi_H(T; \bullet) \circ S) \cdot \Phi_H(T; \bullet) = id$$

bedeutet anschaulich :

Erreicht das reflektionssymmetrische mechanische System aus einem (ersten) Anfangszustand durch Bewegung einen (ersten) Endzustand zur Zeit T , wird aus den erreichten Orten und den negativ genommenen Impulsen (Geschwindigkeiten) ein neuer (zweiter) Anfangszustand gebildet, aus dem sich das System wiederum dieselbe Zeit T weiterentwickelt, werden schließlich die erreichten Impulse (Geschwindigkeiten) noch einmal umgekehrt, so befindet sich das System nach der Zeit $2 \cdot T$ wieder im (ersten) Anfangszustand.

Die genannten Eigenschaften kommen also jedem (theoretischen) Fluss bei reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion zu. Da aber der (exakte) Fluss i.a. nicht konkret (analytisch oder zahlenmäßig) angegeben werden kann, (außer in seltenen einfachen Fällen, vgl. dazu S.17-18), später aber im Kapitel 2 im Hinblick für den konkreten numerischen Approximations-Fluss auch diese Eigenschaften gefordert werden, sollen Begriffe "Zeit-Symmetrie", "schwache Zeit-Reversibilität" und "Zeit-Reversibilität", äquivalente Formulierungen, ihre praktische Überprüfbarkeit, ihre Beziehung untereinander und ihre Bedeutung für die Rücklaufrechnung kurz erläutert werden¹⁷.

¹⁵ Numerischen Verfahren fehlt i.a. diese Zeit-Symmetrie-Eigenschaft. Sie muss zusätzlich für die i.a. schwach zeitreversiblen numerischen Verfahren nachgewiesen werden, um auch Zeit-Reversibilität für das numerische Verfahren zu garantieren. Diese Zusatzforderung schränkt die Möglichkeiten für numerische Verfahren ein.

¹⁶ d.h. die Abbildung $S \cdot \Phi_H(t; \bullet)$ ist involutorisch.

Eine (t -parameterisierte) Abbildung¹⁸ $\Psi(t; \bullet)$ heißt zeitsymmetrisch (ZS), wenn

$$\Psi(-t; \bullet) \circ \Psi(+t; \bullet) = id$$

oder in äquivalenter Formulierung (durch Umstellung)

$$(\Psi(-t; \bullet))^{-1} = \Psi(+t; \bullet).$$

Sie heißt schwach zeitreversibel (SZR), wenn

$$S \cdot \Psi(-t; \bullet) \circ S = \Psi(+t; \bullet)$$

oder in äquivalenter Formulierung (durch Umstellung)

$$S \cdot (\Psi(-t; \bullet))^{-1} \circ S \cdot \Psi(+t; \bullet) = id \quad (*).$$

Sie heißt zeitreversibel (ZR), wenn

$$S \cdot (\Psi(t; \bullet))^{-1} \circ S = \Psi(+t; \bullet)$$

oder in äquivalenter Formulierung

$$S \cdot \Psi(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(+t; \bullet)) = id (**).$$

Bemerkung zur experimentellen Nachvollziehbarkeit von t -parametrisierten Abbildungen (oder auch Flüssen), wenn t die (stets vorwärtsschreitende) Zeit bedeutet :

- $\Psi(t; z) =: w$ definiert aus dem Zustand z (aufgefasst als einem Zustand zur momentanen Zeit τ) einen Folgezustand w (zur Zeit $\tau+t$)
- $\Psi(-t; z) =: v$ definiert analog einen Vorgängerzustand v (zur Zeit $\tau-t$)
- $\Psi^{-1}(t; z) =: w \leftrightarrow \Psi(t; w) = z$ definiert einen Vorgängerzustand w (zur Zeit $\tau-t$)
- $\Psi^{-1}(-t; z) =: v \leftrightarrow \Psi(-t; v) = z$ definiert einen Folgezustand v (zur Zeit $\tau+t$).

Dies bedeutet, dass reale physikalische Vorgänge (mit fortschreitender Zeit) nur durch Verwendung von $\Psi(t; \bullet)$ oder $\Psi^{-1}(-t; \bullet)$ beschrieben werden können; bei Verwendung einer der beiden anderen Zuordnungen $\Psi(-t; \bullet)$ oder $\Psi^{-1}(t; \bullet)$ ist nur rechnerische Ausführung (Simulation auf einem Computer) möglich, da bei ihrer Durchführung (experimentell nicht realisierbare) Vorgängerzustände bestimmt werden müssen.

Die obigen Beziehungen bezeichnen i.a. nur das Gleichheit des Ergebnisses bei rechnerischer Ausführung von linker und rechter Seite ; hinsichtlich realer Ausführbarkeit (im Experiment bei fortlaufender Zeit) kann durchaus Ungleichheit bestehen, z.B. ist in $S \cdot (\Psi(t; \bullet))^{-1} \circ S = \Psi(+t; \bullet)$ die linke Seite experimentell nicht realisierbar, die rechte Seite beschreibt ein ausführbares Experiment.

Anwendungsorientierte Bemerkung :

Von den untereinander gleichwertigen Formulierungen der schwachen oder (vollen) Zeit-Reversibilität sind die auf $\dots = id(q; p)$ endenden Gleichungen bei Rücklauf-Simulation die wichtigeren, weil nach gewissen Vorschriften der jeweils linken Seiten am Ende wieder der Anfangszustand, nämlich $id(q; p)$, erreicht werden soll.

Beide Vorschriften (*), bzw. (**) simulieren (nach Geschwindigkeitsumkehr, beschrieben durch die Anwendung der inneren S -Operation) einen Rücklauf eines Mehrteilchensystems in den Anfangszustand. Die Rechnung nach der schwachen

¹⁷ Der eigentliche Sinn der Ausführungen erschließt sich erst bei Anwendung konkreter numerischer Methoden zur (möglichst guten) approximativen Lösung der Hamilton-Dgl. Hinsichtlich der Eigenschaften der exakten Dgl-Lösung bringen sie über obigen Satz hinaus keinen Gewinn.

¹⁸ Die Abbildung muss nicht notwendig ein Fluss einer Dgl sein.

Zeit-Reversibilität (*) ist bei schwach zeitreversibler Rechenvorschrift $\Psi_H(t; q; p)$ anwendbar; sie benötigt jedoch vor und nach der Geschwindigkeitsumkehr verschiedene Rechenvorschriften, das explizite (numerisch gewählte) $\Psi_H(t; q; p)$ und das implizite $\Psi_H^{-1}(-t; q; p)$ ¹⁹. Dagegen verwendet die Rechnung nach der (vollen) Zeit-Reversibilität (**) vor und nach der Geschwindigkeitsumkehr beide Mal dasselbe $\Psi_H(t; q; p)$. Diese vorteilhafte Berechnung nach (**) ist jedoch nur unter der Voraussetzung erlaubt, dass ein (numerisches) schwach zeitreversibles Verfahren $\Psi_H(t; q; p)$ mit zusätzlicher Zeit-Symmetrie gewählt wird.

Bei Wahl eines zeitreversiblen approximierenden (numerischen) Verfahrens wird dann dem zeitreversiblen (theoretischen) Fluss einer Hamilton-Dgl mit reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion ein konkreter Fluss zur Seite gestellt, mit dem das Rücklaufverhalten des mechanischen Systems in gleicher Weise wie mit dem (theoretischen) Fluss nachvollzogen werden kann. Die Schwierigkeit besteht allerdings in der (nur in Ausnahmefällen) durch explizite Verfahren herzustellenden Zeit-Symmetrie numerischer Verfahren. Einer dieser Ausnahmefälle liegt bei Verwendung von EulerA- und EulerB-Verfahren vor, vgl. Kapitel 2 S.50.

Zur Verdeutlichung des Begriffes Zeit-Reversibilität :

Die Zeit-Reversibilität $S \cdot \Phi_H(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Phi_H(+t; \bullet)) = id$ bedeutet für die einzelne Dgl-Lösung das Erreichen eines vergangenen Zustandes in der Zukunft ("Rücklauf") :

Es sei

$$(q_1(t); \dots; q_N(t); p_1(t); \dots; p_N(t))$$

eine einzelne im Zeitintervall $[0, T]$ definierte Lösungskurve mit gegebenen (Orts- und Impuls-)Startwerten

$$(q_1(0); \dots; q_N(0); p_1(0); \dots; p_N(0)),$$

welche zur Zeit T den Endzustand

$$(q_1(T); \dots; q_N(T); p_1(T); \dots; p_N(T))$$

erreicht.

Es wird nun die im Zeitintervall $[T, 2 \cdot T]$ definierte Funktion betrachtet

$$(q_1(2 \cdot T - t); \dots; q_N(2 \cdot T - t); -p_1(2 \cdot T - t); \dots; -p_N(2 \cdot T - t)).$$

Sie ist(!) eine Lösung der Hamilton-Dgl. (d.h. sie beschreibt die Bewegung des Mehrteilchensystems im Zeitintervall $[T, 2 \cdot T]$) :

Denn mit der Bezeichnung

$$\begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix}(t) := \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix}(2 \cdot T - t).$$

gilt :

¹⁹ i.a. Berechnung durch aufwendige numerische Fixpunktiteration. ($\Psi^{-1}(t; q; p)$ kann explizit analytisch angegeben werden, wenn es gelingt die Beziehung $\Psi(t; Q; P) =: (q; p)$ nach $(Q; P) = \dots$ (Ausdruck in t, q, p, \dots) analytisch aufzulösen. Die rechte Seite ist dann $\Psi^{-1}(t; q; p)$).

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} (t) &= \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (2 \cdot T - t) = \left(\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (\tau) \right)_{\tau \leftarrow 2 \cdot T - t} \cdot \frac{d}{dt} (2 \cdot T - t) = \\ &= \begin{pmatrix} T'^T p(\tau) \\ +V'^T(q(\tau)) \end{pmatrix}_{\tau \leftarrow 2 \cdot T - t} \cdot (-1) = \begin{pmatrix} -T'^T(p(2 \cdot T - t)) \\ -V'^T(q(2 \cdot T - t)) \end{pmatrix} \stackrel{*}{=} \begin{pmatrix} T'^T(-p(2 \cdot T - t)) \\ -V'^T(q(2 \cdot T - t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'^T(\hat{p}(t)) \\ -V'^T(\hat{q}(t)) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad 20$$

$\begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} (t)$ ist also eine Lösung der Hamilton-Dgl auf $[T, 2 \cdot T]$.

Der Startwert der $[T, 2 \cdot T]$ -Fortsetzung bei T ist :

$$\begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} (T) = \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (2 \cdot T - T) = \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (T) = S \cdot \begin{pmatrix} q(T) \\ p(T) \end{pmatrix} :$$

Dies ist der Endzustand der $[0, T]$ -Lösung mit negativem Impuls (negativer Geschwindigkeit).

Zur Zeit $2 \cdot T$ ist der Wert der $[T, 2 \cdot T]$ -Fortsetzung

$$\begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} (2 \cdot T) = \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} (2 \cdot T - 2 \cdot T) = \begin{pmatrix} q(0) \\ -p(0) \end{pmatrix} = S \cdot \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix},$$

also gleich dem Startwert der $[0, T]$ -Lösung mit negativem Impuls oder

$$S \cdot \begin{pmatrix} \hat{q}(2 \cdot T) \\ \hat{p}(2 \cdot T) \end{pmatrix} = S^2 \cdot \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} \stackrel{S^2=id}{=} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix}.$$

■

Die angehaltene und mit negierten Impulsen (Geschwindigkeiten) fortgesetzte Bewegung eines reflektionssymmetrischen Systems läuft (bei den vom System erzeugten Kräften²¹) in vorhersagbarer Zeit durch dieselben Orte mit negativen Impulsen (Geschwindigkeiten) zurück.

(Kann diese Impuls-Umkehr tatsächlich ausgeführt werden, so ist der weitere Bewegungsablauf also aus dem vorherigen Bewegungsablauf vorhersagbar.)

Die drei Begriffe (ZS, SZR, ZR) stehen in folgendem Zusammenhang

Satz :

Schwache Zeit-Reversibilität und Zeitsymmetrie \Leftrightarrow Zeit-Reversibilität.

(d.h. genau die ZS-,SZR-Abbildungen sind zeitreversibel)

Denn aus

$$S \cdot (\Psi(-t; \bullet))^{-1} \circ S \cdot \Psi(+t; \bullet) = id \text{ und } (\Psi(-t; \bullet))^{-1} = \Psi(t; \bullet) \text{ folgt } S \cdot \Psi(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(+t; \bullet)) = id .$$

²⁰ Bei * wurde verwendet : $T(p) = T(-p)$, also $T'(p) = T'(-p) \cdot (-I)$ oder $-T'(p) = T'(-p)$.

²¹ Bei elektrodynamischen Bewegungen in Anwesenheit eines Magnetfeldes (und also nicht reflektionssymmetrischer Hamilton-Funktion) müsste das Magnetfeld (durch äußeren Eingriff!) umgepolt werden, um den gleichen Rücklaufeffekt zu erzielen : Die Hamilton-Funktion bei

Anwesenheit eines Magnet Feldes $H(q; p) := \frac{1}{2} (p + A(q))^T \cdot M^{-1} \cdot (p + A(q)) + V(q)$ (mit der

Rotations-Stammfunktion $A(q)$ zum Magnetfeld) wird reflektionssymmetrisch

(mit $H(q, p) = H(q, -p)$) erst dann, wenn mit $p \rightarrow -p$ simultan $A(q) \rightarrow -A(q)$ übergeht.

Umgekehrt liefert $S \cdot \Psi(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(+t; \bullet)) = id$ zunächst²² $\Psi(-t; \bullet) \circ \Psi(+t; \bullet) = id$ (Zeit-Symmetrie). Aus beiden Eigenschaften folgt dann $S \cdot (\Psi(-t; \bullet))^{-1} \circ S \cdot \Psi(+t; \bullet) = id$.

Einfache Folgerungen²³ :

Vererbbarkeit aller Eigenschaften (ZS, SZR, ZR) bei n-fach Iteration :

Bei iterierter Anwendung einer beliebigen t -parametrisierten Abbildung vererben sich die genannten Eigenschaften von $\Psi(t; \bullet)$ auf die Iterierte $\Psi^n(t; \bullet)$. Z.B. für $n = 2$:

$$\begin{aligned} \Psi^2(-t; \Psi^2(t; \bullet)) &= \Psi(-t; \bullet) \circ \underbrace{\Psi(-t; \bullet) \circ \Psi(t; \bullet)}_{=id} \circ \Psi(t; \bullet) = id \quad (\text{ZS}), \\ S \cdot \Psi^2(-t; S \bullet) &= S \cdot \Psi(-t; \bullet) \circ \Psi(-t; S \bullet) = \\ &= \underbrace{S \cdot \Psi(-t; \bullet)}_{\Psi(t; \bullet)} \circ \underbrace{S \cdot \Psi(-t; S \bullet)}_{\Psi(t; \bullet)} = \Psi^2(t; \bullet) \quad (\text{SZR}), \\ S \cdot \Psi^2(t; S \cdot \Psi^2(t; q; p)) &= S \cdot \Psi(t; \bullet) \circ \Psi(t; \bullet) \circ S \cdot \Psi(t; \bullet) \circ \Psi(t; S \bullet) = \\ &= S \cdot \Psi(t; \bullet) \circ \underbrace{S \cdot \Psi(t; \bullet) \circ S \cdot \Psi(t; \bullet)}_{=id} \circ \Psi(t; S \bullet) = id \quad (\text{ZR}). \end{aligned}$$

Vererbbarkeit der Eigenschaften (ZS, SZR, ZR) bei Verknüpfung :

Die Eigenschaft SZR vererbt sich bei Verknüpfung zweier beliebiger solcher Abbildungen auf die Verknüpfung;

denn

$$S \cdot \Psi_1(-t; \bullet) \circ \Psi_2(-t; \bullet) \circ S \stackrel{S^2=id}{=} \underbrace{(S \cdot \Psi_1(-t; S \bullet))}_{\Psi_1(+t; \bullet)} \circ \underbrace{(S \cdot \Psi_2(-t; S \bullet))}_{\Psi_2(+t; \bullet)} = \Psi_1(+t; \bullet) \circ \Psi_2(+t; \bullet) \quad (\text{SZR}).$$

Eigenschaft ZS und ZR haben bei Zweifach-Verknüpfung diese Eigenschaft nicht²⁴.

Jedoch vererbt sich die Eigenschaft ZS und ZR bei symmetrischer Dreifach-Verknüpfung zweier beliebiger Abbildungen. (Dabei ist unter einer symmetrischen Dreifach-Verknüpfung zweier Abbildungen Ψ_1 und Ψ_2 die Verknüpfung $\Psi_2 \circ \Psi_1 \circ \Psi_2$ zu verstehen²⁵);

denn

$$\Psi_2(-t; \bullet) \circ \Psi_1(-t; \bullet) \circ \underbrace{\Psi_2(-t; \bullet) \circ \Psi_2(t; \bullet)}_{=id} \circ \Psi_1(t; \bullet) \circ \Psi_2(t; \bullet) = \dots = id \quad (\text{ZS})$$

und

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_2(t; \bullet) \circ \Psi_1(t; \bullet) \circ \Psi_2(t; \bullet) \circ S \cdot \Psi_2(t; \bullet) \circ \Psi_1(t; \bullet) \circ \Psi_2(t; \bullet) = \\ = S \cdot \Psi_2(t; \bullet) \circ \Psi_1(t; \bullet) \circ \underbrace{S \cdot \Psi_2(t; \bullet) \circ S \cdot \Psi_2(t; \bullet)}_{=id} \circ \Psi_1(t; \bullet) \circ \Psi_2(t; \bullet) = \dots = id \quad (\text{ZR}). \end{aligned}$$

Satz :

Alle alle Eigenschaften (SZ, SZR, ZR) vererben sich bei Iteration und bei symmetrischer Dreifach-Verknüpfung.

²² Aus $S \cdot \Psi(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(+t; \bullet)) = id$ und $\Psi(-t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(-t; \bullet)) \circ S = id$ folgt

$S \cdot \Psi(+t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(+t; \bullet)) \circ \Psi(-t; \bullet) \circ (S \cdot \Psi(-t; \bullet)) \circ S = id \circ id = id$, also

$\Psi(+t; \bullet) \circ S \cdot (\Psi(+t; \bullet) \circ \Psi(-t; \bullet)) \circ (S \cdot \Psi(-t; \bullet)) = id$ und daraus $\Psi(+t; \bullet) \circ \Psi(-t; \bullet) = id$.

²³ Erwähnung im Hinblick auf Kapitel 2.

²⁴ außer wenn die beiden Abbildungen vertauschen.

²⁵ Beachte: Bei einer symmetrischen Dreifach-Verknüpfung werden zwar drei Verknüpfungen vorgenommen, jedoch nur von zwei Abbildungen : Eine Abbildung kommt dabei doppelt vor.

Die Begriffe ZS, SZR, ZR, verdeutlicht am Beispiel des Flusses der Bewegung unter

konstanter (Orts-unabhängiger) Kraft, also $\Phi(t; q; p) = \begin{pmatrix} q + p \cdot t + \frac{1}{2} \cdot t^2 \\ p + t \end{pmatrix}$. (Dies ist die

analytische Lösung der Hamilton-Dgl mit zeitreversibler Hamilton-Funktion

$H(q, p) := \frac{p^2}{2} - q$, also die "beschleunigte Bewegung im konstanten Kraftfeld") :

Zur Zeit-Symmetrie(ZS) des Flusses der obigen Bewegung (stellvertretend für den Fluss einer jeden Dgl, aber nicht jedes numerischen Verfahrens, wenn gilt

$$\Phi(-T; q_0; p_0)^{-1} = \Phi(+T; q_0; p_0) \quad) :$$

Frage :

In welchem Zustand muss die Bewegung in der Vergangenheit $-T$ gewesen sein, damit aus diesem Zustand nach $+T$ Zeiteinheiten (also zur Gesamtzeit $t = 0$) der Zustand $(q_0; p_0)$ erreicht wird ?

Antwort :

Im Zustand $\Phi(T; q_0; p_0)$, d.h. dem Zustand, der, wenn er bei $t = 0$ mit $(q_0; p_0)$ gestartet wurde, zur Zeit T erreicht sein wird.

Im Beispiel :

Die Gleichung $\Phi(-T; \underbrace{r; s}_{\text{gesucht}}) = \underbrace{\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}}_{\text{gegeben}}$ hat die Lösung

$$\begin{pmatrix} r \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ p_0 + T \end{pmatrix} = \Phi(+T; q_0; p_0) .$$

Zur schwachen Zeit-Reversibilität(SZR) des Flusses der obigen Bewegung (stellvertretend für den Fluss einer jeden zeitreversiblen Hamilton-Dgl und aller bekannten²⁶ numerischen Verfahren, wenn gilt

$$\Phi(-T; S(q_0; p_0)) = S \cdot \Phi(+T; q_0; p_0) \quad) :$$

Frage :

Welcher Zustand (bei Start mit $(q_0; -p_0)$) wurde in der Vergangenheit $-T$ erreicht?

Antwort :

Der Zustand, der (bei Start mit $(q_0; +p_0)$) zur Zeit $+T$ erreicht sein wird, allerdings mit negativem Impuls .

Im Beispiel :

$$\begin{aligned} \Phi(-T; q_0; -p_0) &= \begin{pmatrix} q_0 - p_0 \cdot (-T) + \frac{1}{2} \cdot (-T)^2 \\ -p_0 - T \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ -(p_0 + T) \end{pmatrix} = S \cdot \begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ p_0 + T \end{pmatrix} = S \cdot \Phi(+T; q_0; +p_0) \end{aligned}$$

²⁶ vgl. [LR,2005 S.87]

Zur Zeit-Reversibilität(ZR) des Flusses der obigen Bewegung (stellvertretend für den Fluss jeder zeitreversiblen Hamilton-Dgl und jedes zeitreversiblen numerischen Verfahrens, wenn gilt

$$S \cdot \Phi(T; S \cdot \Phi(T; q_0; p_0)) = (q_0; p_0) \quad) :$$

Aussage :

Mit $(q_0; p_0)$ startend, werde nach $+T$ Zeiteinheiten der Zustand $\Phi(T; q_0; p_0) = (q(T); p(T))$ erreicht. Aus dem veränderten (neuen) Start $(q(T); -p(T))$ schreite nun die Bewegung um weitere $+T$ Zeiteinheiten fort : Dann wird zur Gesamtzeit $2 \cdot T$ der Zustand $(q_0; -p_0)$ erreicht. Dies ist der Ausgangszustand, aber mit negativem Impuls.

Im Beispiel :

$$\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{nach } T \text{ ZE}} \begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ p_0 + T \end{pmatrix};$$

neue Startbedingungen : $\begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 =: \hat{q} \\ -(p_0 + T) =: \hat{p} \end{pmatrix}$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{q} \\ \hat{p} \end{pmatrix} &\xrightarrow{\text{nach } T \text{ ZE}} \begin{pmatrix} \hat{q} + \hat{p} \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ \hat{p} - t \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q_0 + p_0 \cdot T + \hat{q} + \hat{p} \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 - (p_0 + T) \cdot T + \hat{q} + \hat{p} \cdot T + \frac{1}{2} \cdot T^2 \\ -(p_0 + T) + T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_0 \\ -p_0 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Anschauliche Bedeutung der schwachen Zeit-Reversibilität und der Zeit-Reversibilität

a) Schwache Zeit-Reversibilität (in experimentell nicht realisierbarer Form) :

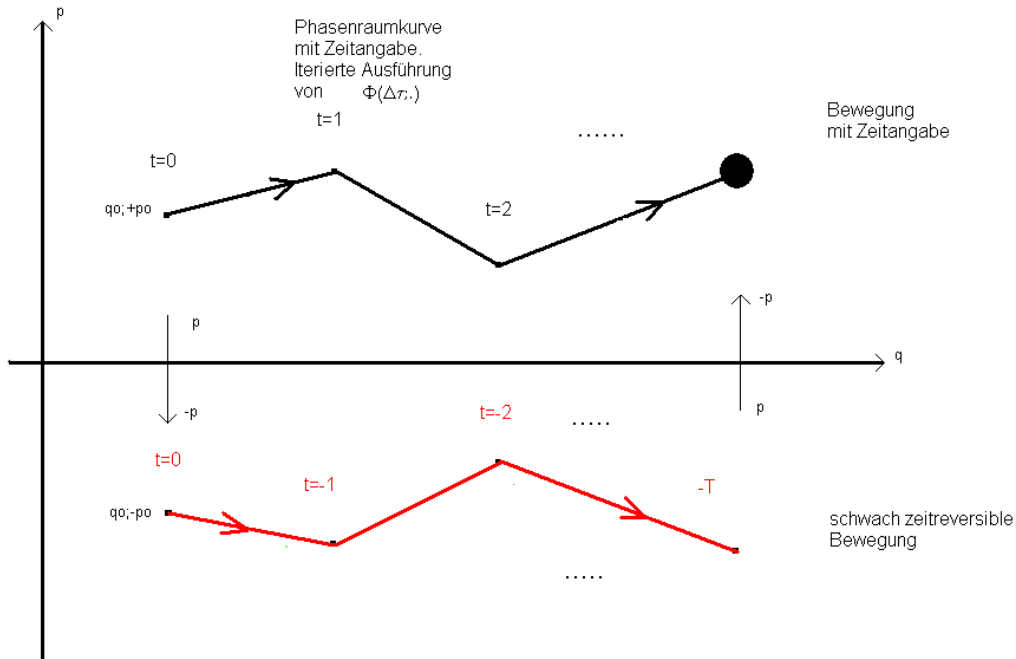


Abbildung 1.1 : Veranschaulichung des Begriffes "schwach zeitreversibel".

(..\EigeneDateien\EigeneBilder\schwachzeitreversibel.GIF)

Beide Bewegungen (schwarz) und die unphysikalische Bewegung (rot) erreichen zur Zeit T denselben Endzustand \bullet .

b) Zeit-Reversibilität :

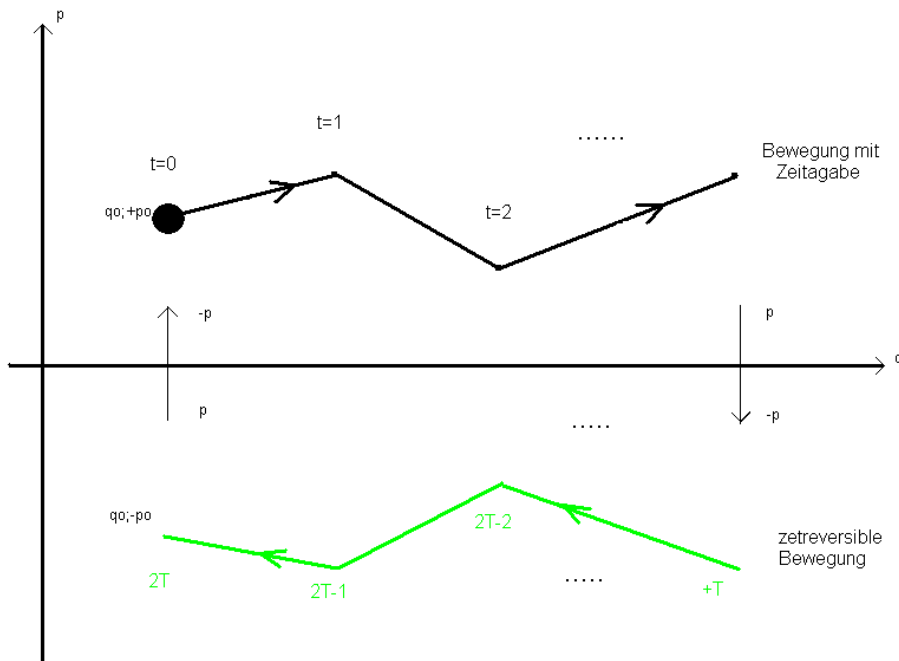


Abbildung 1.2 : Veranschaulichung des Begriffes "zeitreversibel".

(..\EigeneDateien\EigeneBilder\zeitreversibel.GIF)

Die Bewegung (schwarz) und die Fortsetzung der Bewegung (grün) erreicht zur Zeit $2 \cdot T$ wieder den Anfangszustand \bullet .

7) Beispiel : Das N-Körper System bei Paar-Abstands-Potentialen
 (mit einer additiv aufgeteilten, reflektionssymmetrischen Hamilton-Funktion)

Die Hamilton-Funktion für N Körper mit Einheits-Massen $m_i=1$, ($i=1, \dots, N$), welche sich in paarweise abstandsbedingten Potentialen $\varphi(r)$ bewegen, hat eine mechanische Hamilton-Funktion :

$$H(q_1; \dots; q_N; p_1; \dots; p_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^T \cdot p_i + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \varphi(\|q_i - q_j\|) \right).$$

Diese mechanische Hamilton-Funktion ist additiv aufgeteilt²⁷

in die nur vom Impuls abhängige kinetische Energie $T(p_1; \dots; p_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^T \cdot p_i$

und

in die nur vom Ort abhängige potentielle Energie $V(q_1; \dots; q_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \varphi(\|q_i - q_j\|) \right).$

Diese Hamilton-Funktion ist auch reflektionssymmetrisch, da

$$T(p_1; \dots; p_N) = T(-p_1; \dots; -p_N)$$

Für die einzelnen Orte $q_i(t)$ und Impulse $p_i(t)$ ergibt sich also als zugehöriges Hamilton-Dgl-System

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i(t) &= p_i(t) \\ \frac{d}{dt} p_i(t) &= -V_{q_i}^T(q_1(t); \dots; q_N(t)) \end{aligned} \quad (i = 1, \dots, N) .$$

Unter Beachtung der konkreten potentiellen Energie

$$V(q_1; \dots; q_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \varphi(\|q_i - q_j\|) \right)$$

als Summe von φ -Potentialen, angewandt auf Paar-Abstände, ergibt sich :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i(t) &= p_i(t), \\ \frac{d}{dt} p_i(t) &= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N K_{ij}(q_1(t); \dots; q_N(t)) \end{aligned} \quad (i = 1, \dots, N) .$$

Dabei bedeutet

$$K_{ij}(q_1(t), \dots, q_N(t)) := (q_i(t) - q_j(t)) \cdot \frac{-\varphi'(\|q_i(t) - q_j(t)\|)}{\|q_i(t) - q_j(t)\|}$$

die vom Körper j auf den Körper i ausgeübte Kraft : Sie wirkt längs der gemeinsamen Verbindungslinie

$$q_i(t) - q_j(t)$$

²⁷ Jedoch haben dieses T und dieses V keine verschwindende Poisson-Klammer.

und ist mit dem skalaren Faktor

$$fak_{i,j}(\varphi) := -\frac{\varphi'(\|q_i(t) - q_j(t)\|)}{\|q_i(t) - q_j(t)\|}$$

zu versehen²⁸.

Für das Newton-Potential

$$\varphi_N(\|q_i - q_j\|) := -\|q_i - q_j\|^{-1}$$

ergeben sich die Faktoren

$$fak_{i,j}(\varphi_N) = -\|q_i(t) - q_j(t)\|^{-3}.$$

Für das Lennard-Jones-Potential

$$\begin{aligned}\varphi_{LJ}(\|q_i - q_j\|) &:= \|q_i - q_j\|^{-12} - 2 \cdot \|q_i - q_j\|^{-6} = \\ &= ((q_i - q_j)^T \cdot (q_i - q_j))^{-6} - 2 \cdot ((q_i - q_j)^T \cdot (q_i - q_j))^{-3}\end{aligned}$$

ergeben sich die Faktoren

$$fak_{i,j}(\varphi_{LJ}) := 12 \cdot \{ [(q_i(t) - q_j(t))^T \cdot (q_i(t) - q_j(t))]^{-7} - [(q_i(t) - q_j(t))^T \cdot (q_i(t) - q_j(t))]^{-4} \}.$$

²⁸ Alle mechanischen Hamilton-Dgl-Systeme, deren Kräften ein Paar-Potential $\varphi(\|q_i - q_j\|)$ zugrunde liegt, sind gleich aufgebaut: Sie unterscheiden sich nur durch diesen skalaren Faktor $fak_{i,j}(\varphi)$.

8) Systeme mit geometrischen, global parametrisierbaren Zwangsbedingungen

Ein Mehrteilchensystem (aus N Objekten) kann geometrischen Zwangsbedingungen unterworfen sein, d.h. seine Orte $q_i(t)$ können sich nicht frei in der ganzen zur Verfügung stehenden Ebene (oder im Raum) ausbreiten, sondern ihre Bewegungsmöglichkeit ist auf gewisse vorgegebene Bereiche beschränkt.

Die Bereiche sollen als Untermannigfaltigkeiten (m-viele Einschränkungen an die Orte) durch Gleichungen der Form

$$g_i(q_1; \dots; q_N) = 0 \quad (i = 1, \dots, m)$$

beschrieben werden können.

Diese Bereiche sind durch ihre Starrheit fähig, Kräfte beliebiger Stärke in Richtung der Senkrechten $g_i'^T(q_1; \dots; q_N)$ zu erzeugen (d'Alembert-Prinzip).

Dabei stellt sich die variable Stärke während der Bewegung genau so ein, dass die Bewegung der Körper auf den Untermannigfaltigkeiten stattfindet, d.h. zu der äußeren Kraft treten noch Kräfte hinzu, die von den Untermannigfaltigkeiten ausgeübt werden.

Mit

$$g(q) := (g_1(q); \dots; g_m(q))$$

ergibt sich ein Hamilton-Dgl-System (bei Anwesenheit von Zwangsbedingungen unbekannter Stärke λ), erweitert um die Einschränkungsgleichungen. Die Stärke λ muss sich gerade so einstellen, dass die Bewegung auf den Untermannigfaltigkeiten stattfindet (Die Zwangsbedingungen müssen also Integrale der Bewegung werden.) :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'^T(p(t)) \\ -V'^T(q(t)) - g'^T(q(t)) \cdot \lambda \end{pmatrix}^{29}$$

$$g(q(t)) = \vec{0}$$

Es gibt folgende Möglichkeiten, die unbekanntes λ zu bestimmen :

Die auftretenden Zwangskräfte wirken so, dass die geometrische Bedingung $g(q) = \vec{0}$ während der Bewegung $q(t)$ eingehalten wird³⁰. Dies ist erfüllt, wenn die Anfangswerte, der Start-Ort q_0 und die Start-Geschwindigkeit $\dot{q}_0 = M^{-1} \cdot p_0$, die geometrischen Vorgaben erfüllen, und die Stärke der bei der Bewegung entstehenden Zwangskräfte $\lambda(q, p)$ so gesetzt wird, dass der dann eingenommenene Ort $q(t)$ auch weiterhin die geometrischen Vorgaben erfüllt. D.h. es muss gelten :

1. $g(q_0) = 0$
2. $g'(q_0) \cdot T'^T(p_0) = 0$
3. $\lambda(q, p) := (g'(q) \cdot T'^T(p) \cdot g'^T(q))^{-1} \cdot (-g'(q) \cdot T'^T(p) \cdot V'^T(q) + g''(q) \cdot T'^T(p) \times T'^T(p))$.

²⁹ Das ist ein Hamilton-Dgl-System, allerdings erzeugt von der (erweiterten) Hamilton-Funktion

^{Zwang} $H(q; p) := H(q; p) + \lambda^T \cdot g(q)$

³⁰ Die geometrischen Zwangsbedingungen werden also Integrale der Bewegung.

Die Bestimmung 3) folgt aus der Forderung

$$0 \equiv \frac{d^2}{dt^2} g(q(t)) = g''(q(t)) \cdot \dot{q}(t) \times \dot{q}(t) + g'(q(t)) \cdot \ddot{q}(t),$$

und dann dem Einsetzen von

$$\dot{q}(t) = T'^T(p(t)), \quad \ddot{q}(t) = T'^T(p(t)) \cdot \dot{p}(t) = T'^T(p(t)) \cdot (-V'^T(q(t)) - g'^T(q(t)) \cdot \lambda)$$

(aus den Bewegungsgleichungen)

sowie schließlich dem Auflösen³¹ der Gleichung nach λ .

Dann gilt nämlich $g(q(t))|_{t=t_0} = 0, \frac{d}{dt} g(q(t))|_{t=t_0} = 0, \frac{d^2}{dt^2} g(q(t)) \equiv 0$, also $g(q(t)) \equiv 0$.

Mit den so gesetzten Stärken der Zwangskräfte entsteht ein (äußerlich von den Zwangsbedingungen $g(q(t)) = \vec{0}$ befreites) Dgl-System

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'^T(p(t)) \\ -V'^T(q(t)) - g'^T(q(t)) \cdot \lambda(q(t), p(t)) \end{pmatrix}$$

Zusammengefasst :

Richtung und Stärke der (von der Geometrie ausgeübten) Zwangskräfte lassen sich in Abhängigkeit von der Bewegung bestimmen. Es kann ein entsprechendes geschlossenes Dgl-System aufgestellt werden, dessen rechte Seite allein von den Bewegungsgrößen abhängt.

Aus der Form $\lambda(q, p)$ (quadratische Abhängigkeit von p) folgt, dass bei reflektions-symmetrischer Hamilton-Funktion, also einer zeitreversiblen Hamilton-Dgl, die erweiterte rechte Seite des Dgl-Systems weiterhin zeitreversibel bleibt.

Eine andere (günstigere) Möglichkeit, eine sogar Dimensions-reduzierte Hamilton-Dgl zu erhalten, besteht bei global parameterisierbaren Zwangsbedingungen, d.h. wenn die (einfachen) geometrischen Zwangsbedingungen

$$M_g := \{(q_1; \dots; q_N) \mid g(q_1; \dots; q_N) = \vec{0}\}$$

eine globale Parameterisierung besitzen :

Es gibt also ein

$$G: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{dN} \text{ mit } Q \in \mathbb{R}^m \rightarrow G(Q) \in \mathbb{R}^{N \cdot d}, \text{ so dass } g(G(Q)) \equiv \vec{0} \quad \forall Q \in \mathbb{R}^m.$$

Die Variablen Q – jetzt keinem Zwang mehr unterworfen – heißen generalisierte Koordinaten.

³¹ Die Auflösbarkeit nach λ verlangt nur, dass $g'(q)$ maximalen Rang auf den eingeschränkten Orten $g(q) = 0$ hat (d.h. dort jeweils lokal parametrisierbar ist), nicht aber, dass eine globale Parametrisierung existiert (s.u.).

In diesem Fall ist der Übergang auf ein neues Hamilton-Dgl-System in den generalisierten Koordinaten (mit reduzierten Freiheitsgraden) möglich, und zwar :

Gegeben sei eine Hamilton-Funktion $H(q, p)$ und global parameterisierbare Zwangsbedingungen $g(q) = 0$. Ist dann G diese globale Parameterisierung (so dass also gilt $g(G(Q)) \equiv \vec{0}$ für $Q \in \mathbb{R}^m$), so wird gesetzt :

$$\begin{aligned} q &:= G(Q), \\ p &:= G'(Q) \cdot (G'^T(Q) \cdot G'(Q))^{-1} \cdot P \end{aligned} \quad 32$$

und damit eine transformierte Hamilton-Funktion

$${}_{trans}H(Q; P) := H(G(Q); G'(Q) \cdot (G'^T(Q) \cdot G'(Q))^{-1} \cdot P)$$

in den generalisierten Koordinaten Q, P erzeugt.

Ist nun $(Q(t); P(t))$ eine Lösung der (aus der transformierten Hamilton-Funktion ${}_{trans}H(Q, P)$ ³³) hervorgehenden Hamilton-Dgl,

$$\begin{pmatrix} \dot{Q} \\ \dot{P} \end{pmatrix} = J \cdot {}_{trans}H'^T(Q; P) \quad (= \begin{pmatrix} {}_{trans}H'_P(Q; P) \\ -{}_{trans}H'_Q(Q; P) \end{pmatrix}),$$

so ist

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} G(Q(t)) \\ G'(Q(t)) \cdot (G'^T(Q(t)) \cdot G'(Q(t)))^{-1} \cdot P(t) \end{pmatrix}$$

eine Lösung des mit der Hamilton-Funktion ${}_{Zwang}H(q; p) = H(q; p) + \lambda^T g(q)$ gebildeten Hamilton-Dgl-Systems, welche zusätzlich noch die Zwangsbedingungen erfüllt, d.h. es gilt auch noch

$$g(q(t)) = \vec{0}.$$

Man erhält also durch Betrachtung eines Mehrteilchensystems mit transformierter Hamilton-Funktion nach Rücktransformation Lösungen des Mehrteilchensystems, welche sich auf den vorgegebenen Untermannigfaltigkeiten bewegen.

Zusammengefasst

Es genügt also bei global parametrisierbaren Zwangsbedingungen, eine (auf generalisierte Koordinaten) transformierte Hamilton-Funktion zu bilden und die Bewegung des (in seinen Freiheitsgraden reduzierten) mechanischen Systems unter Annahme der transformierten Hamilton-Funktion zu betrachten.

³² Die generalisierten Impulse transformieren sich (bei vorgegebener Orts-Transformation) auf diese Weise: d.h. $q := G(Q) \Rightarrow p := G'(Q) \cdot (G'^T(Q) \cdot G'(Q))^{-1} \cdot P = G'(Q)^{-T} \cdot P$.

³³ Die transformierte Hamilton-Funktion ${}_{trans}H(Q, P)$ behält i.a. nicht die Eigenschaft der additiven Zerlegbarkeit (außer bei linearem $T(Q)$), die Reflektions-Symmetrie bleibt jedoch immer erhalten.

9) Zwei Körper in einem T-Rohr als Beispiel
eines mechanischen Systems mit global auflösbaren Zwangsbedingungen

Mit den zwei Einheitsvektoren der Ebene

$$e_1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, e_2 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und den ebenen Orten und Impulsen

$$q_i \in \mathbb{R}^2, p_i \in \mathbb{R}^2 \quad (i = 1, 2)$$

beschreibt die Hamilton-Funktion

$$H(q_1; q_2; p_1; p_2) := \frac{p_1^T \cdot p_1}{2m_1} + \frac{p_2^T \cdot p_2}{2m_2} - \frac{\varepsilon}{\|q_1 - q_2\|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left(\frac{1}{1 - (e_1^T \cdot q_i)^2} + \frac{1}{1 - (e_2^T \cdot (q_i - e_2 \cdot 1.1))^2} \right)$$

ein mechanisches 2-Körper System mit einer Gravitationskraft zwischen den Körpern und einer durch die Geometrie bedingten Kraft, die verhindert, dass die Körper den Rand des Rechtecks $[-1, 1] \times [0.1, 2.1]$ überwinden können.

Dazu kommen die Zwangsbedingungen

$$g(q_1; q_2) := \begin{pmatrix} e_2^T \cdot q_1 \\ e_1^T \cdot q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Sie beschränken die Bewegung von m_1 auf die x-Achse und die Bewegung von m_2 auf die y-Achse innerhalb des Rechtecks.

Da der Rand des Rechtecks nicht überwunden werden kann – es findet dort weiche Impuls-Umkehr statt –, ist die Bewegung der Masse m_1 auf die x-Achse zwischen -1 und $+1$ beschränkt und die Bewegung der Masse m_2 auf die y-Achse zwischen 0.1 und 2.1 .

Zwischen den Massen m_1 und m_2 herrscht ein abstandsbedingtes Newton-Potential (d.h. eine Paar-Kraft des Betrages $1/\text{Abstand}^2$, von der allerdings nur, durch die Geometrie bedingt, für m_1 der Anteil in Richtung x-Achse, für m_2 der Anteil in Richtung y-Achse wirksam werden kann). Durch die Zwangsbedingungen wird sichergestellt, dass (auch bei anziehender Kraft) die Körper nicht kollidieren.

Die Kraft ist bei $\varepsilon = +1$ anziehend, bei $\varepsilon = -1$ abstoßend.

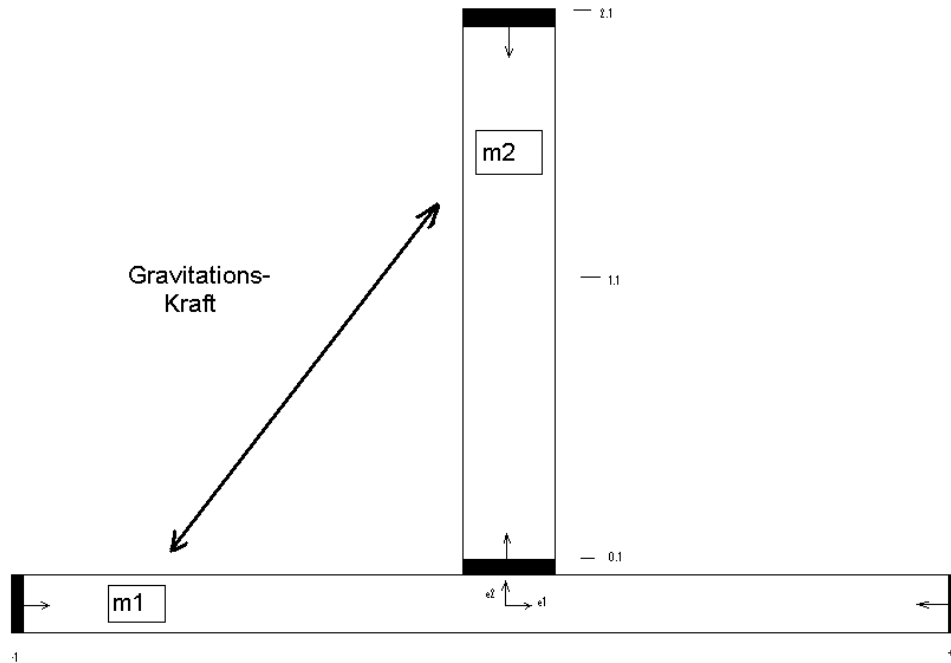


Abbildung 1.3 : Die T-Rohr-Anordnung.

(..\EigeneDateien\EigeneBilder\TRohr.GIF)

(Die Breite der Körper wird hier als vernachlässigbar angesehen.)

Das Hamilton-Dgl-System (unter Zwangsbedingungen) für die 4 Größen

$q_i(t) \in \mathbb{R}^2, p_i(t) \in \mathbb{R}^2$ ($i=1,2$) lautet :

$$\dot{q}_1(t) = p_1(t) \cdot \frac{1}{m_1}$$

$$\dot{q}_2(t) = p_2(t) \cdot \frac{1}{m_2}$$

$$\dot{p}_1(t) = (q_1(t) - q_2(t)) \cdot \frac{-\varepsilon}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} - e_1 \cdot \frac{e_1^T \cdot q_1(t)}{(1 - (e_1^T \cdot q_1(t))^2)^2} - e_2 \cdot \frac{e_2^T \cdot (q_1(t) - e_2 \cdot 1.1)}{(1 - (e_2^T \cdot (q_1(t) - e_2 \cdot 1.1))^2)^2} - e_2 \cdot \lambda_1$$

$$\dot{p}_2(t) = (q_2(t) - q_1(t)) \cdot \frac{-\varepsilon}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} - e_1 \cdot \frac{e_1^T \cdot q_2(t)}{(1 - (e_1^T \cdot q_2(t))^2)^2} - e_2 \cdot \frac{e_2^T \cdot (q_2(t) - e_2 \cdot 1.1)}{(1 - (e_2^T \cdot (q_2(t) - e_2 \cdot 1.1))^2)^2} - e_1 \cdot \lambda_2$$

mit den Zwangsbedingungen

$$e_2^T \cdot q_1(t) = 0$$

$$e_1^T \cdot q_2(t) = 0$$

Mit der Wahl³⁴ von

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} (q, p) := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \cdot (q_1 - q_2) \cdot \frac{-\varepsilon}{\|q_1 - q_2\|^3} - \begin{pmatrix} \frac{e_2^T \cdot (q_1(t) - e_2 \cdot 1.1)}{(1 - (e_2^T \cdot (q_1(t) - e_2 \cdot 1.1))^2)^2} \\ \frac{e_1^T \cdot q_2(t)}{(1 - (e_1^T \cdot q_2(t))^2)^2} \end{pmatrix}$$

³⁴ Berechnet nach Formel 3) auf Seite 22.

entsteht ein (von Zwangsbedingungen befreites) Dgl-System :

$$\begin{aligned}\dot{q}_1(t) &= p_1(t) \cdot \frac{1}{m_1} \\ \dot{q}_2(t) &= p_2(t) \cdot \frac{1}{m_2} \\ \dot{p}_1(t) &= e_1 \cdot e_1^T \cdot ((q_1(t) - q_2(t)) \cdot \frac{-\varepsilon}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} - \frac{q_1(t)}{(1 - (e_1^T \cdot q_1(t))^2)^2}) \\ \dot{p}_2(t) &= e_2 \cdot e_2^T \cdot ((q_2(t) - q_1(t)) \cdot \frac{-\varepsilon}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} - \frac{(q_2(t) - e_2 \cdot 1.1)}{(1 - (e_2^T \cdot (q_2(t) - e_2 \cdot 1.1))^2)})\end{aligned}$$

Die globale Parametrisierung $G: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^4$ der Form :

$$G(Q_1; Q_2) := \begin{pmatrix} e_1 \cdot Q_1 \\ e_2 \cdot Q_2 \end{pmatrix}, \quad (Q_1; Q_2) \in \mathbb{R}^{2 \cdot 2}$$

(mit

$$g(G(Q_1; Q_2)) = \begin{pmatrix} e_2^T \cdot e_1 \cdot Q_1 \\ e_2^T \cdot e_2 \cdot Q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

erlaubt die transformierte Hamilton-Funktion³⁵

$${}_{trans}H(Q_1; Q_2; P_1; P_2) = \frac{P_1^2}{2 \cdot m_1} + \frac{P_2^2}{2 \cdot m_2} - \frac{\varepsilon}{\|e_1 \cdot Q_1 - e_2 \cdot Q_2\|} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1 - Q_1^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1 - (Q_2 - 1.1)^2}$$

herzustellen und daraus das Hamilton-Dgl-System für die 4 skalaren Größen

$Q_i(t) \in \mathbb{R}^1, P_i(t) \in \mathbb{R}^1$ ($i=1,2$) abzuleiten :

$$\begin{aligned}\dot{Q}_1(t) &= P_1(t) \cdot \frac{1}{m_1} \\ \dot{Q}_2(t) &= P_2(t) \cdot \frac{1}{m_2} \\ \dot{P}_1(t) &= -\frac{\varepsilon \cdot Q_1(t)}{(Q_1^2(t) + Q_2^2(t))^{3/2}} - \frac{Q_1(t)}{(1 - Q_1^2(t))^2} \\ \dot{P}_2(t) &= -\frac{\varepsilon \cdot Q_2(t)}{(Q_1^2(t) + Q_2^2(t))^{3/2}} - \frac{Q_2(t) - 1.1}{(1 - (Q_2(t) - 1.1)^2)^2}\end{aligned}$$

Die hier auftretenden wirksamen Kräfte entsprechen der Anschauung :

Von der gesamten Gravitations-Kraft (mit der Größe $1/\text{Abstand}^2$ längs der Verbindungslinie der Massen wirkend) wird bei der einzelnen Masse nur der Anteil wirksam, der in Richtung ihrer durch die Geometrie bedingten Bewegungsmöglichkeit (also in Richtung x-Achse bzw. y-Achse) zeigt.

³⁵ Die Auswertung von $p := G'(Q) \cdot (G'^T(Q) \cdot G'(Q))^{-1} \cdot P$ ergibt die Impulstransformation $p = P$.

Die additive Zerlegbarkeit von $H(q; p)$ bleibt (bei der hier verwendeten) linearen Transformation

G auch für ${}_{trans}H(Q; P)$ erhalten.

Von den Kräften, die eine Bewegungsbegrenzung auf das Rechteck bewirken, bleibt für die Masse m_1 bzw. m_2 nur der Anteil wirksam, der sie auf das Intervall $[-1,1]$ bzw. $[0,1,2,1]$ beschränkt.

Kapitel 2

Numerische Methoden für Hamilton-Systeme

Überblick

Numerische Methoden für Hamilton-Systeme

Ausgang :
Euler-Verfahren



$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_n \\ -V'^T(q_n) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

EulerA-Verfahren
EulerB-Verfahren



$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_n \\ -V'^T(q_{n+1}) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

bzw.

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_{n+1} \\ -V'^T(q_n) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

EulerA°EulerB=: StV
Störmer-Verlet-Verfahren



$$p_{\text{hilf}} := p_n - V'^T(q_n) \cdot \Delta t / 2$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} q_n + M^{-1} \cdot p_{\text{hilf}} \cdot \Delta t \\ p_{\text{hilf}} - V'^T(q_{n+1}) \cdot \Delta t / 2 \end{pmatrix}$$

Ziel :

StV4 -Verfahren



Vgl. Nachtrag S.53

Ein Δt -Schritt
besteht
aus drei StV -
Schritten mit je
passenden
Schrittweiten
(vgl. S.54)

Numerische Methoden für Hamilton-Systeme

Aufbau

Vorbemerkungen

- 1) Das Euler-Verfahren, Eigenschaften
- 2) a) Auswirkungen der Symplektizität eines numerischen Verfahrens
b) Auswirkungen der Zeit-Reversibilität eines numerischen Verfahrens
c) Auswirkung der Symplektizität und der Zeit-Reversibilität auf die Energie
- 3) Das EulerA- und EulerB-Verfahren, Eigenschaften, Verknüpfung
- 4) Das Störmer-Verlet-Verfahren als Verknüpfung EulerA°EulerB, Eigenschaften
- 5) Symmetrische Dreifach-Verknüpfung von Störmer-Verlet-Schritten zur Erzeugung eines Verfahrens vierter Ordnung, Eigenschaften
- 6) Zusammenfassende Übersicht der vorgestellten Verfahren mit ihren wesentlichen Eigenschaften

Ziel :

Ein explizites, symplektisches, zeitreversibles numerisches Verfahren 4. Ordnung

Hamilton-Dgl-Systeme können analytisch nur für einige Spezialfälle gelöst werden (u.z. für $\varphi(r) := r^{0,1,2}$ d.h. freie (kraftlose) Bewegung, freier Fall (Bewegung im konstanten Kraftfeld), Kette harmonischer Oszillatoren). Die restlichen Bewegungsgleichungen können nur durch numerische Verfahren (approximativ) gelöst werden.

Für das numerische (näherungsweise) Lösen von Dgln hat das Runge-Kutta-Verfahren (4. Ordnung) eine gewisse Bedeutung und Verbreitung. Allerdings ist die Methode nicht symplektisch (im Sinne von langzeitstabil) und auch nicht - hinsichtlich einer Anwendung des Rücklaufens - zeitreversibel.

Es soll ein vergleichbares numerisches Verfahren 4. Ordnung angegeben werden, das beide Eigenschaften besitzt.

Mit der konkreten (bei mechanischen Systemen üblichen) kinetischen Energie

$$T(p_1; \dots; p_N) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N p_i^T \cdot p_i \cdot \frac{1}{m_i}$$

oder (in Kurzform, wenn durch

$$M := \text{diag}(m_1, \dots, m_n) \times I_d$$

eine symmetrisch, positiv definite Massen(diagonal)matrix definiert wird)

$$T(p) = \frac{1}{2} \cdot p^T \cdot M^{-1} \cdot p$$

soll im Folgenden die additiv aufgeteilte, reflektionssymmetrische Hamilton-Funktion

$$H(q; p) := \frac{1}{2} \cdot p^T \cdot M^{-1} \cdot p + V(q)$$

betrachtet werden, um für die zugehörige Hamilton-Dgl numerische Verfahren anzugeben, die den Fluss / die Lösungen möglichst gut approximieren.

Die Form der potentiellen Energie $V(q)$ wird nicht konkretisiert, da sie vom jeweilig betrachteten Mehrteilchensystem abhängt (vgl. Beispiele S.21).

Mit dieser speziellen kinetischen Energie lautet das vorgelegte Hamilton-Dgl-System

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}q(t) &= M^{-1} \cdot p(t) \\ \frac{d}{dt}p(t) &= -V'^T(q(t))\end{aligned}$$

Die numerische approximative Lösung der Anfangswertaufgabe für dieses zweigeteilte Hamilton-Dgl-Systems mit Anfangswerten

$$q(t_0) = q_0$$

$$p(t_0) = p_0$$

besteht darin, mittels einer einfachen Vorschrift zu diskreten Zeiten

$t_0, t_1 = t_0 + \Delta t, t_2 = t_1 + \Delta t, \dots$ aus dem gegebenen Anfangswert $(q_0; p_0) = (q(t_0); p(t_0))$ eine Näherung $(q_1; p_1)$ von $(q(t_1); p(t_1))$ zu berechnen, dann aus $(q_1; p_1)$ einen Wert $(q_2; p_2)$ zu berechnen als Näherung von $(q(t_2); p(t_2))$, usw.

Diese iterative Erzeugung Vorwert \rightarrow Nachwert kann mit einem Computer günstig ausgeführt werden.

Bemerkung :

Sowie der Fluss $\Phi(\Delta t; \bullet)$ der Dgl. die exakten Werte $(q(t_n); p(t_n)) = (\Phi(\Delta t; \bullet))^n(q_0; p_0)$ zu den diskreten Zeiten $t_n = n \cdot \Delta t$ durch Iteration erzeugt, so liefert die numerische Vorschrift $\Psi(\Delta t; \bullet)$ die Näherungswerte $(q_n; p_n) = (\Psi(\Delta t; \bullet))^n(q_0; p_0)$ durch wiederholte Anwendung von $\Psi(\Delta t; \bullet)$ ¹.

Generelle Bemerkung zu numerischen Verfahren :

Der (eindeutig bestimmte) Fluss einer Hamilton-Dgl zur reflektionssystemmetrischen Hamilton-Funktion besitzt immer die (in den mathematischen Grundlagen beschriebenen) Eigenschaften der Symplektizität und der Zeit-Reversibilität. Numerische Verfahren, wenn sie überhaupt als Approximation des Flusses betrachtet werden können, haben diese Eigenschaften i.a. nur näherungsweise, aber i.a. nicht exakt. Für eine stabile Verfolgung der Lösung über viele tausend Schritte erweist es sich als vorteilhaft, wenn das numerische Verfahren möglichst viele Eigenschaften des Flusses exakt² besitzt.

Die Notwendigkeit der Zeit-Reversibilität des numerischen Verfahrens zum Erreichen der Rücklauf-Eigenschaft wurde schon erwähnt; für den praktischen Nutzen der Symplektizität des numerischen Verfahrens s. Abb. 2.2, 2.3 S.38.

In diesem Sinne ist es notwendig, bekannte numerische Verfahren auf diese Eigenschaften hin zu überprüfen und diese entsprechend zu verändern.

¹ War eine Flussabbildung $\Phi(t; \bullet)$ eine mehr oder weniger abstrakte Definition, so ist im Gegensatz dazu ihre numerische Approximation $\Psi(\Delta t; \bullet)$ eine Abbildung mit konkreten Zahlenwerten.

² Exakt im mathematischen Sinn; bei der praktischen Ausführung der Verfahren auf Computern heißt das : bis auf Maschinen-Genauigkeit.

1) Das Euler-Verfahren, Eigenschaften

Eine einfache numerische Vorschrift ist das Euler-Verfahren :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{Euler}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_n \\ -V'^T(q_n) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \quad n=0,1,\dots \quad (\underline{\text{Euler}})$$

Dieses Verfahren ist explizit (d.h. es benötigt zur Bestimmung Vorwert \rightarrow Nachwert keine numerische Lösung eines Gleichungssystems), nicht symplektisch, schwach zeitreversibel, aber nicht zeitsymmetrisch und deshalb (vgl. Satz S.15) nicht zeitreversibel und hat die Ordnung 1.

a) Nicht-Symplektizität des Euler-Verfahrens :

$$\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

hat als 1. Variation

$$(\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p))' = \begin{pmatrix} I & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(q) \cdot \Delta t & I \end{pmatrix},$$

also

$$\begin{aligned} & (\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p))'^T \cdot J \cdot (\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p))' = \\ & = \begin{pmatrix} I & -V'^T(q) \cdot \Delta t \\ M^{-1} \cdot \Delta t & I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(q) \cdot \Delta t & I \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(q) \cdot \Delta t & I + V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 \\ -M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 - I & -M^{-1} \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ & = J + \begin{pmatrix} 0 & (M^{-1} \cdot V'^T(q))^T \\ -M^{-1} \cdot V'^T(q) & 0 \end{pmatrix} \cdot \Delta t^2 \neq J \end{aligned}$$

(unter Beachtung der Symmetrie von : $V'^T(q) = V'^T(q)$).

b) Schwache Zeit-Reversibilität des Euler-Verfahrens :

Für das Euler-Verfahren

$$\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

gilt dann :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{Euler}(-\Delta t; S \cdot (q; p)) &= S \cdot \Psi_H^{Euler}(-\Delta t; q; -p) = S \cdot \left(\begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (-p) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) \right) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + S \cdot \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p) \end{aligned}$$

d.h.

das Euler-Verfahren ist schwach zeitreversibel bei dem vorgelegten Dgl-System.

c) Das Euler-Verfahren ist nicht zeitsymmetrisch :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{Euler}(-\Delta t; \Psi_H^{Euler}(+\Delta t; q; p)) &= \Psi_H^{Euler}\left(-\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t \\ V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) - V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

d) Als Folgerung (nach Satz S.15) :

Das Euler-Verfahren ist (wegen mangelnder Zeit-Symmetrie) auch nicht zeitreversibel.

Oder explizit gerechnet :

Das Euler-Verfahren ist nicht zeitreversibel :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{Euler}(\Delta t; S \cdot \Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p)) &= \\ &= S \cdot \Psi_H^{Euler}\left(\Delta t; \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= S \cdot \Psi_H^{Euler}\left(\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (-p + V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 \\ -p + (V'^T(q) - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t)) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t \\ V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) - V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e) Approximationsordnung des Euler-Verfahrens hinsichtlich des lokalen Fehlers

$$lokF_{Euler}(\Delta t, q, p) := \Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p) - \Phi_H(\Delta t; q; p) :$$

Bezeichnet

$$\Phi_H(\Delta t; q; p) \text{ die exakte Lösung der AWA } \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p(t) \\ -V'^T(q(t)) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

und ist

$$\Psi_H^{Euler}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

das Euler-Verfahren, so hat der lokale Fehler als Funktion von Δt (q, p sind fest) die Form :

$$lokF_{Euler}(\Delta t) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t - \Phi_H(\Delta t; q; p).$$

Die Auswertung der Taylorentwicklung des lokalen Fehlers nach Δt -Potenzen an der Stelle $\Delta t = 0$

$$\text{lok}F_{\text{Euler}}(\Delta t) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\text{lok}F_{\text{Euler}}(\Delta t))^{(n)}|_{\Delta t=0} \cdot \Delta t^n$$

ergibt :

$$\text{lok}F_{\text{Euler}}(\Delta t)|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{lok}F_{\text{Euler}}(\Delta t))'|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

d.h. der lokale Fehler des Euler-Verfahrens ist

$$\|\text{lok}F_{\text{Euler}}(\Delta t)\| = O(\Delta t^2),$$

so dass das Euler-Verfahren die Ordnung 1 hat.

Damit besitzt das Euler-Verfahren $\Psi_H^{\text{Euler}}(\Delta t; \bullet)$ nicht die (für die Langzeit-Approximation wesentliche) Symplektizität) und auch nicht die (für die Rückrechenbarkeit bei weiterer Vorwärtsrechnung wesentliche) Zeit-Reversibilität.

Wunschzettel :

Es wäre wünschenswert, wenn ein numerisches Verfahren $\Psi_H(\Delta t; \bullet)$ (mit der Schrittweite Δt) möglichst viele Eigenschaften der Flussabbildung $\Phi_H(\Delta t; \bullet)$ (zur Zeit Δt) hätte, nämlich Symplektizität (und damit eine günstige Langzeit-Approximation des Flusses) und Zeit-Reversibilität (Möglichkeit des Rücklaufs bei Vorwärtsrechnung).

2a) Auswirkungen der Symplektizität eines numerischen Verfahrens

Ein Ergebnis aus der Theorie :

Betrachtet wird ein numerisches Einschritt-Verfahren $\Psi_H(\Delta t; q; p)$ der Ordnung r , angewendet auf eine (von einer Hamilton-Funktion $H(q; p)$) erzeugte Hamilton-Dgl. Für den lokalen Approximationsfehler (als Differenz zwischen $\Psi_H(\Delta t; q; p)$ und dem (exakten) Fluss $\Phi_H(\Delta t; q; p)$) gilt also

$$\|\Psi_H(\Delta t; q; p) - \Phi_H(\Delta t; q; p)\| = O(\Delta t^{r+1}).$$

Dann folgt (als Ergebnis der "Forward Error Analysis") für den (bei Iteration entstehenden) globalen Fehler eines üblichem (nicht symplektischen numerischen) Verfahrens :

$$\|\Psi_H^n(\Delta t; q; p) - \Phi_H(n \cdot \Delta t; q; p)\| \leq K \cdot (e^{n \cdot \Delta t \cdot L} - 1) \cdot \Delta t^r$$

mit gewissen Konstanten K, L (exponentielles Auseinanderlaufen von numerisch errechneten Phasenraumpunkten und der Dgl-Lösung).

Wegen des Faktors $K \cdot e^{n \cdot \Delta t \cdot L}$ kann eine günstige Approximation nur für (relativ kurze) Zeiten $T = n \cdot \Delta t$ garantiert werden.

Eine Erhöhung der Approximationsordnung r ändert daran nur wenig [LR,2005 S.17,21].

Ist das numerische Verfahren $\Psi_H(\Delta t; q; p)$ der Ordnung r zusätzlich symplektisch, so gilt (als Ergebnis der "Backward Error Analysis") [LR,2005 S.114-124], insbesondere [HL,1997], [HLW,2002], [McQ,2006] und [BCM,2008] :

a) Das numerische symplektische Verfahren $\Psi_H(\Delta t; q; p)$ der Ordnung r lässt sich durch den (symplektischen) Fluss $\Phi_{\bar{H}}(\Delta t; q; p)$ einer Hamilton-Dgl, erzeugt von einer modifizierten benachbarten Hamilton-Funktion der Form

$$\bar{H}(\Delta t; q; p) := H(q; p) + \Delta t^r \cdot H_{r+1}(q; p) + \dots + \Delta t^{N-1} \cdot H_N(q; p),$$

"exponentiell klein" approximieren, d.h. es gilt eine Abschätzung³

$$\|\Psi_H(\Delta t; q; p) - \Phi_{\bar{H}}(\Delta t; q; p)\| \leq c \cdot \Delta t \cdot e^{\frac{-\gamma}{\Delta t}}$$

Daraus ergibt sich (bei Iteration) die Fehlerabschätzung

$$\|\Psi_H^n(\Delta t; q; p) - \Phi_{\bar{H}}(n \cdot \Delta t; q; p)\| \leq K \cdot (e^{n \cdot \Delta t \cdot L} - 1) \cdot e^{\frac{-\gamma}{\Delta t}}$$

(mit gewissen Konstanten c, K, L, γ).

D.h. Für lange Zeiten $T = n \cdot \Delta t$ mit $T \leq \frac{\gamma}{\Delta t \cdot L}$ – der Ausdruck $\frac{\gamma}{\Delta t \cdot L}$ ist groß, da Δt im Nenner steht – folgt das numerische Verfahren (fast) der Projektion einer Höhenlinie einer benachbarten Hamilton-Funktion $\bar{H}(\Delta t; q; p)$ (vgl. Abbildung 2.1, S.37).

b) Die Beziehung zwischen Ausgangs-Hamilton-Funktion $H(q; p)$ und der modifizierten Hamilton-Funktion $\bar{H}(\Delta t; q; p)$

$$\|H(q; p) - \bar{H}(\Delta t; q; p)\| = O(\Delta t^r)$$

bedeutet nach der Störungstheorie für (fast-)integrable Hamilton-Dgln, dass auch die entsprechenden Flüsse $\Phi_H(t; q; p)$ und $\Phi_{\bar{H}}(t; q; p)$ für lange Zeiten benachbart bleiben [LR,2005 S.123] und [HLW,2002].

c) Damit ergibt sich (bei (fast-)integrablen Hamilton-Dgln) ein günstiges Fehlerverhalten des numerischen symplektischen Verfahrens $\Psi_H(\Delta t; q; p)$ in Bezug auf den Fluss $\Phi_H(t; q; p)$ in der Form

$$\|\Psi_H^n(\Delta t; q; p) - \Phi_H(n \cdot \Delta t; q; p)\| \sim K \cdot (e^{n \cdot \Delta t \cdot L} - 1) \cdot e^{\frac{-\gamma}{\Delta t}},$$

welches für obige Zeiten T gültig bleibt.

Die Eigenschaft der Symplektizität eines numerischen Verfahrens garantiert also, dass die numerisch erzeugten Phasenraumpunkte der exakten Phasenraumkurve lange gut folgen, indem beide längs der Projektion von Höhenlinien benachbarter Hamilton-Funktionen fortschreiten⁴. (Günstige Langzeit-Approximation der Phasenraumkurve bei Wahl eines symplektischen numerischen Verfahrens.)

³ Wegen der Divergenz der $\bar{H}(\Delta t; q; p)$ definierenden Reihe kann nicht mit einem Grenzwert argumentiert werden.

⁴ Die Phasenraumpunkte schreiten ungefähr längs der Projektion der \bar{H} -Höhenlinien voran, die wahre Phasenraumkurve schreitet exakt längs der Projektion der H -Höhenlinien voran.

Anschauung :

(Konkrete Auswirkung der Wahl eines symplektischen numerischen Verfahrens für die Langzeit-Approximation)

Allgemein :

Zur Existenz einer benachbarten Hamilton-Funktion :

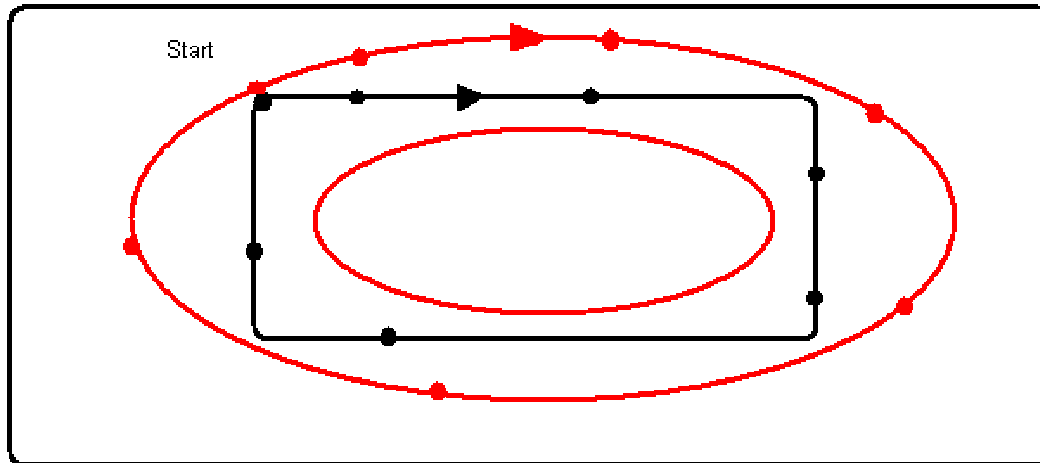


Abbildung 2.1 : Höhenlinien benachbarter Hamilton-Funktionen.

(..\Eig.Bilder\Höhenlinien.GIF)

Projektion der Höhenlinien einer Hamilton-Funktion $H(q; p) = const$, denen die Lösung exakt folgt (rot) und

Projektion der Höhenlinien einer $O(\Delta t^r)$ -benachbarten Hamilton-Funktion

$\bar{H}(\Delta t; q; p) = const$, denen die Werte des numerischen symplektischen Verfahrens (lange ungefähr) folgen (schwarz).

Ein konkretes Beispiel : Der Lennard-Jones-Oszillator

Vergleich der konkreten Werte eines nicht-symplektischen numerischen Verfahrens mit den Werten eines symplektischen numerischen Verfahrens bei der Berechnung eines Umlaufs (Hin- und Herbewegung), wenn zwischen dem festen Ursprung und einem sich auf einer Geraden bewegenden Punkt die Paar-Kraft aus einem Lennard-Jones-Potential wirkt :

a) NICHT-SYMPLEKTISCHES Euler-Verfahren :

Bewegung im Lennard-Jones Potential 2.325 sec
 Euler-Verfahren mit Schrittweite 0.001
 o(rot) Anfang, o(grün) Ende

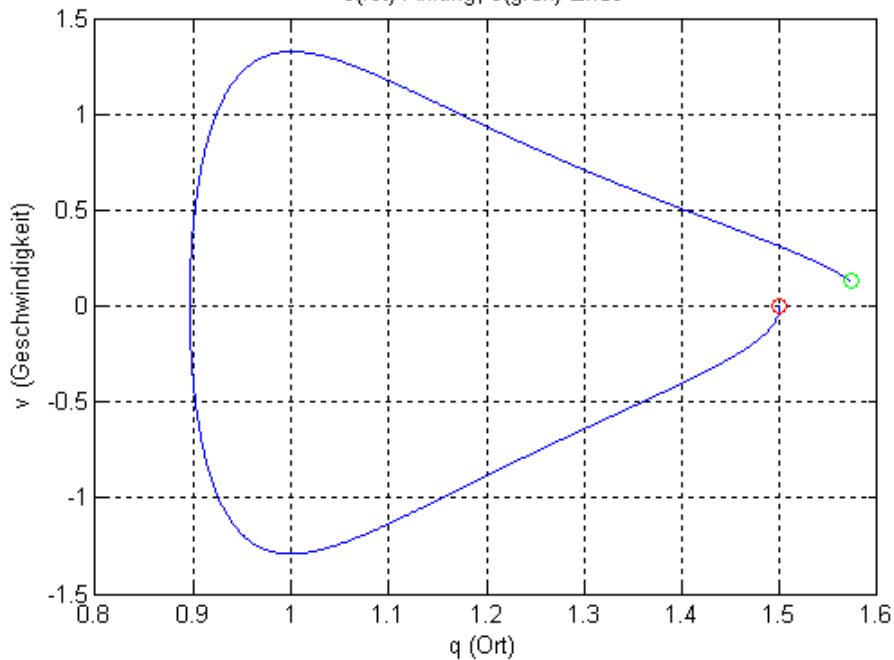


Abbildung 2.2 : Umlauf bei nicht-symplektischem Euler-Verfahren.

(work1body\EulerLJ.bmp)

b) SYMPLEKTISCHES EulerA-Verfahren :

Bewegung im Lennard-Jones Potential 2.33 sec
 symplektisches EulerA-Verfahren mit Schw. 0.01
 o(rot) Anfang, o(grün) Ende

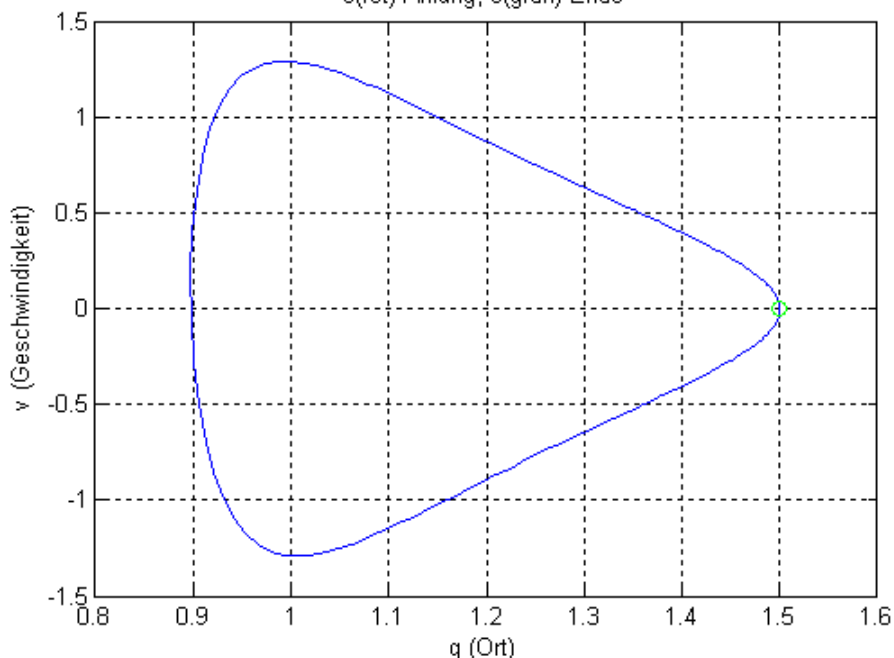


Abbildung 2.3 : Umlauf bei symplektischem EulerA-Verfahren.

(work1body\EulerALJ.bmp)

Beachte: Die qualitativ bessere numerische Approximation mit einem symplektischen Verfahren (trotz 10-fach größerer Schrittweite 0.01 in b) statt 0.001 in a)). Auch bei längeren Zeiten verlässt b) nicht seine Lösungskurve, während a) spiralförmig auseinanderläuft.

2b) Auswirkungen der Zeit-Reversibilität eines numerischen Verfahrens

Das EulerA-Verfahren (s.u.) erweist sich zwar als symplektisch (d.h. die von ihm produzierten Werte verbleiben nahe der physikalischen Bewegung = Lösung der Hamilton-Dgl), aber dieses Verfahren ist nicht exakt zeitreversibel : Es kehrt nach Impuls-Umkehr und Weiter-Rechnung nicht wieder exakt in den Anfangszustand (mit negativ genommenem Impuls) zurück.

Beispiel :

Die Bewegung des Lennard-Jones-Oszillators, beginnend bei $(q_0 = 1.5; p_0 = 0)$ und berechnet nach dem EulerA-Verfahren, wird nach 100 Schritten gestoppt. Dann wird die Bewegung mit negativem (erreichten) Impuls weitere 100 Schritte nach dem EulerA-Verfahren fortgesetzt :

Es wird $(q = 1.3356; p = -0.3426)$ erreicht, aber nicht $(q_0 = 1.5; p_0 = -0)$

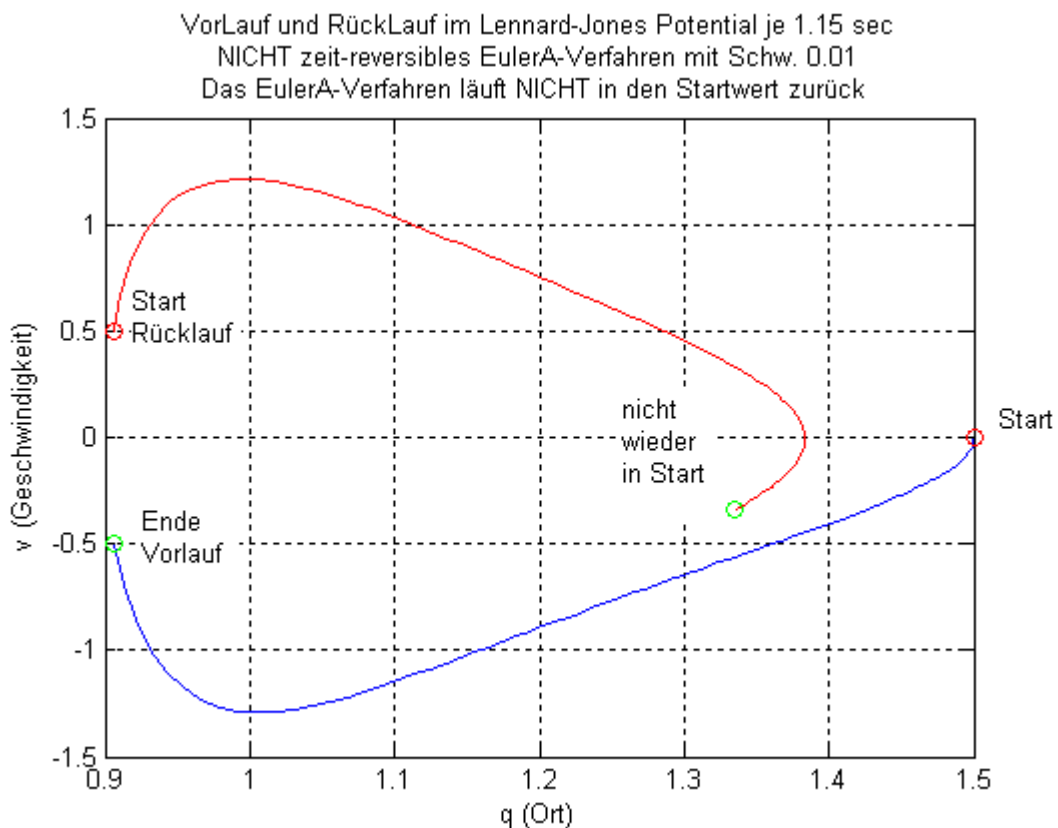


Abbildung 2.4 : Rücklauf bei nicht zeitreversiblem EulerA-Verfahren.
 (work1body\EulerALJZeitRev.bmp)

Als ein Vergleich das zeitreversible *StV4*-Verfahren (mit exakter⁵ Rückkehr)

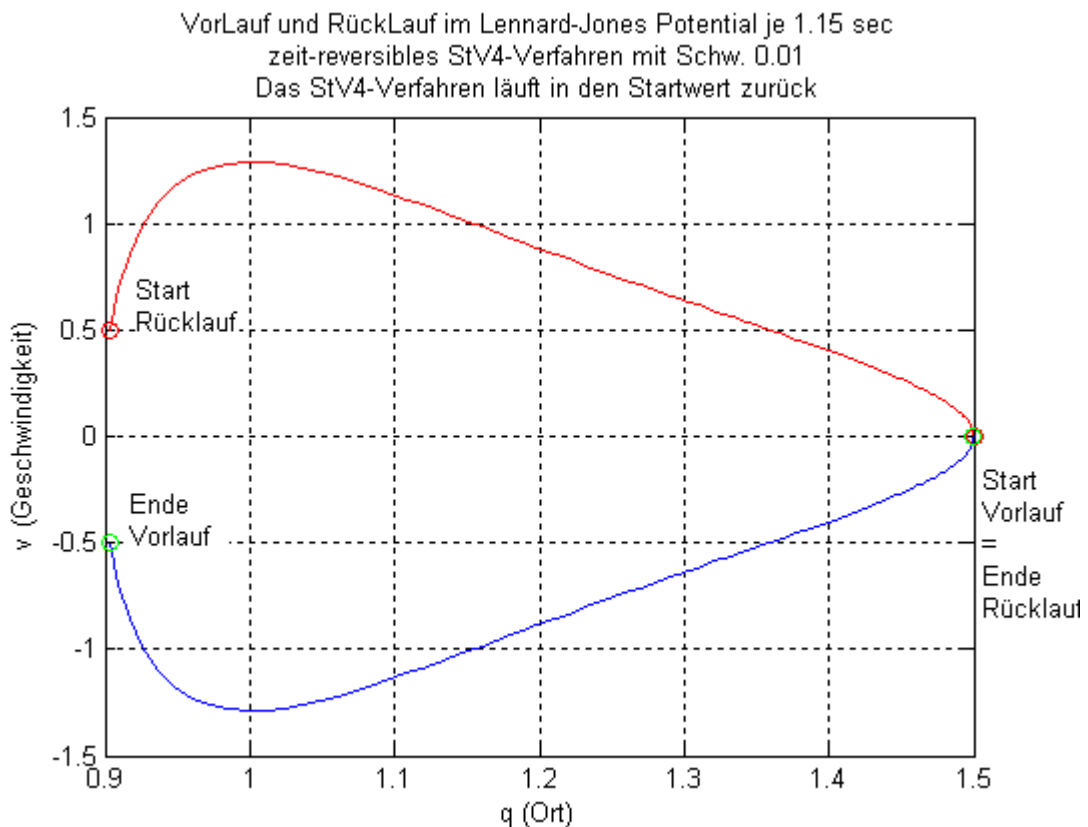


Abbildung 2.5 : Rücklauf bei zeitreversiblen *StV4*-Verfahren.

(work1body\StV4LJZeitRev.bmp)

Bemerkung :

Symplektizität und Zeit-Reversibilität sind zwei verschiedene Eigenschaften, die ein numerisches Verfahren je einzeln haben oder nicht haben kann. Gesucht ist natürlich ein numerisches Verfahren, welches beide Eigenschaften besitzt, wie z.B. die Verknüpfung von EulerA°EulerB-Verfahren (= Störmer -Verlet-Verfahren), s. S.51 oder noch besser (wegen der höheren Approximationsordnung) das *StV4*-Verfahren, s. S.54.

⁵ bis auf Maschinen-Genauigkeit.

2c) Auswirkungen von Symplektizität und Zeit-Reversibilität auf den Energie-Verlauf

Obwohl kein numerisches Verfahren die exakte zeitunabhängige Konstanz der Hamilton-Funktion (Erhalt der Gesamtenergie) liefern kann⁶, so zeigen sich doch beachtliche Unterschiede bezüglich numerischer Verfahren (ohne und mit diesen Eigenschaften) hinsichtlich der Approximationsgüte des zeitlichen Verlaufes der Hamilton-Funktion (Gesamtenergie).

Beispiel :

Für den zeitlichen Verlauf der Hamilton-Funktion (Gesamtenergie) des Lennard-Jones-Oszillators

$$H(q(t), p(t)) = \frac{1}{2} p^2(t) + \left(\frac{1}{q(t)^{12}} - \frac{2}{q(t)^6} \right)$$

längs der exakten Trajektorie mit Startwerten $q(0) = 1.5$, $p(0) = 0$, gilt

$$H(q(t), p(t)) \equiv \text{const}(t) = -0.167875643 .$$

Der zeitliche Energie-Verlauf auf der (geschlossenen) Trajektorie während eines Umlaufes, berechnet nach dem bekannten Runge-Kutta-Verfahren (4.Ordnung), ist

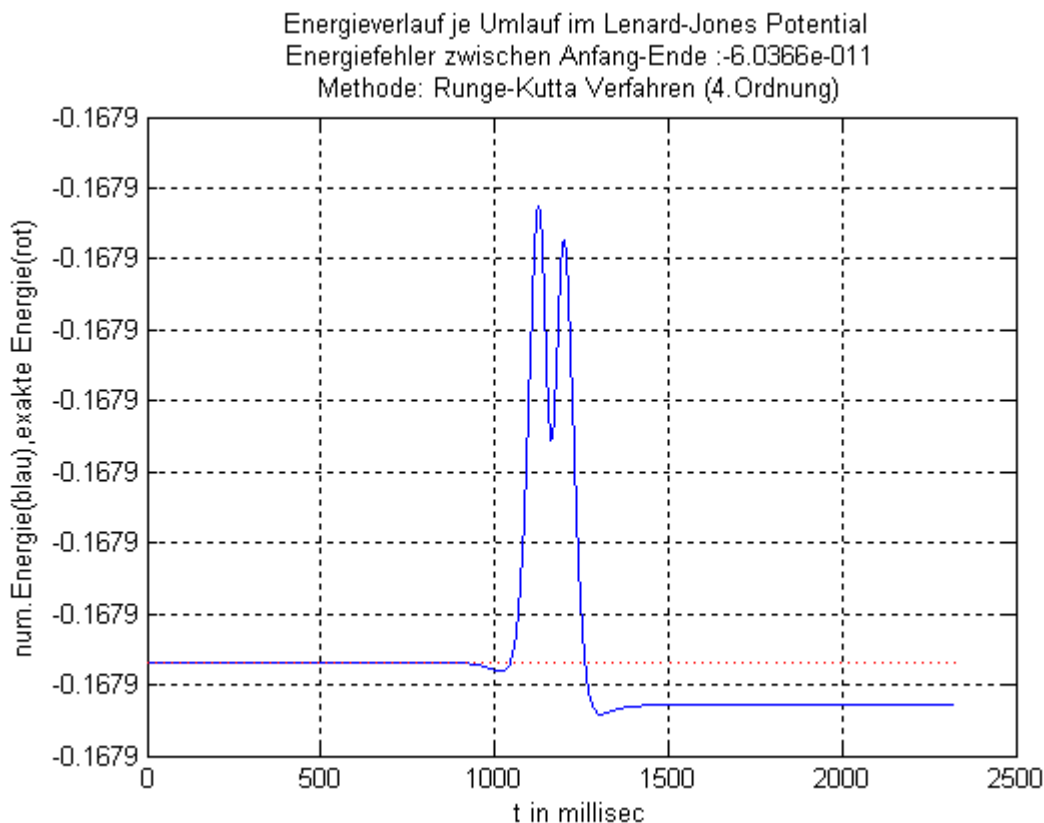


Abbildung 2.6 : Energieverhalten bei nicht-symplektischem Runge-Kutta-Verfahren. ([work1bodyrk4energie.bmp](#))

Nach der Abweichung der numerisch berechneten Energie (blau) vom Sollwert (rot) kehrt diese nicht mehr (exakt) zum Sollwert zurück.

⁶ Die Hamilton-Funktion ist exakt zeit-konstant nur auf den exakten Trajektorien (den exakten Lösungen der zugehörigen Hamilton-Dgl), nicht aber auf numerischen Näherungen. Aber auch hier liefert die Theorie ein ähnlich günstiges Langzeit-Verhalten bei Anwendung eines symplektischen numerischen Verfahrens [LR,2005 S.121] und [HL,1997].

Als Vergleich dazu : zeitlicher Energie-Verlauf während eines Umlaufes, berechnet nach dem symplektischen und zeitreversiblen Störmer-Verlet-Verfahren (2.Ordnung)

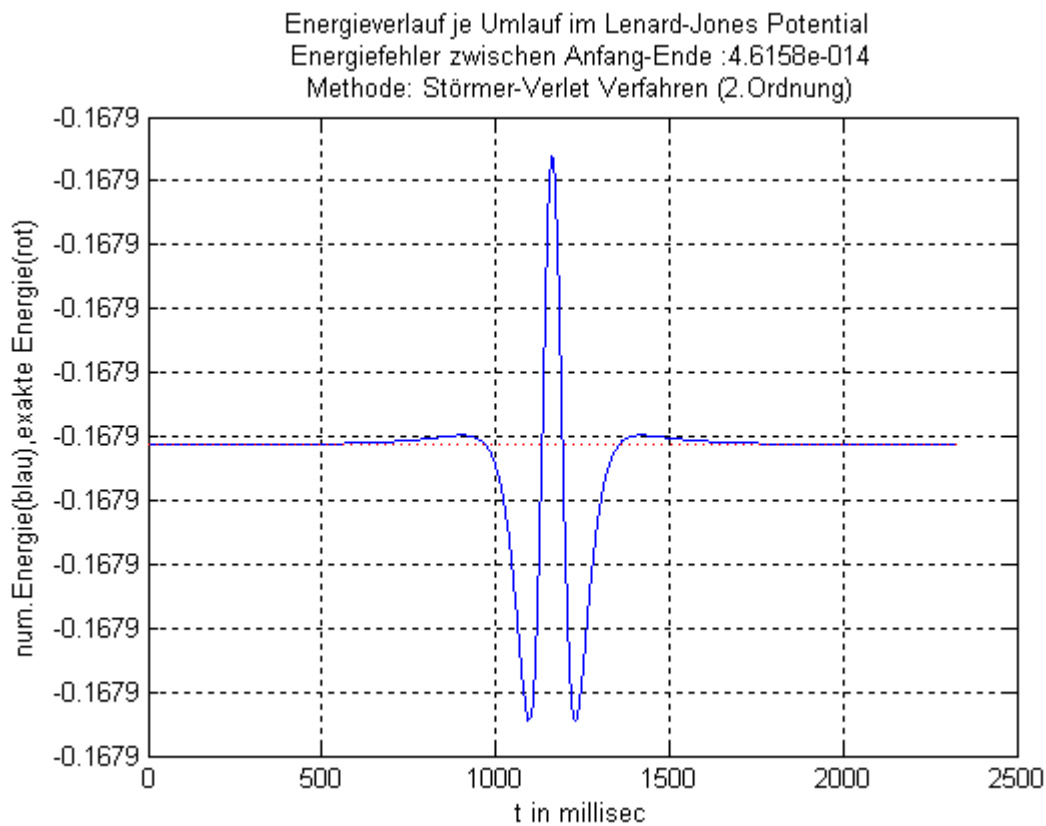


Abbildung 2.7 : Energie-Verhalten bei symplektischem und zeitrev. StV-Verfahren.
(work\1body\StVenergie.bmp)

Der Fehler ist jetzt nur noch 1/1000-tel gegenüber dem Runge-Kutta-Verfahren, (obwohl das Störmer-Verlet-Verfahren nur von 2. Ordnung ist) und die Energie kehrt nach Abweichung zum Sollwert (fast) zurück.

Bemerkung : Wird das *StV4*-Verfahren gewählt, welches wie das Runge-Kutta-Verfahren auch 4. Ordnung ist, so beträgt der Fehler nur noch $-3.747e-015$, d.h. Maschinen-Genauigkeit!

3) Das EulerA- und EulerB-Verfahren, Eigenschaften, Verknüpfung beider VerfahrenEulerA-Verfahren

Betrachte das asymmetrische EulerA-Verfahren :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_n \\ -V'^T(q_n + M^{-1} \cdot p_n \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \quad n = 0, 1, \dots$$

oder in der bei Iteration verwendeten Form

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_n \\ -V'^T(q_{n+1}) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \quad n = 0, 1, \dots \quad \text{(EulerA)}$$

(Zur Bestimmung von p_{n+1} wird also in $-V'^T(q_{n+1}) = -V'^T(q_n + M^{-1} \cdot p_n \cdot \Delta t)$ der schon bekannte Anteil q_{n+1} des Nachwertes benutzt, d.h. $(q_n, p_n) \rightarrow (q_{n+1}, p_n) \rightarrow (q_{n+1}, p_{n+1})$.)

(Das EulerA-Verfahren gleicht einem Einzelschrittverfahren⁷, während das gewöhnliche Euler-Verfahren einem Gesamtschrittverfahren ähnelt. Das A-Verfahren ist auch einfacher zu programmieren, da Vorwert und Nachwert auf einem Speicherplatz gehalten werden können.)

Das EulerA-Verfahren ist explizit, symplektisch, schwach zeitreversibel, aber nicht zeitsymmetrisch und deshalb nicht zeitreversibel und hat die Ordnung 1.

a) Symplektizität des EulerA-Verfahrens :

$$\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

hat als 1. Variation

$$(\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q, p))' := \begin{pmatrix} I & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t & I - V'^T(\hat{q}) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 \end{pmatrix}$$

mit

$$\hat{q} := q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t .$$

Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} & (\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p))'^T \cdot J \cdot (\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p))' = \\ & = \begin{pmatrix} I & -V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t \\ M^{-1} \cdot \Delta t & I - M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t & I - V'^T(\hat{q}) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t - V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t & I - V'^T(\hat{q}) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 + V'^T(\hat{q}) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 \\ -M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t^2 - I + M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t^2 & M^{-1} \cdot (-I + V'^T(\hat{q}) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2) \cdot \Delta t + (I - M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t^2) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} = J \end{aligned}$$

(wieder unter der Beachtung der Symmetrie von $V'^T(\hat{q}) = V'^T(\hat{q})$).

b) Schwache Zeit-Reversibilität des EulerA-Verfahrens :

⁷ d.h. schon berechnete Anteile werden bei der Berechnung der restlichen Anteile benutzt. Für eine andere Deutung des EulerA-Verfahrens vgl. S.45, Punkt f).

Das EulerA-Verfahren lautet :

$$\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t .$$

Also gilt :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; S(q; p)) &= S \cdot \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; q; -p) = S \cdot \begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (-p) \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot (-p) \cdot (-\Delta t)) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + S \cdot \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p) \end{aligned}$$

d.h.

das EulerA-Verfahren ist schwach zeitreversibel bei dem vorgelegten Dgl-System.

c) Das EulerA-Verfahren ist nicht zeitsymmetrisch :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerA}(+\Delta t; q; p)) &= \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix}) = \\ &= \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t) \cdot (-\Delta t)) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ V'^T(q + M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2) - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

d) Also ist das EulerA-Verfahren (wegen mangelnder Zeit-Symmetrie) auch nicht zeitreversibel.

Oder explizit gerechnet :

Nicht zeitreversibel :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; S \cdot \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p)) &= \\ &= S \cdot \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix}) = \\ &= S \cdot \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix}) = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (-p + V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (-p + V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2 \\ -p + V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t - V'^T(q + M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ V'^T(q + M^{-1} \cdot V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \cdot \Delta t^2) - V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e) Approximationsordnung des EulerA-Verfahrens hinsichtlich des lokalen Fehlers

$$\text{lok}F_{\text{EulerA}}(\Delta t, q, p) := \Psi_H^{\text{EulerA}}(\Delta t; q, p) - \Phi_H(\Delta t; q; p) :$$

Ist wieder

$$\Phi_H(\Delta t; q; p) \text{ die exakte Lösung der AWA } \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p(t) \\ -V'^T(q(t)) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

und ist

$$\Psi_H^{\text{EulerA}}(\Delta t; q; p) := \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

das EulerA-Verfahren, so gilt für den lokalen Fehler als Funktion von Δt (q, p fest) :

$$\text{lok}F_{\text{EulerA}}(\Delta t) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t - \Phi_H(\Delta t; q; p) .$$

Da

$$\text{lok}F_{\text{EulerA}}(\Delta t)|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ und } (\text{lok}F_{\text{EulerA}}(\Delta t))'|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

ist der lokale Fehler für das EulerA-Verfahren

$$\| \text{lok}F_{\text{EulerA}}(\Delta t) \| = O(\Delta t^2),$$

so dass das EulerA-Verfahren die Ordnung 1 hat.

f) Die Herkunft des EulerA-Verfahrens bei additiv aufgeteilter mechanischer Hamilton-Funktion als Funktions-Verknüpfung zweier (exakter) Flüsse (Motivation vgl Kap.1.5, S.10) :

Ausgangspunkt ist eine additiv aufgeteilte mechanische Hamilton-Funktion :

$$H(q; p) = T(p) + V(q),$$

wobei $T(p) = \frac{1}{2} \cdot p^T \cdot M^{-1} \cdot p$ gilt.

Wird gesetzt

$$H_1(q; p) := T(p) \text{ und } H_2(q; p) := V(q),$$

so ergibt sich, dass die mit den additiven Anteilen H_i ($i=1,2$) definierten Hamilton-Dgl-Systeme exakt lösbar sind :

Die Hamilton-Dgl zu den Anteil $H_1(q; p) = T(p)$ lautet :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T'^T(p(t)) \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit dem (explizit angebbaren) Fluss ($p(t) = p = \text{const.}$)

$$\Phi_T(t; q; p) = \begin{pmatrix} q + T'^T(p) \cdot t \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot p \cdot t \\ p \end{pmatrix}$$

(gradlinige Bewegung bei Abwesenheit von Kräften) .

Die Hamilton-Dgl zu $H_2(q; p) = V(q)$ lautet :

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -V'^T(q(t)) \end{pmatrix}$$

mit dem (explizit angebbaren) Fluss ($q(t) = q = \text{const.}$)

$$\Phi_V(t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p - V'^T(q) \cdot t \end{pmatrix} .$$

(Grenzfall :

Bewegung bei Anwesenheit von Kraft, aber unendlich schwerer Masse $M \rightarrow \infty$) .

Eine Hintereinanderausführung der beiden Flüsse (mit $t \rightarrow \Delta t$)

$$\Psi(\Delta t; \bullet) := \Phi_V(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet)^8$$

ergibt (unter Beachtung von $T'^T(p) = M^{-1} \cdot p$)

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \xrightarrow{\Phi_T(\Delta t; \bullet)} \begin{pmatrix} q + T'^T(q) \cdot \Delta t \\ p \end{pmatrix} \xrightarrow{\Phi_V(\Delta t; \bullet)} \begin{pmatrix} q + T'^T(q) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q + T'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q + M^{-1} \cdot p \cdot \Delta t) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

Dies ist gerade das EulerA-Verfahren :

$$\Phi_V(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet) = \Psi_{T+V}^{\text{EulerA}}(\Delta t; \bullet) .$$

Man kann daher bei mechanischer Hamilton-Funktion das EulerA-Verfahren deuten als Verknüpfung von zwei exakten Flüssen von Hamilton-Teilsystemen. Auf diese Weise (exakte Flüsse sind symplektisch (vgl. S.8) und vererben diese Eigenschaft bei Verknüpfung (vgl. S.7)) ist die Symplektizität des EulerA-Verfahrens leicht erklärbar.

⁸ Es gilt natürlich nicht $\Phi_V(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet) = \Phi_{H=T+V}(\Delta t; \bullet)$ (d.h. die Verknüpfung stellt nicht den exakten Fluss der mit $H = T + V$ gebildeten Ausgangs-Dgl dar - außer in dem seltenen Fall, dass die errechneten Flüsse kommutieren : $\Phi_V(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet) = \Phi_T(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_V(\Delta t; \bullet)$) (vgl. S.10). Das so definierte $\Psi_{T+V}^{\text{EulerA}}(\Delta t; \bullet)$ ist also i.a. nur eine numerische Approximation und keine exakte Lösung der Ausgangs-Hamilton-Dgl.

EulerB-Verfahren

Ein ähnliches Verfahren ist das EulerB-Verfahren :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p_n - V'^T(q_n) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q_n) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \quad n = 0, 1, \dots$$

oder in der bei Iteration verwendeten Form

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p_{n+1} \\ -V'^T(q_n) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \quad n = 0, 1, \dots \quad (\text{EulerB})$$

(Die Reihenfolge ist hier : Zeile 2, Zeile 1 mit $(q_n, p_n) \xrightarrow{\text{Zeile 2}} (q_n, p_{n+1}) \xrightarrow{\text{Zeile 1}} (q_{n+1}, p_{n+1})$).

Das EulerB-Verfahren ist explizit, symplektisch, schwach zeitreversibel, aber nicht zeitsymmetrisch und deshalb nicht zeitreversibel und hat die Ordnung 1.

a) Symplektizität des EulerB-Verfahrens :

$$\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

hat als 1. Variation

$$(\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p))' := \begin{pmatrix} I - M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(q) \cdot \Delta t & I \end{pmatrix}.$$

Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} & (\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p))'^T \cdot J \cdot (\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p))' := \\ & = \begin{pmatrix} I - V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 & -V'^T(q) \cdot \Delta t \\ M^{-1} \cdot \Delta t & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I - M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 & M^{-1} \cdot \Delta t \\ -V'^T(q) \cdot \Delta t & I \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} (I - V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2) \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(q) \cdot \Delta t \cdot (I - M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2) & (I - V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2) + V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot \Delta t^2 \\ M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 - I - M^{-1} \cdot V'^T(q) \cdot \Delta t^2 & -M^{-1} \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} = J \end{aligned}$$

(wieder unter der Beachtung der Symmetrie von $V'^T(q) = V'^T(q)$).

b) Schwache Zeit-Reversibilität des EulerB-Verfahrens :

Das EulerB-Verfahren lautet :

$$\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

Also gilt :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; S \cdot (q; p)) &= S \cdot \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; q; -p) = S \cdot \left(\begin{pmatrix} q \\ -p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (-p - V'^T(q) \cdot (-\Delta t)) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) \right) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + S \cdot \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t = \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p) \end{aligned}$$

d.h.

das EulerB-Verfahren ist schwach zeitreversibel bei dem vorgelegten Dgl-System.

c) Das EulerB-Verfahren ist nicht zeitsymmetrisch :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerB}(+\Delta t; q; p)) &= \Psi_H^{EulerB}\left(-\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(\hat{q})) \cdot (-\Delta t) \\ -V'^T(\hat{q}) \end{pmatrix} \cdot (-\Delta t) = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t \\ V'^T(\hat{q}) - V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mit

$$\hat{q} = q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t .$$

d) Also ist das EulerB-Verfahren (wegen mangelnder Zeit-Symmetrie) auch nicht zeitreversibel.

Oder explizit gerechnet :

Nicht zeitreversibel :

$$\begin{aligned} S \cdot \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; S \cdot \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p)) &= \\ &= S \cdot \Psi_H^{EulerB}\left(\Delta t; \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= S \cdot \Psi_H^{EulerB}\left(\Delta t; \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix}\right) = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (-p + V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(\hat{q})) \cdot \Delta t \\ -p + V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= S \cdot \begin{pmatrix} q - M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t^2 \\ -p + V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -M^{-1} \cdot V'^T(\hat{q}) \cdot \Delta t \\ (V'^T(\hat{q}) - V'^T(q)) \end{pmatrix} \cdot \Delta t \neq \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

mit⁹

$$\hat{q} = q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t .$$

e) Approximationsordnung des EulerB-Verfahrens hinsichtlich des lokalen Fehlers

$$lokF_{EulerB}(\Delta t, q, p) := \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p) - \Phi_H(\Delta t; q; p) :$$

Ist

$$\Phi_H(\Delta t; q; p) \text{ die exakte Lösung der AWA } \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p(t) \\ -V'^T(q(t)) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

und ist

$$\Psi_H^{EulerB}(\Delta t; q; p) := \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q)) \cdot \Delta t \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t$$

⁹ Bei schwacher Zeit Reversibilität $S \cdot \Psi_{-\Delta t} \circ S = \Psi_{\Delta t}$ gilt :

$$\Psi_{-\Delta t} \circ \Psi_{\Delta t} = S \cdot \underbrace{S \cdot \Psi_{-\Delta t} \circ S}_{=\Psi_{\Delta t}} \cdot \Psi_{\Delta t} = S \cdot \Psi_{\Delta t} \circ S \cdot \Psi_{\Delta t}, \text{ d.h. unter Vor. b) haben die Ausdrücke in c)}$$

und d) den gleichen Wert.

das EulerB-Verfahren, so gilt für den lokalen Fehler als Funktion von Δt (q, p fest) :

$$\text{lok}F_{\text{EulerB}}(\Delta t, q, p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t - \Phi_H(\Delta t; q; p).$$

Es gilt

$$\text{lok}F_{\text{EulerB}}(\Delta t)|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ und } (\text{lok}F_{\text{EulerB}}(\Delta t))'|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

also ist der lokale Fehler des EulerB-Verfahrens

$$\| \text{lok}F_{\text{EulerB}}(\Delta t, q, p) \| = O(\Delta t^2),$$

so dass das EulerB-Verfahren die Ordnung 1 hat.

f) Die Herkunft des EulerB-Verfahrens bei additiv aufgeteilter mechanischer Hamilton-Funktion als Funktions-Verknüpfung zweier (exakter) Flüsse :

Das EulerB-Verfahren kann (analog wie das EulerA-Verfahren) als Hintereinanderausführung von Flüssen zweier exakt lösbarer Dgln gedeutet werden : Dazu ist nur die obige Reihenfolge der Flüsse zu vertauschen :

$$\Psi(\Delta t; \bullet) := \Phi_T(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_V(\Delta t; \bullet) ;$$

denn (mit den oben S.45,46 definierten Flüssen) gilt :

$$\begin{pmatrix} q \\ q \end{pmatrix} \xrightarrow{\Phi_V(\Delta t; \bullet)} \begin{pmatrix} q \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \xrightarrow{\Phi_T(\Delta t; \bullet)} \begin{pmatrix} q + T'^T(q - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t.$$

Dies ist gerade das EulerB-Verfahren :

$$\Phi_T(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_V(\Delta t; \bullet) = \Psi_{T+V}^{\text{EulerB}}(\Delta t; \bullet).$$

Hauptresultat :

Verknüpfung von EulerA- mit EulerB-Verfahren zur Erzielung von Zeit-Symmetrie

Das EulerA-Verfahren und das EulerB-Verfahren haben die Eigenschaften der Symplektizität und der schwachen Zeit-Reversibilität, aber nicht der Zeit-Symmetrie (und damit auch nicht der Zeit-Reversibilität). Diesem letzteren Umstand kann abgeholfen werden, indem das EulerB-Verfahren mit dem EulerA-Verfahren verknüpft wird :

Es gilt zunächst :

$$\Psi_H^{\text{EulerA}}[-\Delta t; \Psi_H^{\text{EulerB}}(\Delta t; q; p)] = (q; p).$$

Denn

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{EulerBmit } +\Delta t} \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \rightarrow \\ & \xrightarrow{\text{EulerAmit } -\Delta t} \begin{pmatrix} q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot (-\Delta t) \\ p - V'^T(q) \cdot \Delta t - V'^T(q + M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t - M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t) \cdot (-\Delta t)) \cdot (-\Delta t) \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und analog

$$\Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; q; p)) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}.$$

Folgerung :

$$\begin{aligned} & \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; \bullet)) \circ \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \bullet)) = \\ & = \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \bullet) \circ \underbrace{\Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \bullet))}_{=id} \circ \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \bullet) = \\ & = \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \bullet) \circ id \circ \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \bullet) = \\ & = \Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \bullet)) = id \end{aligned}$$

Satz :

Die Verknüpfung EulerA° EulerB ist ein zeitsymmetrisches numerisches Verfahren bei dem vorgelegten Dgl-System (obwohl jedes Verfahren für sich alleine nicht zeitsymmetrisch ist (s.o.)) :

$$\begin{aligned} & (\Psi_H^{EulerA}(-\Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t; \bullet)) \circ (\Psi_H^{EulerA}(\Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{EulerB}(\Delta t; \bullet)) = id . \\ & \quad \text{(Zeit-Symmetrie von EulerA° EulerB)} \end{aligned}$$

Die Zeit-Symmetrie war bei einem Dgl-Fluss immer vorhanden (wegen seiner Gruppeneigenschaft, vgl. Kap 1 4)a1) S.6). Bei einem numerischen Verfahren ist die Zeit-Symmetrie eine zusätzlich herbeizuführende Eigenschaft¹⁰.

Für das EulerA° EulerB-Verfahren gilt : Zeit-Symmetrie ist vorhanden.

Die vorhandene Zeit-Symmetrie (zusammen mit der schwachen Zeit-Reversibilität) bedeutet für das numerische Verfahren EulerA° EulerB, dass diese Verknüpfung gemäß Satz S.15 zeitreversibel ist.

¹⁰ Durch Einführung der sogenannten adjungierten Methode $\Psi^*(\Delta t; z) := \Psi^{-1}(-\Delta t; z)$ (und anschließender Verknüpfung mit $\Psi(\Delta t; \bullet)$) kann jedes numerische Verfahren zeitsymmetrisch gemacht werden. Allerdings ist die adjungierte Methode (nach Definition) implizit. Dass die expliziten numerischen Verfahren, EulerA und EulerB, die wechselseitigen Adjungierten voneinander sind, erklärt ihre bevorzugte Stellung bei der numerischen Lösung von Hamilton-Dgln.

4) Das Störmer-Verlet-Verfahren als Verknüpfung von EulerA° EulerB-Verfahren

Die Hintereinanderausführung von EulerB-Schritt, dann EulerA-Schritt (jeweils mit Zeitschritt $\Delta t / 2$) ergibt das sogenannte Störmer-Verlet-Verfahren :

$$\Psi_H^{SrV}(\Delta t; q; p) := \Psi_H^{EulerA}[\Delta t / 2; \Psi_H^{EulerB}(\Delta t / 2; q; p)],$$

d.h. :

Durch Einsetzen ergibt sich (mit dem Zwischen-Impuls p_{hilf})

$$p_{hilf} := p_n - V'^T(q_n) \cdot \Delta t / 2$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{SrV}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n + M^{-1} \cdot p_{hilf} \cdot \Delta t \\ p_{hilf} - V'^T(q_n + M^{-1} \cdot p_{hilf} \cdot \Delta t) \cdot \Delta t / 2 \end{pmatrix}$$

oder in der bei Iteration verwendeten Form :

$$p_{hilf} := p_n - V'^T(q_n) \cdot \Delta t / 2$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{SrV}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_n + M^{-1} \cdot p_{hilf} \cdot \Delta t \\ p_{hilf} - V'^T(q_{n+1}) \cdot \Delta t / 2 \end{pmatrix} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{(Störmer-Verlet)}$$

(Die Rechenfolge ist hier : Zeile 1, Zeile 2, Zeile 3 mit der Wertefolge

$$\begin{pmatrix} q_n, p_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Zeile1}} \begin{pmatrix} q_n, p_{hilf} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Zeile2}} \begin{pmatrix} q_{n+1}, p_{hilf} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{Zeile3}} \begin{pmatrix} q_{n+1}, p_{n+1} \end{pmatrix}) .$$

Dieses Verfahren ist zweistufig und explizit, symplektisch, zeitreversibel bei dem vorgelegten Dgl-System und hat die Ordnung 2.

a) Symplektizität des Störmer-Verlet-Verfahrens :

Das Störmer-Verlet-Verfahren ist symplektisch als Verknüpfung des symplektischen EulerB-Verfahrens mit dem symplektischen EulerA-Verfahren.

Es gilt also :

$$(\Psi_H^{SrV}(\Delta t; q; p))'^T \cdot J \cdot (\Psi_H^{SrV}(\Delta t; q; p))' = J$$

b) Schwache Zeit-Reversibilität des Störmer-Verlet-Verfahrens :

Das Störmer-Verlet-Verfahren ist schwach zeitreversibel als Verknüpfung des schwach zeitreversiblen EulerB-Verfahrens mit dem schwach zeitreversiblen EulerA-Verfahren.

Es gilt also :

$$S \cdot \Psi_H^{SrV}(-\Delta t; S \cdot (q; p)) = \Psi_H^{SrV}(\Delta t; q; p) .$$

c) Das Störmer-Verlet-Verfahren ist zeitsymmetrisch :

Es gilt die Zeit-Symmetrie der Verknüpfung EulerA° EulerB (vgl. S.50)

$$(\Psi_H^{EulerA}(-\Delta t / 2; \bullet) \circ \Psi_H^{EulerB}(-\Delta t / 2; \bullet) \circ (\Psi_H^{EulerA}(+\Delta t / 2; \bullet) \circ \Psi_H^{EulerB}(+\Delta t / 2; \bullet))) = id ,$$

also gilt

$$\Psi_H^{SrV}(-\Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{SrV}(+\Delta t; \bullet) = id .$$

d) Das Störmer-Verlet-Verfahren ist, da schwach zeitreversibel und zeitsymmetrisch, zeitreversibel :

$$S \cdot \Psi_H^{SrV}(\Delta t; S \cdot \Psi_H^{SrV}(\Delta t; \bullet)) = id .$$

e) Approximationsordnung des Störmer-Verlet-Verfahrens hinsichtlich des lokalen Fehlers

$$\text{lok}F_{SIV}(\Delta t, q, p) := \Psi_H^{SIV}(\Delta t; q; p) - \Phi_H(\Delta t; q; p) :$$

Mit

$$\Phi_H(\Delta t; q; p) \text{ der exakten Lösung der AWA } \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p(t), \\ -V'^T(q(t)) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

und der Zuordnung $\Psi_H^{SIV}(\Delta t; \bullet) = \Psi_H^{EulerA}[\Delta t/2; \Psi_H^{EulerB}(\Delta t/2; \bullet)]$, d.h.

$$\begin{aligned} \Delta t \xrightarrow{\text{EulerB mit } \Delta t/2} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot (p - V'^T(q) \cdot \Delta t/2) \cdot \Delta t/2 \\ -V'^T(q) \cdot \Delta t/2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{q}(\Delta t) \\ \hat{p}(\Delta t) \end{pmatrix} \rightarrow \\ &\xrightarrow{\text{EulerA mit } \Delta t/2} \begin{pmatrix} \hat{q}(\Delta t) \\ \hat{p}(\Delta t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot \hat{p}(\Delta t) \cdot \Delta t/2 \\ -V'^T(\hat{q}(\Delta t) + M^{-1} \cdot \hat{p}(\Delta t) \cdot \Delta t/2) \cdot \Delta t/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

gilt für den lokalen Fehler als Funktion von Δt (q, p fest) :

$$\text{lok}F_{SIV}(\Delta t) = \begin{pmatrix} \hat{q}(\Delta t) \\ \hat{p}(\Delta t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot \hat{p}(\Delta t) \cdot \Delta t/2 \\ -V'^T(\hat{q}(\Delta t) + M^{-1} \cdot \hat{p}(\Delta t) \cdot \Delta t/2) \cdot \Delta t/2 \end{pmatrix} - \Phi_H(\Delta t; q; p).$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \text{lok}F_{SIV}(\Delta t)|_{\Delta t=0} &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ und} \\ (\text{lok}F_{SIV}(\Delta t))'|_{\Delta t=0} &= \begin{pmatrix} M^{-1} \cdot p/2 + M^{-1} \cdot p/2 \\ -V'^T(q)/2 - V'^T(q)/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} M^{-1} p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

und sogar

$$(\text{lok}F_{SIV}(\Delta t))''|_{\Delta t=0} = \begin{pmatrix} -M^{-1} \cdot V'^T(q) \\ -V'^T(q) \cdot M^{-1} \cdot (p/2 + p/2) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & I \\ -V'^T(q) & 0 \end{pmatrix} \cdot M^{-1} \cdot \begin{pmatrix} p \\ -V'^T(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

also ist der lokale Fehler des Störmer-Verlet-Verfahrens

$$\|\text{lok}F_{SIV}(\Delta t, q, p)\| = O(\Delta t^3),$$

so dass das Störmer-Verlet-Verfahren die Ordnung 2 hat.

f) Die Herkunft des Störmer-Verlet-Verfahrens bei additiv aufgeteilter Hamilton-Funktion als Verknüpfung dreier (exakter) Flüsse :

Die additive Aufteilung der Hamilton-Funktion in

$$H_1(q; p) := \frac{1}{2} \cdot V(q), \quad H_2(q; p) := T(p), \quad H_3(q; p) := \frac{1}{2} \cdot V(q)$$

und die Verknüpfung der drei exakt angebbaren Flüsse der Dgln ergibt das Störmer-Verlet-Verfahren [LR,2005 S.81], d.h.

$$\Psi_H^{SIV}(\Delta t; \bullet) = \Phi_{\frac{1}{2}V}(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_{\frac{1}{2}V}(\Delta t; \bullet).^{11}$$

¹¹ Beachte den wichtigen Nachtrag auf der folgenden Seite!

Bemerkung :

Aus dieser Darstellung des Störmer-Verlet-Verfahrens als symmetrische Dreifach-Verknüpfung von zwei exakten (symplektischen und zeitreversiblen) Flüssen $\Phi_T(\Delta t; \bullet)$ und $\Phi_{\frac{1}{2}V}(\Delta t; \bullet)$ folgt (nach den Vererbungseigenschaften S.7, S.16) sofort, dass dieses StV -Verfahren symplektisch und zeitreversibel ist.

Wichtiger Nachtrag zur Kraftberechnungseinsparung :

Das oben beschriebene Störmer-Verlet-Verfahren

$$\Psi_H^{StV}(\Delta t; \bullet) := \Psi_H^{EulerA}[\Delta t / 2; \Psi_H^{EulerB}(\Delta t / 2; \bullet)] = \Phi_{\frac{1}{2}V}(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_T(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_{\frac{1}{2}V}(\Delta t; \bullet)$$

erfordert je Iterationsschritt zwei Kräfteberechnungen (an den Stellen q_n und q_{n+1}).

Man betrachte nun die Variante des Verfahrens, in der EulerA mit EulerB, bzw. T mit V die Rollen tauschen (persönliche Anregung von Nils Schopohl) :

$$\Psi_H^{\overline{StV}}(\Delta t; \bullet) := \Psi_H^{EulerB}[\Delta t / 2; \Psi_H^{EulerA}(\Delta t / 2; \bullet)] = \Phi_{\frac{1}{2}T}(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_V(\Delta t; \bullet) \circ \Phi_{\frac{1}{2}T}(\Delta t; \bullet).$$

Durch Einsetzen ergibt sich (mit dem Zwischen-Ort q_{hilf})

$$q_{hilf} := q_n + M^{-1} \cdot p_n \cdot \Delta t / 2$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{\overline{StV}}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_{hilf} + M^{-1} \cdot (p_n - V'^T(q_{hilf}) \cdot \Delta t) \cdot \Delta t / 2 \\ p_n - V'^T(q_{hilf}) \cdot \Delta t \end{pmatrix}$$

oder in der bei Iteration verwendeten Form :

$$q_{hilf} := q_n + M^{-1} \cdot p_n \cdot \Delta t / 2$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \Psi_H^{\overline{StV}}(\Delta t; \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}) := \begin{pmatrix} q_{hilf} + M^{-1} \cdot p_{n+1} \cdot \Delta t / 2 \\ p_n - V'^T(q_{hilf}) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{(Störmer-Verlet)}$$

(Die Rechenfolge ist hier : Zeile 1, Zeile 3, Zeile 2 mit der Wertefolge

$$(q_n, p_n) \xrightarrow{\text{Zeile1}} (q_{hilf}, p_n) \xrightarrow{\text{Zeile3}} (q_{hilf}, p_{n+1}) \xrightarrow{\text{Zeile2}} (q_{n+1}, p_{n+1}) .$$

Hier wird je Iterationsschritt nur eine Kräfteberechnung (an der Stelle q_{hilf}) benötigt.

Die Rechenzeiterparnis (50%) dieser Störmer-Verlet Varianten¹² \overline{StV} ist besonders für Mehrteilchensysteme mit hoher Teilchenzahl interessant (Die Berechnung aller Kräfte bei Paar-Potentialen stellt den Hauptanteil (95%) im Iterationsschritt dar).

¹² Die Variante \overline{StV} hat die gleichen Eigenschaften a) – e) wie das ursprüngliche Störmer-Verlet-Verfahren StV . Ebenso existiert (analog zur Bildung von $StV4$ vgl. S. 54ff) eine ähnliche Bildung $\overline{StV4}$ mit vierter Konvergenz-Ordnung.

Ein neuer Punkt :

5) Symmetrische Dreifach-Verknüpfung von Störmer-Verlet-Schritten zur Erzeugung des StV4 - Verfahrens vierter Ordnung

Auf Grund der Vererbungseigenschaften bei Verknüpfung (vgl.S.7, S.16) gilt : Symmetrische Dreifach-Verknüpfung zweier zeitsymmetrischer und symplektischer Verfahren erzeugt ein zeitreversibles symplektisches Verfahren.

Anwendung :

a) Durch symmetrische Dreifach-Verknüpfung zweier Störmer-Verlet-Verfahren mit beliebig parameterisierten Schrittweiten entsteht stets ein zeitreversibles symplektisches numerisches Verfahren.

b) Bei passender Wahl der Parameter ist das Verfahren sogar von 4. Ordnung.

Satz :

Durch symmetrische Dreifach-Verknüpfung der Verfahren $\Psi_H^{StV}(\alpha_0 \cdot \Delta t; \bullet)$ und $\Psi_H^{StV}(\beta_0 \cdot \Delta t; \bullet)$, wobei zu setzen sind

$$\alpha_0 = \frac{\sqrt[3]{4}}{2 \cdot (\sqrt[3]{4} - 1)} = 1.3512\dots, \quad \beta_0 = \frac{1}{1 - \sqrt[3]{4}} = -1.7024\dots,$$

ergibt sich

$$\Psi_H^{StV4}(\Delta t; \bullet) := \Psi_H^{StV}(\alpha_0 \cdot \Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{StV}(\beta_0 \cdot \Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{StV}(\alpha_0 \cdot \Delta t; \bullet) \quad (\text{StV4-Verfahren})$$

(Zur konkreten Berechnung $(q_n, p_n) \rightarrow (q_{n+1}, p_{n+1})$ s. S.73 in stormer4step.m.)

Dieses StV4-Verfahren ist explizit, symplektisch, zeitreversibel u. hat die Ordnung 4.

- a) Symplektizität,
- b) Schwache Zeit-Reversibilität,
- c) Zeit-Symmetrie,
- d) Zeit-Reversibilität

ergeben sich auf Grund der Vererbung bei symmetrischer Dreifach-Verknüpfung (und zwar für beliebige α, β), vgl. Satz auf S.16.

e) Zur Approximationsordnung des Störmer-Verlet4-Verfahrens hinsichtlich des lokalen Fehlers (bei diesen speziellen α_0, β_0)

$$lokF_{StV4, \alpha_0, \beta_0}(\Delta t, q, p) := \Psi_H^{StV4}(\Delta t; q, p)_{\alpha_0, \beta_0} - \Phi_H(\Delta t; q, p) :$$

Ergebnis :

Erfüllen α_0, β_0 die Bedingungen

$$\begin{aligned} 2 \cdot \alpha_0 + \beta_0 &= 1 \\ 2 \cdot \alpha_0^3 + \beta_0^3 &= 0' \end{aligned}$$

so sind beide nach Δt -entwickelten Taylor Reihen

$$\Psi_H^{StV} \{ \alpha_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV}(\alpha_0 \cdot \Delta t; q, p)] \}$$

und

$$\Phi_H(\Delta t; q, p)$$

bis zum 4. Glied gleich (Beweis auf den nachfolgenden Seiten).

Die oben gewählten α_0, β_0 -Werte genügen dieser Beziehung.

Damit ergibt sich der lokale Fehler des Störmer-Verlet4-Verfahrens zu

$$\| \text{lok}F_{SIV4, \alpha_0, \beta_0}(\Delta t, q, p) \| = O(\Delta t^5),$$

so dass das Störmer-Verlet4-Verfahren die Ordnung 4 hat.

Beweis :

Der (längere) Beweis der 4. Ordnung von $\Psi_H^{SIV} \{ \alpha_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{SIV} [\beta_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{SIV} (\alpha_0 \cdot \Delta t, ; q; p)] \}$ bei obigen α_0, β_0 :

Ausgangspunkt ist (oBdA¹³) die mechanische Hamilton-Dgl

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} (t) = \begin{pmatrix} p(t) \\ f(q(t)) \end{pmatrix}$$

für einen Körper der Masse 1 mit 1-dimensionaler Bewegungsmöglichkeit.

Der Fluss dieser Dgl hat die lokale Δt -Taylorentwicklung (bis zur 4. Ordnung)

$$\begin{aligned} \Phi_H(\Delta t; q; p) = & \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ f(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} f(q) \\ f'(q) \cdot p \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} f'(q) \cdot p \\ f''(q) \cdot p^2 + f'(q) \cdot f(p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \\ & + \begin{pmatrix} f''(q) \cdot p^2 + f'(q) \cdot f(p) \\ f'''(q) \cdot p^3 + 3 \cdot f''(q) \cdot f(q) \cdot p + f'(q) \cdot f'(q) \cdot p \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} + O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

Das einfache symplektische, zeitreversible Störmer-Verlet-Verfahren

$$\Psi_H^{SIV}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ f(q) \cdot \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} f(q) \cdot \frac{\Delta t^2}{2} \\ f(q + p \cdot \Delta t + f(q) \cdot \frac{\Delta t^2}{2}) \cdot \frac{\Delta t}{2} \end{pmatrix} \text{ hat}$$

— nach Δt -Entwicklung des Anteils $f(q + p \cdot \Delta t + f(q) \cdot \frac{\Delta t^2}{2}) \cdot \frac{\Delta t}{2}$:

$$\begin{aligned} f(q + p \cdot \Delta t + f(q) \cdot \frac{\Delta t^2}{2}) \cdot \frac{\Delta t}{2} = & \frac{1}{2} \cdot f(q) \cdot \Delta t + \\ & + f'(q) \cdot p \cdot \frac{\Delta t^2}{2!} + \\ & + \frac{3}{2} \cdot (f''(q) \cdot p^2 + f'(q) \cdot f(q)) \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \quad \text{—} \\ & + 2 \cdot (f'''(q) \cdot p^3 + 3 \cdot f''(q) \cdot f(q) \cdot p) \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} \\ & + O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

die lokale Δt -Taylorentwicklung bis zur 4. Δt -Potenz :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{SIV}(\Delta t; q; p) = & \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ f(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} f(q) \\ f'(q) \cdot p \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2!} + \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ f''(q) \cdot p^2 + f'(q) \cdot f(q) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \\ & + 2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ f'''(q) \cdot p^3 + 3 \cdot f''(q) \cdot f(q) \cdot p \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} + O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

¹³ Hier ist also $H(q; p) := \frac{p^2}{2} - \int f(q) dq$ statt des allgemeineren $H(q; p) = \frac{p^T \cdot M^{-1} \cdot p}{2} + V(q)$

Es soll nun die symmetrische Dreifach-Verknüpfung von (zwei¹⁴ einfachen) Störmer-Verlet-Verfahren (mit jeweils parametrisierter Schrittweite)

$$\Psi_H^{StV4}(\Delta t; q; p)_{\alpha, \beta} := \Psi_H^{StV} \{ \alpha \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} (\alpha \cdot \Delta t; q; p)] \}$$

nach Δt -Potenzen (bis zur 4. Ordnung) entwickelt werden.

Ziel : Bestimmung der (α, β -abhängigen) Koeffizienten $\begin{pmatrix} K_{i1} \\ K_{i2} \end{pmatrix}$ ($i=1, \dots, 4$) mit

$$\Psi_H^{StV4}(\Delta t; q; p)_{\alpha, \beta} = \begin{pmatrix} K_{01} \\ K_{02} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} K_{11} \\ K_{12} \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} K_{21} \\ K_{22} \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} K_{31} \\ K_{32} \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \begin{pmatrix} K_{41} \\ K_{42} \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} + O(\Delta t^5).$$

Vorgehen :

Die Zuordnung $\Delta t \rightarrow \Psi_H^{StV}(c \cdot \Delta t; q; p)$ (einfaches, parametrisiertes Störmer-Verlet-Verfahren) kann noch explizit angegeben werden (s.u.) und es können (evtl. mit Aufwand) die höheren Δt -Ableitungen berechnet werden. Gleiches gilt aber kaum für die Zuordnung $\Delta t \rightarrow \Psi_H^{StV4}(\Delta t; q; p)_{\alpha, \beta}$ und deren höhere Δt -Ableitungen¹⁵.

Eine Δt -Entwicklung von $\Psi_H^{StV4}(\Delta t; q; p)_{\alpha, \beta}$ (als Verknüpfung von Verfahren) kann erreicht werden durch die Berechnung der Δt -Entwicklungen der Einzelverfahren und das anschließende Ineinandersetzen der Δt -Entwicklungen.

Dabei gelten folgende Hilfsmittel für die $O(\Delta t^5)$ -Rechnung :

a) Es ist

$$f(z + O(\Delta t^5)) = f(z) + O(\Delta t^5)$$

(Auswertung bei $z + O(\Delta t^5)$ entspricht Auswertung bei z mit entsprechendem Fehler)

b) Es ist

(Entwicklung von f bei a und Umordnen der $(b \cdot \Delta t + c \cdot \Delta t^2 + d \cdot \Delta t^3 + e \cdot \Delta t^4)^{i=1, \dots, 4}$)

$$\begin{aligned} f(a + b \cdot \Delta t + c \cdot \Delta t^2 + d \cdot \Delta t^3 + e \cdot \Delta t^4) &= \\ &= f(a) + \\ &+ f'(a) \cdot b \cdot \Delta t + \\ &+ (f'(a) \cdot c + f''(a) \cdot b^2 / 2) \cdot \Delta t^2 + \\ &+ (f'(a) \cdot d + f''(a) \cdot bc + f'''(a) \cdot b^3 / 6) \cdot \Delta t^3 + \\ &+ (f'(a) \cdot e + f''(a) \cdot (bd + c^2 / 2) + f'''(a) \cdot b^2 c / 2 + f^{(4)}(a) \cdot b^4 / 24) \cdot \Delta t^4 + \\ &+ O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

(Δt -Entwicklung von $f(P_4(\Delta t))$, wobei P_4 ein Polynom 4. Grades in Δt ist).

¹⁴ vgl. Fußnote 24 auf S.16

¹⁵ "Höhere als 4. Ableitungen stellen ein Notationsproblem dar." zitiert nach Merson [HLW, 2002 S.51]. Aus diesem Grund werden (anders als in den vorherigen Konvergenz-Ordnungs-Beweisen nicht die Ableitungen nach Δt an der Stelle $\Delta t = 0$ berechnet, sondern) die Übereinstimmung der Δt^i -Koeffizienten in der Potenzreihenentwicklung aufgezeigt.

c) Mit der Bezeichnung $(\cdot)_{(j)}$ für Δt -Entwicklung bis zur Δt^j -Potenz gilt :

$$f(P_4(\Delta t)) \cdot \Delta t^i + O(\Delta t^5) = f(P_4(\Delta t))_{(4-i)} \cdot \Delta t^i + O(\Delta t^5)$$

(Bei einem Produkt mit Faktor Δt^i genügt eine bis zum Faktor Δt^{4-i} reduzierte Δt -Entwicklung des Vorfaktors $f(P_4(\Delta t))$ gemäß b))

Es folgen vier Beweisschritte zur

Bestimmung der lokalen Δt -Entwicklung von $StV\{\alpha \cdot \Delta t; StV[\beta \cdot \Delta t; StV(\alpha \cdot \Delta t; q; p)]\}$:

1) Zunächst werden zum leichteren Einblick in die Verwandtschaft des Flusses $\Phi_H(\Delta t; q; p)$ der Dgl mit dem (einfachen, Δt -entwickelten¹⁶) StV-Verfahren

$\Psi_H^{StV}(\Delta t; q; p)$ folgende Bezeichnungen¹⁷ eingeführt :

$$A(q) := f(q)$$

$$B(q; p) := f'(q) \cdot p$$

$$C(q; p) = f''(q) \cdot p^2 + f'(q) \cdot f(q) \quad .$$

$$D(q; p) = f'''(q) \cdot p^3 + 3 \cdot f''(q) \cdot f(q) \cdot p$$

$$E(q; p) = f'(q) \cdot f'(q) \cdot p$$

In diesen neuen Bezeichnungen lautet die lokale Entwicklung des Flusses

$$\Phi_H(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} B(q; p) \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \begin{pmatrix} C(q; p) \\ D(q; p) + E(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} + O(\Delta t^5)$$

und die des (einfachen, Δt -entwickelten) Störmer-Verlet-Verfahrens

$$\Psi_H^{StV}(\Delta t; q; p) = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{12} + O(\Delta t^5) .$$

2) Bestimmung der Δt -Entwicklung von $\Psi_H^{StV}[\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)]$ (Zweifach-Verknüpfung) :

Es gilt folgende Δt -Entwicklung

¹⁶ Nach Hilfsmittel a) kann zur Herleitung der Δt -Entwicklung mit $O(\Delta t^5)$ -Fehler statt des Störmer-Verlet-Verfahrens auch das Δt -entwickelte Störmer-Verlet-Verfahren genommen werden.

¹⁷ Bei Behandlung einer allgemeinen Hamilton-Dgl stehen hier ähnliche Ausdrücke, wobei die Produkte hinter den Ableitungen als Kronecker-Produkte aufzufassen sind.

$$\begin{aligned} \Psi_H^{StV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p) &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \alpha \cdot \Delta t + \\ &+ \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12} + \\ &+ O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

Definiere nun

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix} &:= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \alpha \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12} \end{aligned}$$

Nach Hilfsmittel a) genügt es, die Δt -Entwicklung von $\Psi_H^{StV}(\beta \cdot \Delta t; q_1; p_1)$ zu betrachten, und nach Hilfsmittel c) brauchen die Δt^i -Vorfaktoren nur bis zur $(4-i)$ -ten Δt -Potenz entwickelt zu werden, d.h.¹⁸

$$\begin{aligned} \Psi_H^{StV}(\beta \cdot \Delta t; q_1; p_1) &= \begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix}_{(4)} + \begin{pmatrix} p_1 \\ A(q_1) \end{pmatrix}_{(3)} \cdot \beta \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q_1) \\ B(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(2)} \cdot \frac{\beta^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\ &+ \begin{pmatrix} 0 \\ C(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(1)} \cdot \frac{\beta^3 \cdot \Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} 0 \\ D(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(0)} \cdot \frac{\beta^4 \cdot \Delta t^4}{12} + O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

Es ist (mit Hilfsmittel b) und den Beziehungen innerhalb der $A(q), \dots, E(q; p)$):

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \end{pmatrix}_{(4)} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \alpha \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12},$$

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ A(q_1) \end{pmatrix}_{(3)} \cdot \beta \cdot \Delta t = \begin{pmatrix} p + A(q) \cdot \alpha \cdot \Delta t + B(q; p) \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + C(q; p) \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} \\ A(q) + B(q; p) \cdot \alpha \cdot \Delta t + C(q; p) \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + D(q; p) \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{6} \end{pmatrix} \cdot \beta \cdot \Delta t,$$

¹⁸ Der Index an den Vorfaktoren gibt an, bis zu welcher Δt -Potenz der Vorfaktor gemäß b) zu entwickeln ist.

$$\begin{pmatrix} A(q_1) \\ B(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(2)} \cdot \frac{\beta^2 \cdot \Delta t^2}{2} = \begin{pmatrix} A(q) + B(q; p) \cdot \alpha \cdot \Delta t + C(q; p) \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} \\ B(q; p) + C(q; p) \cdot \alpha \cdot \Delta t + (D(q; p) + E(q; p)) \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} \end{pmatrix} \cdot \frac{\beta^2 \cdot \Delta t^2}{2},$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ C(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(1)} \cdot \frac{\beta^3 \cdot \Delta t^3}{4} = \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) + (D(q; p) + E(q; p)) \cdot \alpha \cdot \Delta t \end{pmatrix} \cdot \frac{\beta^3 \cdot \Delta t^3}{4},$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ D(q_1; p_1) \end{pmatrix}_{(0)} \cdot \frac{\beta^4 \cdot \Delta t^4}{12} = \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\beta^4 \cdot \Delta t^4}{12}.$$

Also gilt folgende Δt -Entwicklung für die Zweifach-Verknüpfung :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{StV}[\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)] &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} p \cdot (\alpha + \beta) \\ A(q) \cdot (\alpha + \beta) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \\ &+ \begin{pmatrix} A(q) \cdot \left(\frac{\alpha^2}{2} + \alpha\beta + \frac{\beta^2}{2}\right) \\ B(q; p) \cdot \left(\frac{\alpha^2}{2} + \alpha\beta + \frac{\beta^2}{2}\right) \end{pmatrix} \cdot \Delta t^2 + \\ &+ \begin{pmatrix} B(q; p) \cdot (2\alpha^2\beta + 2\alpha\beta^2) \\ C(q; p) \cdot (\alpha^3 + 2\alpha^2\beta + 2\alpha\beta^2 + \beta^3) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{4} + \\ &+ \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot (3\alpha^3\beta + 3\alpha^2\beta^2) \\ D(q; p) \cdot (\alpha^4 + 2\alpha^3\beta + 3\alpha^2\beta^2 + 3\alpha\beta^3 + \beta^4) + E(q; p) \cdot (3\alpha^2\beta^2 + 3\alpha\beta^3) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{12} + \\ &+ O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

Mit den Bezeichnungen¹⁹

$$\varphi_1(\alpha, \beta) := 2\alpha^2\beta + 2\alpha\beta^2$$

$$\varphi_2(\alpha, \beta) := \alpha^3 + 2\alpha^2\beta + 2\alpha\beta^2 + \beta^3$$

$$\varphi_3(\alpha, \beta) := 3\alpha^3\beta + 3\alpha^2\beta^2$$

$$\varphi_{4a}(\alpha, \beta) := \alpha^4 + 2\alpha^3\beta + 3\alpha^2\beta^2 + 3\alpha\beta^3 + \beta^4$$

$$\varphi_{4b}(\alpha, \beta) := 3\alpha^2\beta^2 + 3\alpha\beta^3$$

ist also

¹⁹ Es gilt : $\varphi_2(\alpha, \beta) = \varphi_1(\alpha, \beta) + \alpha^3 + \beta^3$

$$\begin{aligned}
\Psi_H^{SiV}[\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{SiV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)] &= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \\
&+ \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + \\
&+ \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\
&+ \begin{pmatrix} B(q; p) \cdot \varphi_1(\alpha, \beta) \\ C(q; p) \cdot \varphi_2(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{4} + \\
&+ \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot \varphi_3(\alpha, \beta) \\ D(q; p) \cdot \varphi_{4a}(\alpha, \beta) + E(q; p) \cdot \varphi_{4b}(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{12} \\
&+ O(\Delta t^5)
\end{aligned}$$

Definiere nun

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} q_2 \\ p_2 \end{pmatrix} &:= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\
&+ \begin{pmatrix} B(q; p) \cdot \varphi_1(\alpha, \beta) \\ C(q; p) \cdot \varphi_2(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot \varphi_3(\alpha, \beta) \\ D(q; p) \cdot \varphi_{4a}(\alpha, \beta) + E(q; p) \cdot \varphi_{4b}(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{12}
\end{aligned}$$

3) Bestimmung der Δt -Entwicklung von $\Psi_H^{SiV}\{\alpha \cdot \Delta t; \Psi_H^{SiV}[\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{SiV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)]\}$:
Es gilt

$$\Psi_H^{SiV}[\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{SiV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)] = \begin{pmatrix} q_2 \\ p_2 \end{pmatrix} + O(\Delta t^5) .$$

Nach Hilfsmittel a) genügt es, die Δt -Entwicklung von $\Psi_H^{SiV}(\alpha \cdot \Delta t; q_2; p_2)$ zu betrachten, und nach Hilfsmittel c) brauchen die Δt^i -Vorfaktoren nur bis zur $(4-i)$ -ten Δt -Potenz entwickelt zu werden, d.h.

$$\begin{aligned}
\Psi_H^{SiV}(\alpha \cdot \Delta t; q_2; p_2) &= \begin{pmatrix} q_2 \\ p_2 \end{pmatrix}_{(4)} + \begin{pmatrix} p_2 \\ A(q_2) \end{pmatrix}_{(3)} \cdot \alpha \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q_2) \\ B(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(2)} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \\
&+ \begin{pmatrix} 0 \\ C(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(1)} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} + \begin{pmatrix} 0 \\ D(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(0)} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12} + O(\Delta t^5)
\end{aligned}$$

Es ist (mit Hilfsmittel b) und den Beziehungen innerhalb der $A(q), \dots, E(q; p)$:

$$\begin{pmatrix} q_2 \\ p_2 \end{pmatrix}_{(4)} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} + \begin{pmatrix} B(q; p) \cdot \varphi_1(\alpha, \beta) \\ C(q; p) \cdot \varphi_2(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{4} + \\ + \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot \varphi_3(\alpha, \beta) \\ D(q; p) \cdot \varphi_{4a}(\alpha, \beta) + E(q; p) \cdot \varphi_{4b}(\alpha, \beta) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{12} ,$$

$$\begin{pmatrix} p_2 \\ A(q_2) \end{pmatrix}_{(3)} \cdot \alpha \cdot \Delta t = \begin{pmatrix} p + A(q) \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + B(q; p) \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} \\ A(q) + B(q; p) \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + C(q; p) \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} \end{pmatrix} \cdot \alpha \cdot \Delta t + \\ + \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot \varphi_2(\alpha, \beta) \cdot \frac{\Delta t^3}{4} \\ (D(q; p) \cdot \frac{(\alpha + \beta)^3}{6} + E(q; p) \cdot \frac{\varphi_2(\alpha, \beta)}{4}) \cdot \Delta t^3 \end{pmatrix} \cdot \alpha \cdot \Delta t ,$$

$$\begin{pmatrix} A(q_2) \\ B(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(2)} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2} = \begin{pmatrix} A(q) + B(q; p) \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + C(q; p) \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} \\ B(q; p) + C(q; p) \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t + (D(q; p) + E(q; p)) \cdot \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \Delta t^2}{2} \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^2 \cdot \Delta t^2}{2}$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ C(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(1)} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} = \begin{pmatrix} 0 \\ C(q; p) + (D(q; p) + E(q; p)) \cdot (\alpha + \beta) \cdot \Delta t \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^3 \cdot \Delta t^3}{4} ,$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ D(q_2; p_2) \end{pmatrix}_{(0)} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12} = \begin{pmatrix} 0 \\ D(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\alpha^4 \cdot \Delta t^4}{12} .$$

Also gilt folgende Δt -Entwicklung für die symmetrische Dreifach-Verknüpfung :

$$\begin{aligned}
\Psi_H^{StV} \{ \alpha \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} (\alpha \cdot \Delta t; q; p)] \} = & \\
= \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + & \\
+ \begin{pmatrix} p \cdot (\alpha + \beta + \alpha) \\ A(q) \cdot (\alpha + \beta + \alpha) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + & \\
+ \begin{pmatrix} A(q) \cdot \left(\frac{(\alpha + \beta)^2}{2} + (\alpha + \beta) \cdot \alpha + \frac{\alpha^2}{2} \right) \\ B(q; p) \cdot \left(\frac{(\alpha + \beta)^2}{2} + (\alpha + \beta) \cdot \alpha + \frac{\alpha^2}{2} \right) \end{pmatrix} \cdot \Delta t^2 + & \\
+ \begin{pmatrix} B(q; p) \cdot \left(\frac{\varphi_1(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \alpha}{2} + \frac{\alpha^2 \cdot (\alpha + \beta)}{2} \right) \\ C(q; p) \cdot \left(\frac{\varphi_2(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \alpha}{2} + \frac{\alpha^2 \cdot (\alpha + \beta)}{2} + \frac{\alpha^3}{4} \right) \end{pmatrix} \cdot \Delta t^3 + & \\
+ \begin{pmatrix} C(q; p) \cdot \left(\frac{\varphi_3(\alpha, \beta)}{12} + \frac{\alpha \cdot \varphi_2(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \alpha^2}{4} \right) \\ D(q; p) \cdot \left(\frac{\varphi_{4a}(\alpha, \beta)}{12} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \alpha^2}{4} + \frac{(\alpha + \beta) \cdot \alpha^3}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^3 \cdot \alpha}{6} + \frac{\alpha^4}{12} \right) \end{pmatrix} \cdot \Delta t^4 + & \\
+ \begin{pmatrix} 0 \\ E(q; p) \cdot \left(\frac{\varphi_{4b}(\alpha, \beta)}{12} + \frac{\alpha \cdot \varphi_1(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \cdot \alpha^2}{4} + \frac{(\alpha + \beta) \cdot \alpha^3}{4} \right) \end{pmatrix} \cdot \Delta t^4 & \\
+ O(\Delta t^5) &
\end{aligned}$$

4) Spezialisierung der Parameter α, β :

Die Wahl

$$2\alpha + \beta = 1 \quad (*)$$

bewirkt, dass $\Psi_H^{StV} \{ \alpha \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} (\alpha \cdot \Delta t; q; p)] \}$ und $\Phi_H(\Delta t; q; p)$ schon bis zum Δt^2 -Summanden übereinstimmen (lokale Approximation mit $O(\Delta t^3)$).

Wird weiter gewählt

$$\frac{\varphi_1(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \alpha}{2} + \frac{\alpha^2 (\alpha + \beta)}{2} = \frac{\varphi_2(\alpha, \beta)}{4} + \frac{(\alpha + \beta)^2 \alpha}{2} + \frac{\alpha^2 (\alpha + \beta)}{2} + \frac{\alpha^3}{4}$$

d.h.

$$2\alpha^3 + \beta^3 = 0 \quad (**),$$

so enthält der Δt^3 -Summand einen gemeinsamen Faktor.

Die Lösung von (*) und (**) liefert die Werte

$$\alpha_0 = \frac{\sqrt[3]{4}}{2 \cdot (\sqrt[3]{4} - 1)} = 1.35120719195966\dots$$

$$\beta_0 = \frac{1}{1 - \sqrt[3]{4}} = -1.70241438391932\dots$$

Damit entsteht²⁰ bei Δt^3

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_1(\alpha_0, \beta_0)}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^2 \cdot \alpha_0}{2} + \frac{\alpha_0^2 \cdot (\alpha_0 + \beta_0)}{2} = \\ & = \frac{\varphi_2(\alpha_0, \beta_0)}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^2 \cdot \alpha_0}{2} + \frac{\alpha_0^2 \cdot (\alpha_0 + \beta_0)}{2} + \frac{\alpha_0^3}{4} = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

und bei Δt^4

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_3(\alpha_0, \beta_0)}{12} + \frac{\alpha_0 \cdot \varphi_2(\alpha_0, \beta_0)}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^2 \cdot \alpha_0^2}{4} = \\ & = \frac{\varphi_{4a}(\alpha_0, \beta_0)}{12} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^2 \cdot \alpha^2}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0) \cdot \alpha_0^3}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^3 \cdot \alpha_0}{6} + \frac{\alpha_0^4}{12} = \\ & = \frac{\varphi_{4b}(\alpha_0, \beta_0)}{12} + \frac{\alpha_0 \cdot \varphi_1(\alpha_0, \beta_0)}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0)^2 \cdot \alpha_0^2}{4} + \frac{(\alpha_0 + \beta_0) \cdot \alpha_0^3}{4} = \frac{1}{24} \end{aligned}$$

Zusammengefasst ergibt sich :

$$\begin{aligned} \Psi_H^{StV} \{ \alpha_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} (\alpha_0 \cdot \Delta t; q; p)] \} = & \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \\ & + \begin{pmatrix} p \cdot \\ A(q) \end{pmatrix} \cdot \Delta t + \\ & + \begin{pmatrix} A(q) \\ B(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^2}{2} + \\ & + \begin{pmatrix} B(q; p) \\ C(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^3}{3!} + \\ & + \begin{pmatrix} C(q; p) \\ D(q; p) + E(q; p) \end{pmatrix} \cdot \frac{\Delta t^4}{4!} + \\ & + O(\Delta t^5) \end{aligned}$$

Damit ist der lokale Fehler der symmetrischen Dreifach-Verknüpfung von *StV*-Verfahren (mit diesen Parametern α_0, β_0)

$$\| \Psi_H^{StV} \{ \alpha_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} (\alpha_0 \cdot \Delta t; q; p)] \} - \Phi_H(\Delta t; q; p) \| = O(\Delta t^5).$$

Die Ordnung des *StV4*-Verfahrens ist also 4.



²⁰ Am einfachsten numerisch auszurechnen; eine aufwändigere analytische Rechnung hat dieselben Ergebnisse.

Bemerkung ²¹:

Mit entsprechendem Aufwand ließen sich analog auch symmetrische Fünffach-Verknüpfungen

$$\Psi_H^{StV}(\alpha \cdot \Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{StV}(\beta \cdot \Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{StV}(\gamma \cdot \Delta t) \circ \Psi_H^{StV}(\beta \cdot \Delta t; \bullet) \circ \Psi_H^{StV}(\alpha \cdot \Delta t; q; p)$$

herleiten, welche durch Bedingungen an die α, β, γ eine globale

Approximationsordnung 6 ergäben, usw. Alle solche symmetrischen Mehrfach-Verknüpfung sind stets symplektisch (langzeitstabil) und zeitreversibel.

6) Zusammenfassende Übersicht der vorgestellten numerischen Verfahren mit ihren wesentlichen Eigenschaften :

num.Verf.	explizit	symplekt.	schw.z.rev.	zeitsymm.	zeitrevers.	Ordnung
Euler	X	-	X	-	-	1
EulerA	X	X	X	-	-	1
EulerB	X	X	X	-	-	1
StV=EA°EB	X	X	X	X	X	2
StV4	X	X	X	X	X	4

Das oben beschriebene numerische Verfahren²²

$$\Psi_H^{StV4}(\Delta t; \bullet) := \Psi_H^{StV} \{ \alpha_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV} [\beta_0 \cdot \Delta t; \Psi_H^{StV}(\alpha_0 \cdot \Delta t; \bullet)] \} ,$$

welches die gleiche Ordnung hat wie das bei dissipativen Systemen ausreichende, viel verwendete Runge-Kutta-Verfahren, dazu aber noch Symplektizität und Zeit-Reversibilität besitzt, soll bei den folgenden Beispielen erstmals angewendet werden.

²¹ Nach [LR,2005, Kap. 6.2.2] und [HLW,2002, Kap.II.4] haben Yoshida (1990) und Suzuki(1990) eine ausführliche Theorie gegeben, wie durch Verknüpfung numerische symplektische und zeitreversible Integratoren höherer Ordnung konstruiert werden können. Im Rahmen der beabsichtigten Anwendungen genügte es hier, die Bedingungen für die Parameter α, β der symmetrischen Dreifach-Verknüpfung durch elementares Rechnen herzuleiten.

²² Im folgenden als StV4-Verfahren bezeichnet (mit den speziellen Parametern α_0, β_0).

Kapitel 3

MatLab Rechnungen für Hamilton-Systeme

Überblick

MatLab Rechnungen für Hamilton-Systeme

Untersuchung des Rücklauf-Verhaltens des $SIV4$ -Verfahrens bei N-Körper System
(Gas mit Lennard-Jones-Paar-Potentialen)

Untersuchungen des Langzeit-Verhaltens bei T-Rohr-Anordnung
(bei abstoßendem bzw. anziehendem Newton-Paar-Potential)

MatLab Rechnungen für Hamilton-Systeme

Aufbau

MatLab Rechnungen Gas

- 1) Rücklauf–Verhalten des $StV4$ –Verfahrens bei N-Körper System
- 2) Programm-Schema für N-Koerper
- 3) Programm-Quell-Text
- 4) Rechen-Beispiele
- 5) Zusätze

MatLab Rechnungen T-Rohr-Anordnung

- 1) Behandlung des Rückstoßes
- 2) Typisches Langzeit-Verhalten der numerischen Dgl-Lösungen
- 3) Unterschiedliches Verhalten der kinetischen Energien der beiden Körper bei abstoßender bzw. anziehender Paar-Kraft
- 4) Tabelle mit den Parametern und Ergebnissen der einzelnen Simulationen
- 5) Programm-Schema für T-Rohr
- 6) Programm-Quell-Text

Im folgenden werden Beispiele der Anwendung des Störmer-Verlet-(4. Ordnung)-Verfahrens vorgestellt, welche die Eigenschaften des Verfahrens (Zeit-Reversibilität und Symplektizität) betonen.

In der ersten Anwendung wird die Zeit-Reversibilität des N-Körper-Systems bei Lennard-Jones-Abstandspotentialen mit dem zeitreversiblen $StV4$ -Verfahren numerisch dargestellt.

In der zweiten Anwendung wird das Langzeit-Verhalten der Bewegungen in der geometrischen T-Rohr-Anordnung durch das symplektische (= langzeitstabile) $StV4$ -Verfahren numerisch untersucht und das (je nach Paar-Kraft-Typ abstoßend bzw. anziehend) unterschiedliche Verhalten der kinetischen Energien betrachtet.

Als Programmier-Hilfsmittel wurde verwendet
MatLab Version 7.5.342 (R2007b), August 15.2007

MatLab Rechnungen Gas

1) Rücklauf–Verhalten des $StV4$ –Verfahrens bei N-Körper System (Gas)

Es soll das in Mathematische Grundlagen, Teil 7 auf S.20 vorgestellte N-Körper System bei Lennard-Jones-Abstandspotentialen numerisch behandelt werden. Dabei wird die Bewegung von $N^2=11 \times 11=121$ (bzw. $N^2=21 \times 21=441$) Teilchen der Masse 1 betrachtet, welche anfangs gleichmäßig über das (ebene) Quadrat $[-1,1] \times [-1,1]$ verteilt sind und eine Zufalls-Geschwindigkeit (Zufalls-Impuls) besitzen. Zwischen den Körpern wirken Kräfte aus einem Lennard-Jones-Potential. Als Schrittweite wird $\Delta t = 0.01$ gewählt, und 200 (400, 800, 1200) Schritte werden vollzogen. Danach wird mit den erreichten Orten und den negativ gesetzten Geschwindigkeiten (Impulsen)

die Bewegung mit der gleichen Anzahl von Schritten fortgesetzt : Es zeigt sich, dass das System wegen der Zeit- Reversibilität des numerischen Verfahrens wieder¹ in seinen Anfangszustand zurückläuft.

Die Bewegungen (Ortskoordinaten) sollen stets in einem Bereich mit endlichem Radius $r=1,5$ stattfinden. Um ein Auseinanderlaufen der Teilchen zu verhindern, wird die Hamilton-Funktion des Lennard-Jones-Potentials

$$H(q_1; \dots; q_N; p_1; \dots; p_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^T \cdot p_i + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N (\|q_i - q_j\|^{-12} - 2 \cdot \|q_i - q_j\|^{-6}) \right)$$

um den Zusatzterm²

$$H(q_1; \dots; q_N; p_1; \dots; p_N) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r^2 - q_i^T \cdot q_i}$$

erweitert. Dieser Zusatzterm bewirkt, dass ein Körper bei Annäherung (von innen) an den Rand des Kreises mit Radius r eine starke (zusätzliche) Rück-Beschleunigung in Richtung Ursprung erfährt und somit den Rand nicht überschreiten kann³.

Die in den theoretischen Teilen sehr nützliche⁴ Schreibweise der resultierenden Hamilton-Dgl in untereinanderbeschriebener Vektor-Form (mit Gesamt-Orts-Vektor, Gesamt-Impuls-Vektor, Masse-Matrix)

$$\frac{d}{dt}(q(t); p(t)) = J \cdot H'^T(q(t); p(t))$$

erweist sich hier als etwas ungünstig hinsichtlich der Brechnung des Kraft-Vektors

$$-\left(\sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N \varphi_{LJ}(\|q_i - q_j\|) \right) \right)'^T =$$

$$= \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N K_{ij}(q_1(t); \dots; q_N(t)) & & \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}_{N \cdot d, 1}$$

mit

$$K_{ij}(q(t); \dots; q(t)) = (q_i(t) - q_j(t)) \cdot \frac{-\varphi'_{LJ}(\|q_i(t) - q_j(t)\|)}{\|q_i(t) - q_j(t)\|} .$$

Um die benötigten Einzel-Orte q_i aus dem Gesamt-Orts-Vektor

$q(t) := (q_1(t); \dots; q_N(t))_{N \cdot d, 1}$ herauszufiltern, ist eine aufwändige Indexrechnung nötig.

¹ Der hohe Rechenaufwand (s.u.) führt, maschinenbedingt durch Rundungsfehler bei Rechnung in Fließpunkt-Arithmetik, zu einem gewissen Stellenverlust (s. S.81). Dieser ist jedoch vorhersagbar und kann, wenn bestimmte vorgegebene Genauigkeit im Rücklauf-Ergebnis gefordert wird, über endliche Zeiten ausgeglichen werden, indem gegebenenfalls statt der Standard-Arithmetik von 18 Stellen eine solche mit erhöhter Stellenzahl eingesetzt wird.

² Dieser Zusatzterm stört die Rückstoß-Invarianz nicht.

³ Über Abhilfe, falls der Rand doch überschritten werden sollte, vgl. Zusätze S.80, unter "Tunneln".

⁴ Der Vorteil lag in der geschlossenen Darstellung der rechten Dgl-Seite als Struktur-Matrix*(vollem) Gradienten von H anstelle der hier verwendeten partiellen Gradienten nach p_i , und dann der negativen partiellen Gradienten nach q_i .

Angenehmer im Hinblick auf die Anordnung der Einzel-Orte und auf die in MatLab vorgegebenen Möglichkeiten stellt sich die Hamilton-Dgl in Matrixform dar :

Ausgang ist jetzt die Schreibweise des Hamilton-Dgl-Systems in der Form

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i(t) &= p_i(t) \cdot \frac{1}{m_i} \\ \frac{d}{dt} p_i(t) &= -V_{q_i}^T(q_1(t); \dots; q_N(t)) \end{aligned} \quad (i = 1, \dots, N) .$$

für die einzelnen Orte $q_i(t)$ und Impulse $p_i(t)$.

Fasst man

alle Ortsvektoren $q_i(t)$ in einer Ortsmatrix⁵ $Q(t)$

$$Q(t) := (q_1(t), \dots, q_N(t))_{d,N} ,$$

alle Impulsvektoren $p_i(t)$ in einer Impulsmatrix

$$P(t) := (p_1(t), \dots, p_N(t))_{d,N} ,$$

alle Geschwindigkeitsvektoren $p_i(t) \cdot \frac{1}{m_i}$ in einer Geschwindigkeitsmatrix

$$G(P(t)) := (p_1(t) \cdot \frac{1}{m_1}, p_2(t) \cdot \frac{1}{m_2}, \dots, p_N(t) \cdot \frac{1}{m_N})_{d,N}$$

und

alle auf den i-ten Körper (von den anderen Körpern) ausgeübten Kräfte

$-V_{q_i}^T(q_1, \dots, q_N) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N K_{ij}(q_1(t), \dots, q_N(t))$ in einer (Lennard-Jones-)Kraftmatrix $K_{LJ}(Q(t))$

$$K_{LJ}(Q(t)) := \left(\sum_{j=2}^N K_{1j}(Q(t)), \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^N K_{1j}(Q(t)), \dots, \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq N}}^{N-1} K_{Nj}(Q(t)) \right)_{d,N} \quad (*)$$

zusammen, so lässt sich das Hamilton-Dgl-System in folgender Matrix-Form

$$\frac{d}{dt}(Q(t), P(t))_{d,2N} = (G(P(t)), K_{LJ}(Q(t)))_{d,2N}$$

schreiben, wobei im Falle, dass alle Körper Einheitsmasse besitzen, noch vereinfachend gilt :

$$\frac{d}{dt}(Q(t), P(t))_{d,2N} = (P(t), K_{LJ}(Q(t)))_{d,2N} .$$

Die Eigenschaften der Lösung werden durch diese Schreibweise nicht verändert, jedoch ist der Ort bzw. der Impuls des i-ten Körpers jetzt einfach die gesamte i-te Spalte der Ortsmatrix, bzw. der Impulsmatrix. Diese Schreibweise erlaubt in MatLab die Verwendung von 3-dim Matrizen z.B. $K_{ij} \in \mathbb{R}^{d \times 2}$ und das Operieren⁶ mit ihnen.

⁵ Die Orte der einzelnen Körper werden (nicht wie im theoretischen Teil untereinander, sondern nebeneinander geschrieben. – Dieser Übergang von der Untereinander-Schreibweise = Vektor-Form in die Nebeneinander-Schreibweise = Matrix-Form lässt sich nur verbal beschreiben (Es gibt keine mathematische Beschreibung in Matrizen-Operationen, um die Vektor-Form in die Matrix-Form überzuführen).

⁶ Aus der 3-dim Matrix K_{ij} entsteht durch Summation über den 3. Index j die Kraftmatrix K_{LJ} , vgl. (*). Vgl. auch auf S.74 die Berechnung der LJKraftMatrix in LJKraftMatrix.m

Bemerkung zum Rechenaufwand :

Befinden sich im Einheitsquadrat N^2 -viele Teilchen, so wird die Ermittlung von $N^4/2$ -Abstandskräften benötigt (Jedes Teilchen übt auf die anderen eine Kraft aus, mit Symmetrie): Ein Störmer-Verlet-Schritt verlangt zwei⁷ solcher Kraftbestimmungen, ein StV4-Iterationsschritt (drei Störmer-Verlet-Schritte) also $3 \cdot 2$

Kräftebestimmungen, insgesamt also $3 \cdot N^4$ -Berechnungen von Abstandskräften pro StV4-Iterationsschritt. Dies sind bei $11 \times 11 = 121$ (bzw. $21 \times 21 = 441$) Teilchen 45.000 (bzw. 600.000) Kräfteberechnungen je Iterationsschritt. Dafür braucht eine 500MHz-PC etwa 5 (bzw. 65) Sekunden je Schritt, also bei 200 Vorwärts- und Rückwärts-Schritten insgesamt 30 Minuten (bzw. 7,2 Stunden).

2) Programm-Schema für N-Koerper (Gas)

Die Programme und (Funktions-)Unterprogramme haben folgenden Aufbau :
(Der Programmtext ist in den mit `***.m` bezeichneten Dateien abgelegt.)

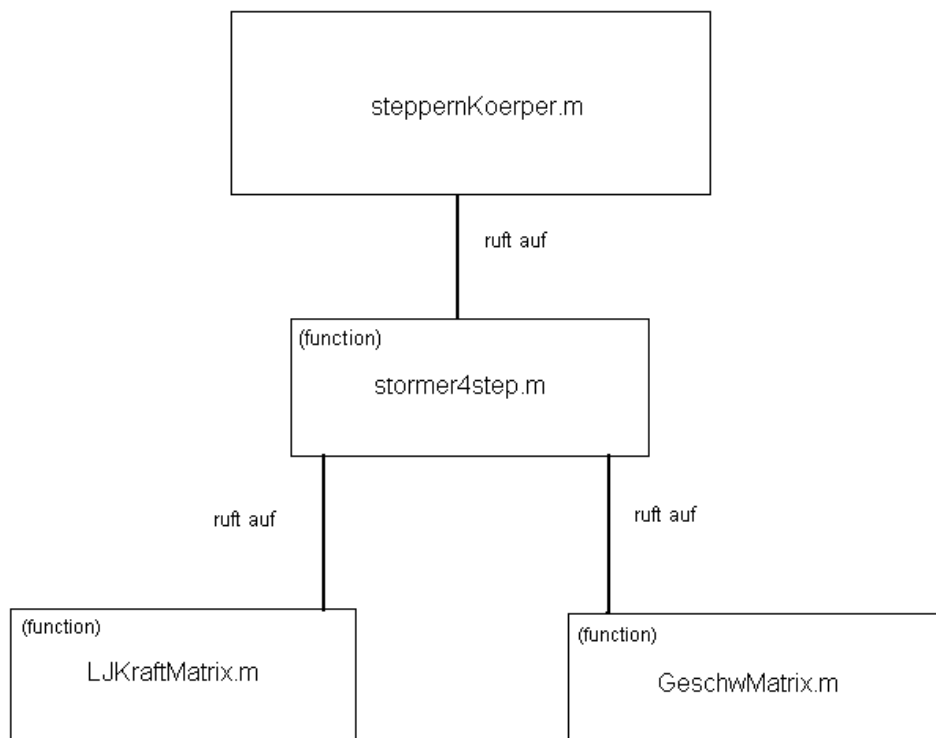


Abbildung 3.1 : Programm-Schema für N-Koerper (Gas).

<C:\Doku.u.Einst.\Adm.\Eigene Dateien\Eigene Bilder\PrgrSchemanKoerper.tif>

⁷ Bei Wahl der StV-Varianten S.53 nur eine Kraftbestimmung.

3) Programm-Quell-Text (Gas)

Das MatLab-Steuer – Programm (steppernKoeper.m) :

Aufgabe : Verwaltung der Iterationsschritte, TeilchenAnzahl, Startwerte. Iterativer Aufruf des *StV4*-Verfahrens in *stomer4step.m*, Ergebnissicherung, PlotAusgabe.
(work\HSnbody\steppernKoeper.m)

```
% Das N-Körper-Problem im IR2 mit Kräften aus Lennard - Jones - Potentialen
%
% Funktion :
% Verwaltung : Iterationsschritte, TeilchenAnzahl, Startwerte,
% iterativer Aufruf des STV4-Verfahrens, Ergebnissicherung, PlotAusgabe
% (Datum : 03.12.2009) / K.S.

% Bemerkungen :
% Bei Benutzung sind TeilchenAnzahl (N) und Schrittanzahl (itn) vorzugeben
% Bei TeilchenAnzahl > 100 und SchrittAnzahl > 200 :
% Laufzeit von mehreren Stunden.

tic;
clear;
clc;

%*Konstanten*****

% Anzahl der Iterationen
itn=1200;
% Schrittweite der Diskretisierung
dt=0.001;

% die Ortsbewegungen beschränkender Kreis mit GrenzRadius 1.5
kr=linspace(0,2*pi);
GrenzRadius=1.5;

% Erzeugen der Anfangswerte
% a)AnfangsOrteMatrix qn der N X N vielen Körper,
%   gleichverteilt im EinheitsQuadrat des IR2.

% lineare Anzahl der Körper
N=21;
%(linearer) Abstand der Körper
Abst=2/(N-1);

for i=1:N
    for j=1:N
        qn(:,i+(j-1)*N)=[-1+(i-1)*Abst;-1+(j-1)*Abst];
    end
end

% b)AnfangsImpulseMatrix der N X N vielen Körper,
%   zufällig mit 5 NachkommaStellen in [-1,1]X[-1,1].
pn=fix( rand(2,N*N)*10^5 )*10^(-5)*2-ones(2,N*N);

% c)MassenVektor der N X N vielen Körper
%   (voreingestellt jeder Körper hat Einheitsmasse)
massen=ones(1,N*N);
```

```

%*Programm**Iteration*****

% Festhalten der Startwerte
qnStart=qn;
pnStart=pn;

% Iterierte Ausführung eines StV4-Schrittes (VorwärtsRechnung)
for i=1:itn
    disp(['Zur Zeit wird ausgeführt die ',int2str(i),'-te' ...
          'Vorwärtsiteration von ',int2str(itn),'. ']);
    [qn,pn] = stormer4step(qn,pn,massen,dt);
end %[VorwärtsRechnung]

% Festhalten der MitteWerte
qnMitte=qn;
pnMitte=pn;

disp('_____');
disp('Ab hier Rückrechnung');
disp('_____');

% Fortsetzung mit umgekehrten Impulsen
qn= qnMitte;
pn=-pnMitte;

% Iterierte Ausführung eines StV4-Schrittes (RückwärtsRechnung)
for i=1:itn
    disp(['Zur Zeit wird ausgeführt die ',int2str(i),'-te' ...
          'Rückwärtsiteration von ',int2str(itn),'. ']);
    [qn,pn] = stormer4step(qn,pn,massen,dt);
end %[RückwärtsRechnung]

% Festhalten der EndWerte
qnEnd=qn;
pnEnd=pn;

%*Dokumentation*****

disp('GESAMTFEHLER')
diffOrt    = qnEnd-qnStart;
diffImpuls=-pnEnd-pnStart;

disp('Die Differenz von Endwert - Startwert ist :')
disp('  OrtsDifferenz      |      ImpulsDifferenz ')
[diffOrt', diffImpuls']

disp('Der mittlere Ort- und Impuls-Fehler ')
mittFehlerOrt=sqrt(trace(diffOrt'*diffOrt))/N^2
mittFehlerImpuls=sqrt(trace(diffImpuls'*diffImpuls))/N^2

% Ergebnis in 2-dim. graphischer Darstellung
figure('Name','Start- und End-Orte')
% beschränkender Grenzkreis (schwarz)
plot(GrenzRadius*cos(kr),GrenzRadius*sin(kr),'k. ');
hold on;
% StartOrte (rot)
plot(qnStart(1,:),qnStart(2:,:),'r. ');

```

```

hold on;
% EndOrte (grün)
plot(qnEnd(1,:),qnEnd(2:3),'go');
title(['Orte mit Begrenzung(schwarz) am Anfang(rot) und am Ende(grün) '...
      'bei ',int2str(itn),'vor/',int2str(itn),'rück']);
grid;

figure('Name','Start- und End-Geschwindigkeiten')
% StartGeschwindigkeiten (rot)
plot(pnStart(1,:),pnStart(2:3),'r. ');
hold on;
% (neg.)EndGeschwindigkeiten (grün)
plot(-pnEnd(1:3),-pnEnd(2:3),'go')
title(['Geschwindigkeiten am Anfang(rot) und am Ende(grün) '...
      'bei ',int2str(itn),'vor/',int2str(itn),'rück']);
grid;

%*ENDE steppernKoerper.m*****
toc

```

Zum Funktionsaufruf `stormer4step(qn,pn,massen,dt)` (`stormer4step.m`) :
 Aufgabe : Führt einen Störmer-Verlet4-Schritt aus durch 3 gewöhnliche Störmer-Verlet-Schritte mit vorgegebenen Teil-Schrittweiten.
 (`work\HSnbody\stormer4step.m`)

```

function [stormer4step_qn,stormer4step_pn] = lokinParam(qn,pn,massen,dt)
%
% Funktion :
% Führt einen stormer4Schritt für die n-Körper-Dgl
% (Q(t),P(t))'=(GeschwMatrix(P(t),massen),LJKraftMatrix(Q(t))) durch.
% In den Q(t):=(q1(t),...,qn(t))-Spalten stehen die Orte
% der 1,...,N Körper,
% In den P(t):=(p1(t),...,pn(t))-Spalten stehen die Impulse
% der 1,...,N Körper.
% Die Geschw(indigkeits)Matrix(P(t),massen)wird in GeschwMatrix.m berechnet
% Die LJKraftMatrix(Q(t)) wird in LJKraftMatrix.m berechnet.
% (Datum : 03.12.2009) / K.S.

%*Funktion*stormer4step*****
% Ein Störmer4Schritt sind drei StörmerSchritte mit Parametern w(i)
% Konstanten aus w(1)=w(3)=1/(2-2^(1/3));w(2)=-2^(1/3)/(2-2^(1/3))
w(1)= 1.35120719195966;
w(2)=-1.70241438391932;
w(3)=w(1);

for i=1:3
pn=pn+LJKraftMatrix(qn)*w(i)*dt/2;

qn=qn+GeschwMatrix(pn,massen)*w(i)*dt;
pn=pn+LJKraftMatrix(qn)*w(i)*dt/2;
end

% Endwerte der function
stormer4step_qn = qn;
stormer4step_pn = pn;

%*ENDE stormer4step.m*****

```

Zum Funktionsaufruf LJKraftMatrix(qn) (LJKraftMatrix.m) :

Aufgabe : Berechnet aus den Spalten der OrtsMatrix (in den Spalten stehen die Orte der Teilchen) die LJKraftMatrix (in den Spalten steht die Gesamtkraft auf die einzelnen Teilchen)

(work\HSnbody\LJKraftMatrix.m)

```
function LJKraftMatrix_OrtsMatrix =lokinParam(OrtsMatrix)
%
% Funktion :
% Berechnet
% aus OrtsMatrix=(q1,...,qn) - in den Spalten die Orte der Teilchen i -
% die LJKraftMatrix=(K1,...,Kn)-in den Spalten die Kraft auf das Teilchen i
% (Datum : 03.12.2009) ./.. K.S.
%
% Bemerkung :
% Die Zwischengröße LJKraft ist keine 2-D-Matrix,
% sondern eine (dimort,AnzahlTeile,AnzahlTeile)-Matrix (3-D-Matrix) :
% Diese Anordnung der Indizes (:,i,j) vereinfacht die Summation sum :
% Eine Summation über den 3.Index einer 3-D-Matrix ergibt
% eine 2-D-Summenmatrix (übliche Matrix)
% (d.h. es wird summiert und squeeze-vgl.MatLab-Hilfe- ausgeführt)
%
%
%*Funktion*Lennard-Jones-KraftMatrix_OrtsMatrix*****
%
%
[dimort,AnzahlTeile]=size(OrtsMatrix);

SkalierFaktor=(AnzahlTeile-1)/2;

for i=1:AnzahlTeile
    % Die Rückkraft (in Richtung Ursprung) tritt auf beim Sich-Nähern
    % an den Kreis mit Radius r=1.5
    LJKraft(:,i,i) = -OrtsMatrix(:,i)/...
        SkalierFaktor^4*( 1/(1.5^2-OrtsMatrix(:,i)'OrtsMatrix(:,i))^2 );
    % Berechnung der untereinander erzeugten Kräfte
    % aus Lennard - Jones -Potential
    for j=i+1:AnzahlTeile
        dij=OrtsMatrix(:,i)-OrtsMatrix(:,j);
        d2ij=dij'*dij*SkalierFaktor^2;
        % Ortsdifferenz*(LJ-Faktor fakij(phiLJ));
        LJKraft(:,i,j)=dij*12*(d2ij^(-7)-d2ij^(-4));
        LJKraft(:,j,i)=-LJKraft(:,i,j);
    end
end

% Summation über 3.Index von LJKraft ergibt LJKraftMatrix
LJKraftMatrix_OrtsMatrix = sum(LJKraft,3);
%
%
%*ENDE LJKraftMatrix.m*****
```

Zum Funktionsaufruf GeschwMatrix(pn,massen) (GeschwMatrix.m) :

Aufgabe : Berechnet aus den Spalten der ImpulsMatrix (in den Spalten stehen die Impulse der Teilchen) und den Massen der Teilchen die GeschwindigkeitsMatrix (in den Spalten stehen die Geschwindigkeiten der Teilchen)

(work\HSnbody\GeschwMatrix.m)

```
function
GeschwMatrix_ImpulsMatrix_MasseVektor=lokinParam(ImpulsMatrix,MasseVektor)
%
% Funktion :
% Berechnet
% aus ImpulsMatrix=(p1,...,pn) - in den Spalten die Impulse der Teilchen i-
% und
% aus MassenVektor=(m1,...,mn) - Aufzählung der Massen der Teilchen i -
% die GeschwMatrix=(p1/m1,..,pn/mn)-in den Spalt die Geschw. der Teilchen i-
% (Datum : 03.12.2009) ./ K.S.
%
%
%*Funktion*Geschw(indigkeits)Matrix_ImpulsMatrix_MasseVektor*****
%
%
GeschwMatrix_ImpulsMatrix_MasseVektor = ...
                                ImpulsMatrix * inv(diag(MasseVektor));
%
%
%*ENDE GeschwMatrix.m*****
```

4) Rechen-Beispiele (Gas)

Bewegung im Lennard-Jones-Potential von 21 X 21 gleichmäßig verteilten Teilchen mit Zufallsstartgeschwindigkeiten, nach 1200 Schritten Vorlauf und Rücklauf, Anfangszustand rot; Endzustand grün.

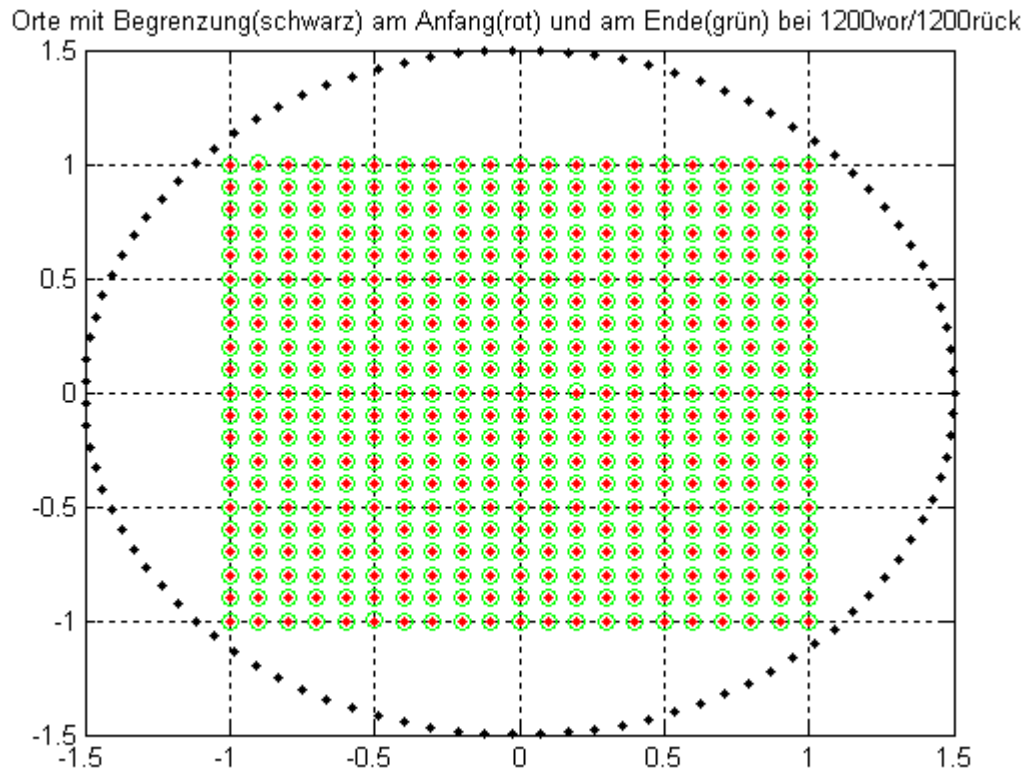


Abbildung 3.2a : 21X21 gleichmäßig im Einheitsquadrat verteilte Teilchen bei Start (rot) und nach Rücklauf (grün) (1200 Schritte vor und zurück).
(work\nbody\st20021X21erste.bmp)

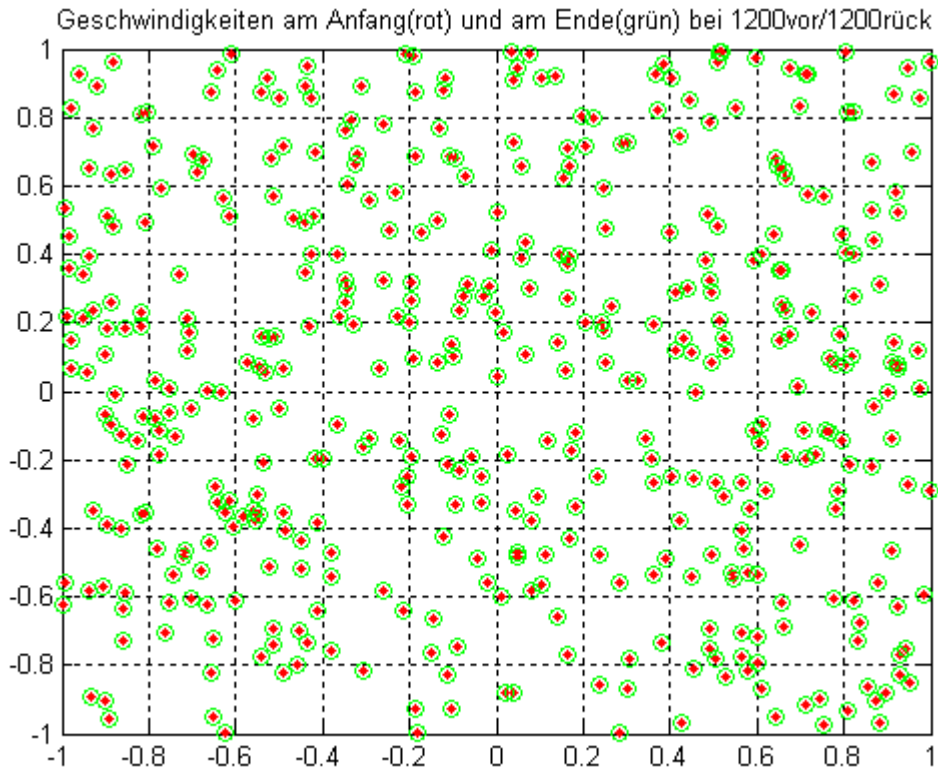


Abbildung 3.2b : Zufallsgeschwindigkeiten bei Start (rot) und Rücklauf (grün).
 (work\nbody\st20021X21zweite.bmp)

Bewegungsspur einiger Teilchen zwischendurch

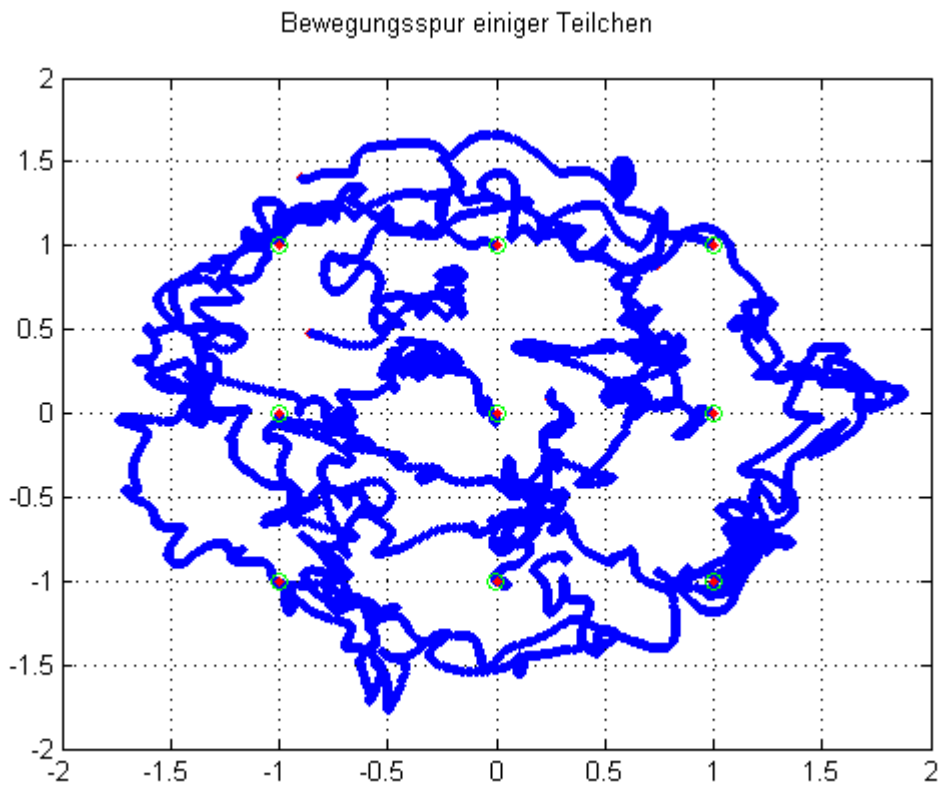


Abbildung 3.2c : Bewegungsspur einiger Teilchen (blau).
 (work\LJ+Rückvrb.bmp)

Eine vielleicht mehr beeindruckende Darstellung der Zeit-Reversibilität stellt die Bewegung von $11 \times 11 = 121$ Teilchen dar, wenn ein asymmetrischer Anfangszustand gewählt wird :

Alle Teilchen befinden sich anfangs ruhend im rechten oberen Teil des 1.5-Kreises. Nach 2400 Schritten Vorlauf, Impuls-Umkehr und weiteren 2400 Schritten Rücklauf sind sie alle(!) wieder im rechten oberen Teil versammelt.

(Bemerkung:

Mit `work\HSnbody\steppernKoerperasym.m` GrenzÜberläufer manuell auf 0,0 setzen)

Bemerkung :

Dieses Ergebnis ist im Einklang mit der Newton-Beschreibung der Bewegung und kann durch das zeitreversible *StV4*-Verfahren im Computer nachgebildet werden. Die (Fast-)Unmöglichkeit, dies auch im realen Experiment aufzuzeigen, liegt an der experimentellen Schwierigkeit, alle Geschwindigkeiten gleichzeitig umzukehren.

Start-Zustand von 121 im rechten oberen Teil des Kreises ruhenden Teilchen (rot)

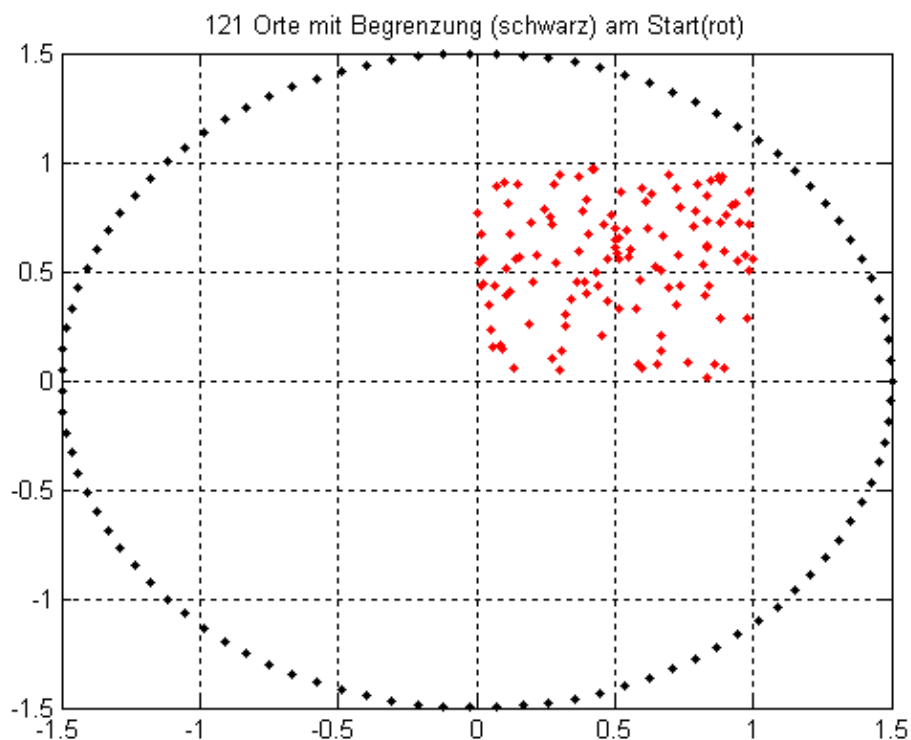


Abbildung 3.3a : Bei Start asymmetrisch verteilte 11×11 Teilchen (rot).
([work\HSnbody\asymstart121.bmp](#))

Ort der 121 Teilchen im Lennard-Jones-Potential nach 2400 numerischen *StV4*-Schritten

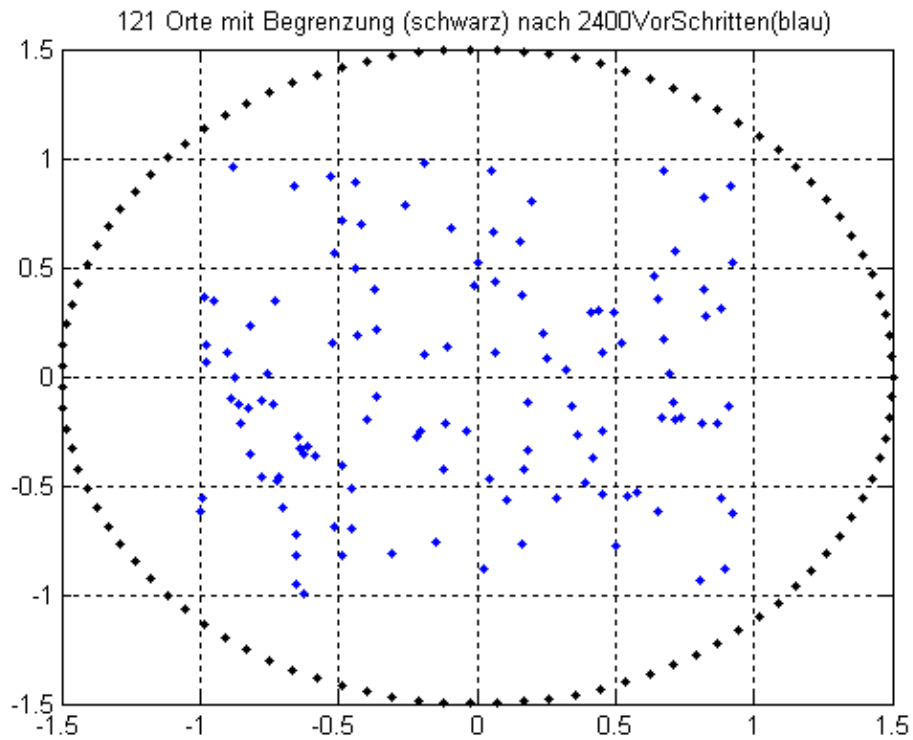


Abbildung 3.3b : Im Kreis mit $r = 1.5$ verteilte Teilchen nach 2400 Schritten (blau).
(work\HSnbody\asymmitte121verb.bmp)

Nach Geschwindigkeitsumkehr und weiteren 2400 numerischen *StV4*-Schritten erreichter Endzustand :

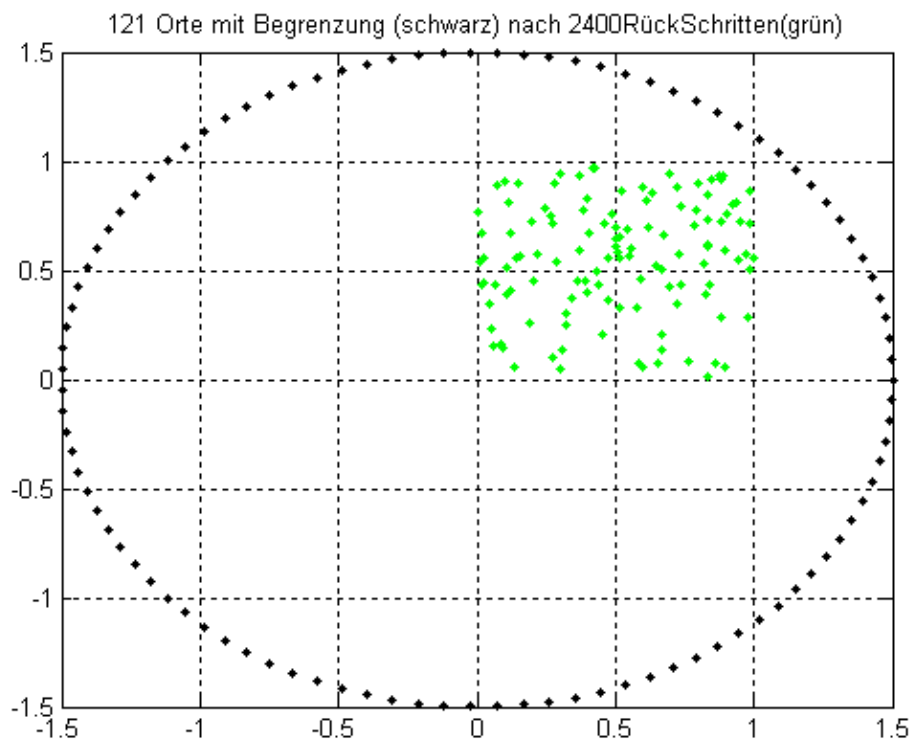


Abbildung 3.3c : Nach weiteren 2400 Schritten Rücklauf (grün).
(work\HSnbody\asymende121)

5) Zusätze (Gas)

Mögliche (unphysikalische) Erscheinungen beim numerischen Rechnen :

Durchdringung :

Es kann (selten) vorkommen, dass sich zwei Körper auf ihren diskreten numerischen Punktwegen (als angenommene gradlinige Verbindung zwischen den diskreten Orten) kreuzen und sogar durchdringen. Physikalisch ist das bei einem Lennard-Jones-Potential nicht möglich, da bei Annäherung beliebig große Abstoßkräfte entstehen.

Überwindung des Randes ("Tunneln") :

Es kann der Fall auftreten, dass ein Körper das gewählte Randpotential

$$\frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N \frac{1}{r^2 - q_i^T \cdot q_i}$$

(trotz beliebig hoher möglicher Rückstoßkraft $-\frac{q_i}{(r^2 - q_i^T \cdot q_i)^2}$ ($|q_i| \approx r$))

in der numerischen Rechnung überwindet.

Der Grund für das Auftreten dieser Erscheinung bei der numerischen Rechnung ist, dass die sich (während des Zeitschrittes Δt) ändernden Abstoßkräfte in einer diskreten numerischen Rechnung nicht beachtet werden können : Der nächste diskrete Ort wird numerisch ja nur unter Beachtung der Verhältnisse zu Anfang des Zeitschrittes berechnet; eine Berücksichtigung der sich zwischenzeitlich ergebenden Veränderungen findet nicht statt. Insbesondere kann also bei Annäherung eines Teilchens an den Rand mit hoher Geschwindigkeit (verursacht durch die Paar-Kräfte) die oben angegebene Rückstoßkraft zu klein sein, um insgesamt die Geschwindigkeit umzukehren. Als Gegenmittel bei Auftreten dieser unphysikalischen Erscheinung ("Tunneln") kann gewählt werden entweder

- 1) Neustart mit Zeitschritt-Verkleinerung (so dass dann die sich ändernden Verhältnisse auch in der numerischen Rechnung besseren Eingang finden, allerdings mit dem Nachteil der erhöhten Laufzeit)

oder

- 2) man wählt ein Randpotential der Form (mit $p \geq 1$ einer geeigneten Potenz)

$$\frac{1}{2} \cdot \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r^2 - q_i^T \cdot q_i} \right)^p \text{ mit der erhöhter Rückstoßkraft } -\frac{q_i}{(r^2 - q_i^T \cdot q_i)^{p+1}} \cdot p \quad (|q_i| \approx r).$$

Die erhöhte zum Zentrum gerichtete Rückstoßkraft bewirkt bei Randannäherung, dass eine nach außen gerichtete Geschwindigkeit (aus den Paar-Kräften) und die nach innen gerichtete Geschwindigkeit (aus der erhöhten Rückstoßkraft) insgesamt nach innen gerichtet ist, so dass das Teilchen also den beschränkten Bereich nicht verlässt.

Festgestellte Unterschiede zwischen Anfangs- und Rückkehrwerten (Stellenverlust) :

In Abhängigkeit von der Körperanzahl N^2 und den Iterationsschritten itn wurden zwischen Anfangswerten und Rückkehrwerten bei Verwendung des *StV4*-Verfahrens folgende Fehler (bedingt durch die 18-stellige Fließpunkt-Arithmetik bei Computerrechnung) festgestellt :

Tabelle

(N^2 Teilchen benötigen bei je itn vielen Vor- und Rückschritten in *StV4*-Verfahren $3 \cdot N^4 \cdot 2 \cdot itn$ viele Kräfteauswertungen)

Anzahl Körper	Kräfteauswertungen	Genau von 10^{-18}	Genauigkeitsverlust
121	$3 \cdot 121^2 \cdot 2^* 200 \sim 18 \cdot 10^6$	auf 10^{-17}	1/60 Dez.Stelle / 10^6 Rop
121	$3 \cdot 121^2 \cdot 2^* 400 \sim 36 \cdot 10^6$	auf 10^{-17}	1/65 Dez.Stelle / 10^6 Rop
121	$3 \cdot 121^2 \cdot 2^* 800 \sim 70 \cdot 10^6$	auf 10^{-16}	1/60 Dez.Stelle / 10^6 Rop
121	$3 \cdot 121^2 \cdot 2^* 1200 \sim 105 \cdot 10^6$	auf 10^{-15}	1/70 Dez.Stelle / 10^6 Rop

Anzahl Körper	Rechenoperationen*Schritte	Genau von 10^{-18}	Genauigkeitsverlust
441	$3 \cdot 441^2 \cdot 2^* 200 \sim 230 \cdot 10^6$	auf 10^{-15}	1/76 Dez.Stelle / 10^6 Rop.
441	$3 \cdot 441^2 \cdot 2^* 400 \sim 466 \cdot 10^6$	auf 10^{-13}	1/93 Dez.Stelle / 10^6 Rop
441	$3 \cdot 441^2 \cdot 2^* 800 \sim 933 \cdot 10^6$	auf 10^{-8}	1/85 Dez.Stelle / 10^6 Rop
441	$3 \cdot 441^2 \cdot 2^* 1200 \sim 1400 \cdot 10^6$	auf 10^{-3}	1/94 Dez.Stelle / 10^6 Rop

Bemerkung :

Die Genauigkeitsverluste beim praktischen Rechnen gegenüber der theoretisch gesicherten exakten Rückkehr beruhen im Wesentlichen auf der bekannten "Auslöschung" bei der Summation von Zahlen verschiedener Größenordnung (hier Phasenraumpunkt plus wesentlich kleinerer Veränderung).

Mit sogenannten reduce-round-off-error-Techniken kann den Genauigkeitsverlusten entgegengewirkt werden [Pap,2006 S.47ff]. Die Verbesserung liegt dann, in Kommastellen gemessen, in der Größenordnung der Nachkommastellen der gewählten Schrittweite [HLW,2002 S.323].

MatLab Rechnungen T-Rohr-Anordnung

In diesem Teil soll (für verschiedene Parameter ε , m_1 , m_2 und Startwerte) zunächst das Bewegungsverhalten der beiden Körper in der T-Rohr-Anordnung mit dem *StV4*-Verfahren berechnet werden. Ausgangspunkt ist die Dgl in der reduzierten Form (in generalisierten Koordinaten) (vgl. Mathematische Grundlagen, Teil 9, S.27 in ihrer für numerische Rechnungen angenehmen Matrixschreibweise :

$$\frac{d}{dt}(Q(t), P(t))_{1,2,2} = (G(P(t)), K_N(Q(t)))_{1,2,2} \cdot$$

Dabei ist

$$Q(t) := (Q_1(t), Q_2(t))_{1,2} \text{ die Ortsmatrix,}$$

$$P(t) := (P_1(t), P_2(t))_{1,2} \text{ die Impulsmatrix,}$$

$$G(P(t)) := (P_1(t) \cdot \frac{1}{m_1}, P_2(t) \cdot \frac{1}{m_2})_{1,2} \text{ die Geschwindigkeitsmatrix}$$

und

$$K_N(Q(t)) := (Q_1(t) \cdot \frac{-\varepsilon}{(Q_1(t)^2 + Q_2(t)^2)^{3/2}} - Q_1(t) \cdot \frac{k}{(1 - Q_1(t)^2)^p}, \\ Q_2(t) \cdot \frac{-\varepsilon}{(Q_1(t)^2 + Q_2(t)^2)^{3/2}} - (Q_2(t) - 1.1) \cdot \frac{k}{(1 - (Q_2(t) - 1.1)^2)^p})_{1,2}$$

die aus dem Newton–Potential stammende generalisierte Kraftmatrix, einschließlich der (Geometrie-bedingten) Zwangskräfte und den Kräften, die das Verbleiben in den Begrenzungen garantieren.

Die Bedeutung der Parameter :

$\varepsilon > 0$ bedeutet anziehende, $\varepsilon < 0$ abstoßende Paar-Kraft zwischen den Körpern.

$k > 0$ (klein) und $p = 2$ (evtl. zu erhöhen) bestimmen die (ausreichende) weiche Rückstoßkraft an den Intervallenden.

Mit zulässigen Anfangswerten

$Q_1(0) \in [-1; +1]$, $Q_2(0) \in [0.1; 2.1]$, $P_1(0)$ $P_2(0)$ wird nun eine Lösung von

(Hamilton-)Dgl mit Rückholkräften an den Intervallenden
Anfangswerte

numerisch mit dem langzeitstabilen *StV4*-Verfahren berechnet.

1) Behandlung des Rückstoßes (T-Rohr)

In Abhängigkeit von auftretenden (größeren) Impulsen (bzw. Geschwindigkeiten) ist es nicht möglich, für wechselnde Massen-, Anfangs-Impuls- und Schrittweite- Wahlen ein gemeinsames k und p für die Rückholkräfte zu finden, so dass die Körper an den Intervallenden immer sicher zurückgestoßen werden (um Intervall-Überschreitungen (Tunnel-Effekte) sicher zu verhindern).

Ein anderer Gesichtspunkt ist die Schwierigkeit, die Konstanz der Gesamtenergie (Hamilton-Funktion) vor und nach jedem Rückstoß sicherzustellen, insbesondere wenn Simulations-Zeiten von Wochen mit mehr als 10^6 Rückstoß-Aktionen berechnet werden sollen.

Um beide Probleme des Rückstoßes bei der Simulation in den Griff zu bekommen, werden die weichen Rückstöße, verursacht durch an den Intervallenden auftretende Potentialkräfte, zweckmäßig durch harte Rückstöße ersetzt .

Dies geschieht in der Weise, dass der Rückstoß nicht durch an den Intervallenden auftretende Kräfte gesteuert wird, sondern durch einen Abfrage-Mechanismus in der Dgl, der bei Randübertritt (in einer Ortskoordinate) jeweils einen neuen Anfangswert setzt : Dabei wird bei Randübertritt der zugehörige Impuls (Geschwindigkeit) negativ gesetzt, so dass die Ortskoordinate wieder in ihr vorgesehene Intervall zurückläuft.

Ausgang ist also jetzt die Hamilton-Funktion (Gesamtenergie)

$${}_{trans}H(Q_1; Q_2; P_1; P_2) = \frac{P_1^2}{2 \cdot m_1} + \frac{P_2^2}{2 \cdot m_2} - \frac{\varepsilon}{\|e_1 \cdot Q_1 - e_2 \cdot Q_2\|}$$

(ohne die Rückhol-Potentiale $\left(\underbrace{\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1-Q_1^2}}_{\text{Rückholpotential bei } \pm 1} + \underbrace{\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1-(Q_2-1.1)^2}}_{\text{Rückholpotential bei 0.1 u. 2.1}} \right)$).

Das bei Rückstoß verwendete Negativ-Setzen des Impulses erhält den Wert dieser zeitreversiblen Hamilton-Funktion.

Es wird also eine (numerische) Lösung errechnet von :

$$\begin{aligned}\dot{Q}_1(t) &= P_1(t) \cdot \frac{1}{m_1} \\ \dot{Q}_2(t) &= P_2(t) \cdot \frac{1}{m_2} \\ \dot{P}_1(t) &= -\frac{\varepsilon \cdot Q_1(t)}{(Q_1^2(t) + Q_2^2(t))^{3/2}} \\ \dot{P}_2(t) &= -\frac{\varepsilon \cdot Q_2(t)}{(Q_1^2(t) + Q_2^2(t))^{3/2}}\end{aligned}\quad (\text{Dgl})$$

$$\begin{aligned}Q_1(0) &\in [-1; +1] \\ Q_2(0) &\in [0.1; 2.1] \\ P_1(0) & \\ P_2(0) &\end{aligned}\quad (\text{zulässige Awe})$$

Dazu die Randwertabfragen (während der Rechnung)

$$\begin{aligned}\text{Falls } |Q_1(t)|=1, & \quad \text{fahre mit } \begin{pmatrix} Q_1(t) \\ Q_2(t) \\ -P_1(t) \\ P_2(t) \end{pmatrix} \text{ fort.} \\ \\ \text{Falls } |Q_2(t)-1.1|=1 & \quad \text{fahre mit } \begin{pmatrix} Q_1(t) \\ Q_2(t) \\ P_1(t) \\ -P_2(t) \end{pmatrix} \text{ fort.}\end{aligned}$$

Als Bezeichnung für dieses (durch Abfrage gesteuerte) Rückstoß-Verfahren wird gewählt : "numerisches Verfahren mit hartem Rückstoß an den Intervallenden".

2) Typisches Langzeit-Verhalten der numerischen Dgl-Lösungen (T-Rohr)

Als generelle Voraussetzung bezüglich der Massen m_i soll gelten :

Die zwei Massen der Körper sind unterschiedlich , u.z.

$$m_1 = m_{Kx} \text{ (Masse des Körpers auf der x-Achse)} <$$

$$< m_2 = m_{Ky} \text{ (Masse des Körpers auf der y-Achse),}$$

d.h. Kx ist leicht und Ky ist schwer.

Für die kinetischen Energien gelte beim Start

$$kinEn_{Kx}(Start) < kinEn_{Ky}(Start) ,$$

also

$$\frac{P_1^2(0)}{2 \cdot m_1} < \frac{P_2^2(0)}{2 \cdot m_2} .$$

(Aus beiden Voraussetzungen folgt: $|P_1(0)| < |P_2(0)|$)

Allen gefundenen (numerischen) Bewegungen ist folgendes gemeinsam :

a) Jede der vier Komponenten der Bewegung,

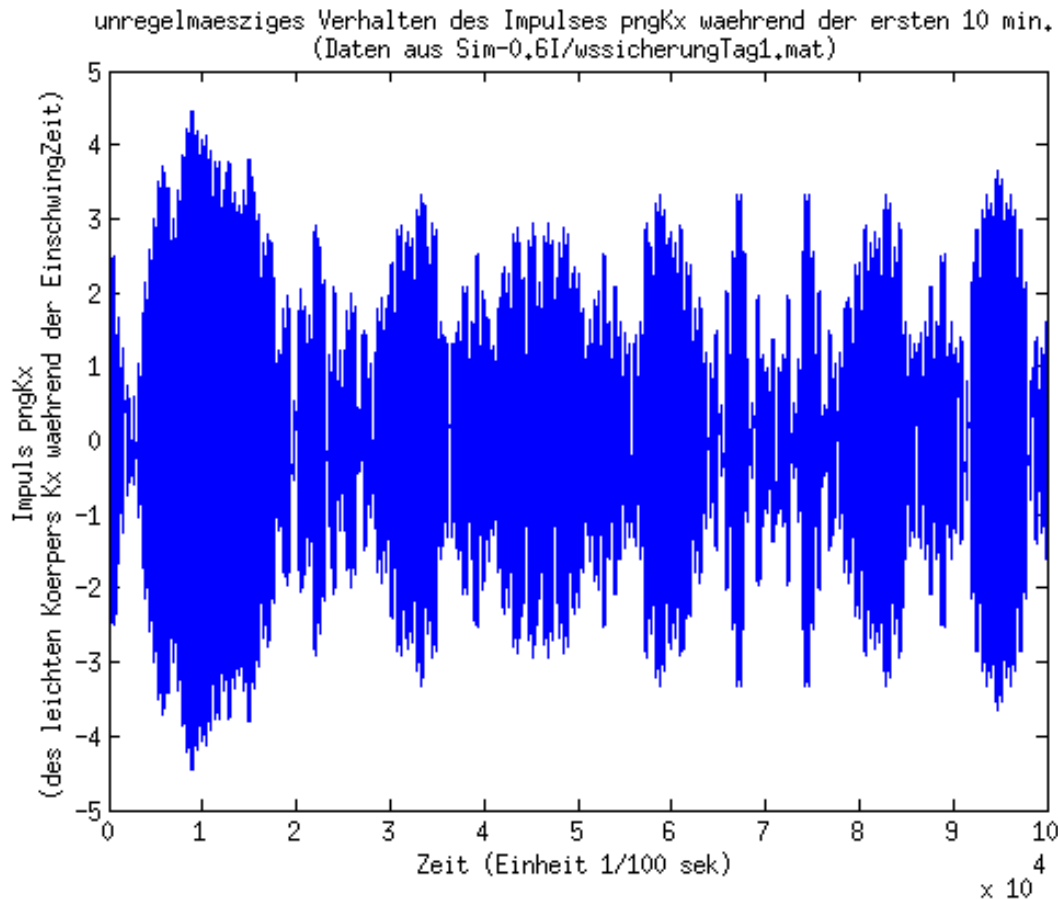
$$Q_1 = qng_{Kx}, Q_2 = qng_{Ky}, P_1 = png_{Kx}, P_2 = png_{Ky}$$

unterliegt als Funktion der Zeit zunächst (in einer "Einschwing-Zeit") mehr oder weniger starken unregelmäßigen asymmetrischen Schwankungen.

Am stärksten sind diese Schwankungen natürlich in den zwei Impulskomponenten P_1, P_2 ausgeprägt, da die zwei Ortskomponenten Q_1, Q_2 durch das Programm ja schon auf die Intervalle $[-1, +1]$ bzw. $[0.1, 2.1]$ beschränkt sind.

Von den beiden Impulskomponenten P_1, P_2 ist der Impuls P_2 des schweren Körpers Ky auch schon (fast völlig) festgelegt durch seinen Anfangswert, da eine gelegentliche Paarkrafteinwirkung zwischen dem schweren Körper Ky mit dem leichten Körper Kx den Ky -Impuls (nach dem Impulserhaltungssatz) nur wenig verändert, d.h. es gilt $P_2(t) \in [-P_2(0), +P_2(0)]$ mit kleiner absoluter Abweichung (vgl. Abbildung 3.4d, S.89).

Damit bleibt das Verhalten des Kx -Impulses $P_1(t)$ die eigentliche unbekannte Größe : (Die gleiche absolute Änderung hat auf den Wert des kleineren Kx -Impulses einen größeren Einfluss; vgl. Abbildung 3.4a, S.86)



Impulsordinate $P_1(t) = \text{pngKx}(t)$ zur Einschwing-Zeit mit unregelmäßigem Ausschlag,

Betrachtungs-Zeitraum : während der ersten 10 Minuten, Startwert : $P_1(0) = 0^8$

Abbildung 3.4a : Unregelmäßiges Verhalten des Impulses $P_1(t)$ während der Einschwingzeit (kurz nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKx10minTag1.tif)

⁸ Bemerkung zur Lesart der folgenden Bilder :

Die Bilder stammen von verschiedenen mit drei Parametern bezeichneten Simulationen :
Sim(Param1, Param2)/wssicherung(Param3) (am Kopf jedes Bildes angegeben).

Parameter1 = +/-0.6 bezeichnet den Wert des ε in der Dgl.

(+ für anziehende / - für abstoßende Paar-Kraft)

Parameter2 bezeichnet die Versuchsnummer gemäß Tabelle S.99,100.

(Dort sind die für den jeweiligen Versuch unwesentlichen Parameter der Dgl – Massen und Anfangswerte – explizit festgelegt.)

Parameter3 gibt den Betrachtungszeitraum an.

Sim-0.6I/wssicherungTag1 besagt also, dass die Dgl mit $\varepsilon = -0.6$ und den Anfangsbedingungen I numerisch gelöst wurde und die Daten von Tag1 (der mehrere Tage dauernden Simulation) genommen sind.

Die Bilder entstammen verschiedenen Simulationen mit stets demselben typischen Endverhalten, sich nach individueller Einschwing-Zeit symmetrisch zu ordnen.

Von den End-Ergebnissen wurden die aussagekräftigsten ausgewählt.

Die Angabe des Betrachtungszeitraumes (im Zusammenhang mit dem Kx-Impuls) wird allerdings erst mit dem Zusatz "innerhalb der Einschwing-Zeit" bzw. "während der Symmetrie-Zeit" bedeutungsvoll.

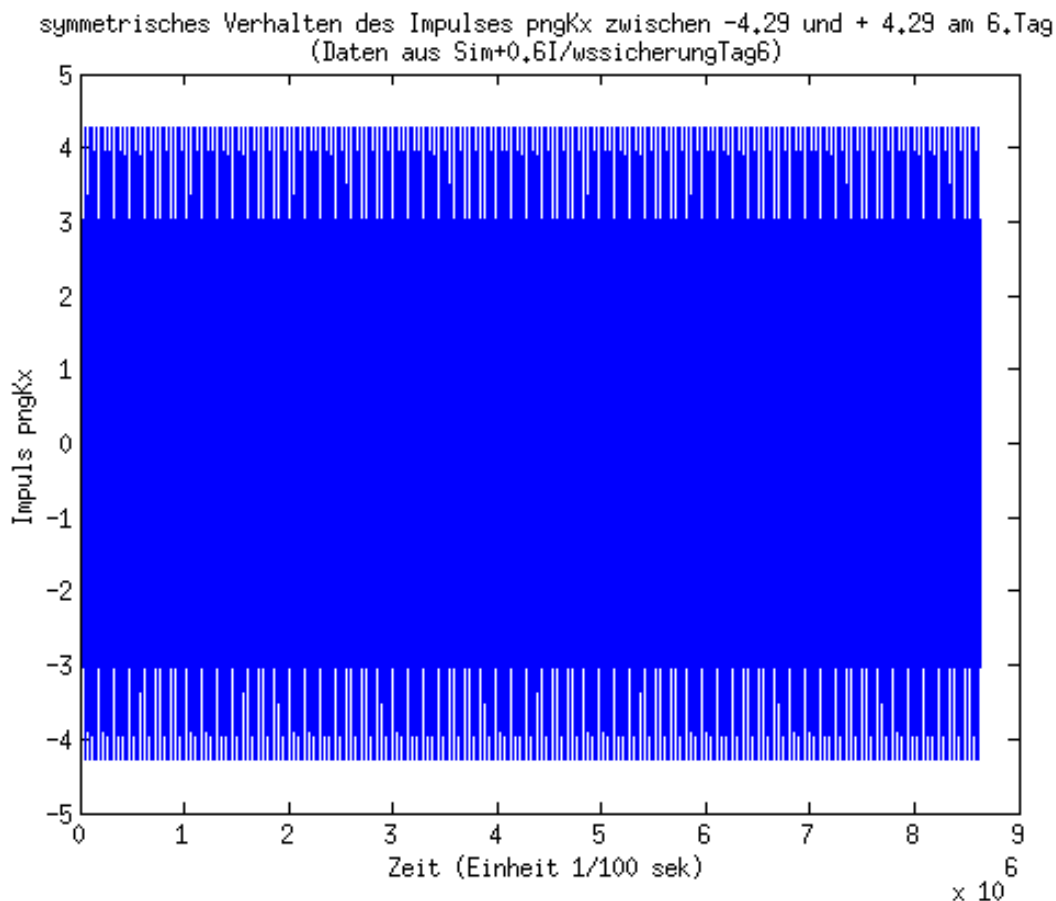
b) Nach dieser (durch das unregelmäßige Verhalten des Impulses des leichten Körpers K_x definierten) Einschwing-Zeit, die mehrere Tage, sogar Wochen dauern kann, werden (in der "Symmetrie-Zeit") die Schwankungen regelmäßig und symmetrisch d.h. sie liegen innerhalb eines um Null symmetrischen Streifens mit leicht gezackten regelmäßigen Rändern. (Dieses Verhalten des K_x -Impulses markiert gerade den Beginn der "Symmetrie-Zeit").

In der Symmetrie-Zeit liegen also die Phasenraumkurven-Punkte in einem Wertebereich

$$[-1; +1] \times [0.1; 2.1] \times [-X; +X] \times [-Y; +Y],$$

der (fast) vollständig ausgefüllt wird.

Dabei sind die ersten beiden Intervalle des Ortsanteiles durch die Programmeigenschaft "mit hartem Rückstoß an den Intervallenden" immer festgelegt, die beiden Intervalle des Impulsanteiles sind experimentell zu ermitteln.



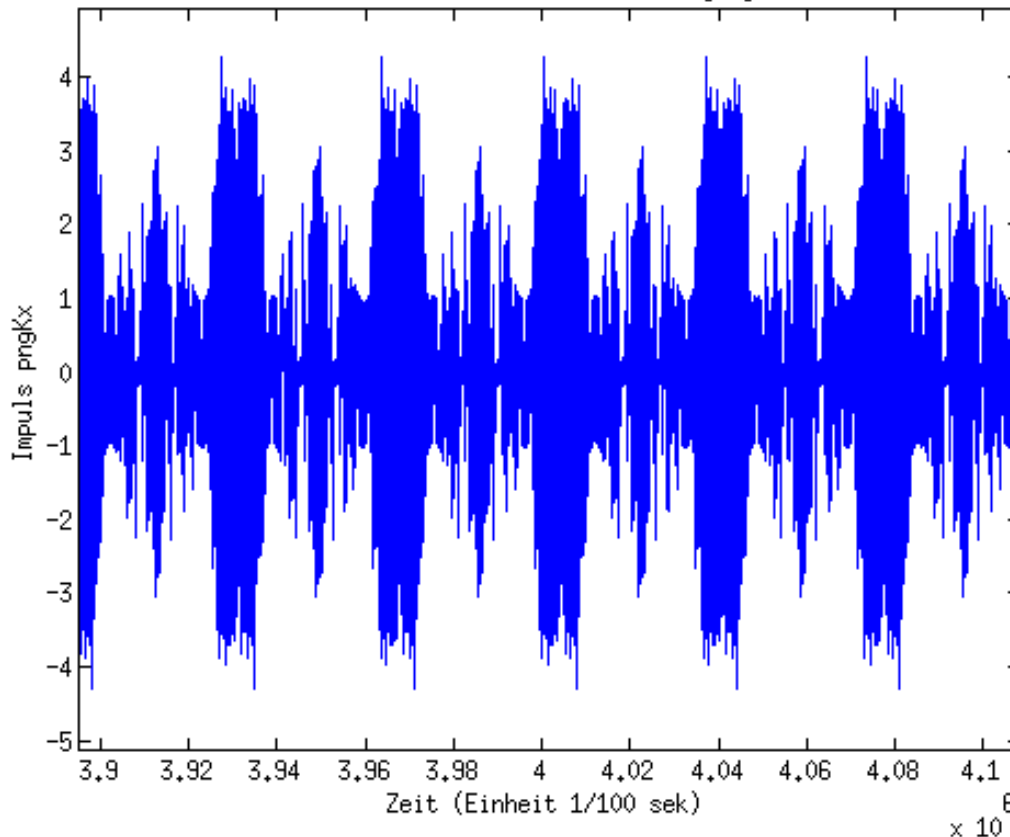
Impulskordinate $P_1(t) = \text{pngKx}(t)$ zur Symmetrie-Zeit mit jetzt symmetrischem Ausschlag, Betrachtungs-Zeitraum : während des ganzen 6.Tages (24 Stdh)

Abbildung 3.4b : Regelmäßiges Verhalten des Impulses $P_1(t)$ während der Symmetrie-Zeit (lange nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKxTag6.tif)

Das Verhalten in der Symmetrie-Zeit bleibt unverändert bestehen : Eine höhere Auflösung zeigt eine regelmäßige Struktur.

Verhalten des Impulses $pngKx$ zwischen $-4,29$ und $+4,29$ am 6.Tag : Vergrößerung
(Daten aus Sim+0,6I/wssicherungTag6)



Vergrößerung der Impulskoordinate $P_1(t) = pngKx(t)$ in der Symmetrie-Zeit,
Betrachtungs-Zeitraum : während 3 Minuten in der Mitte des 6.Tages

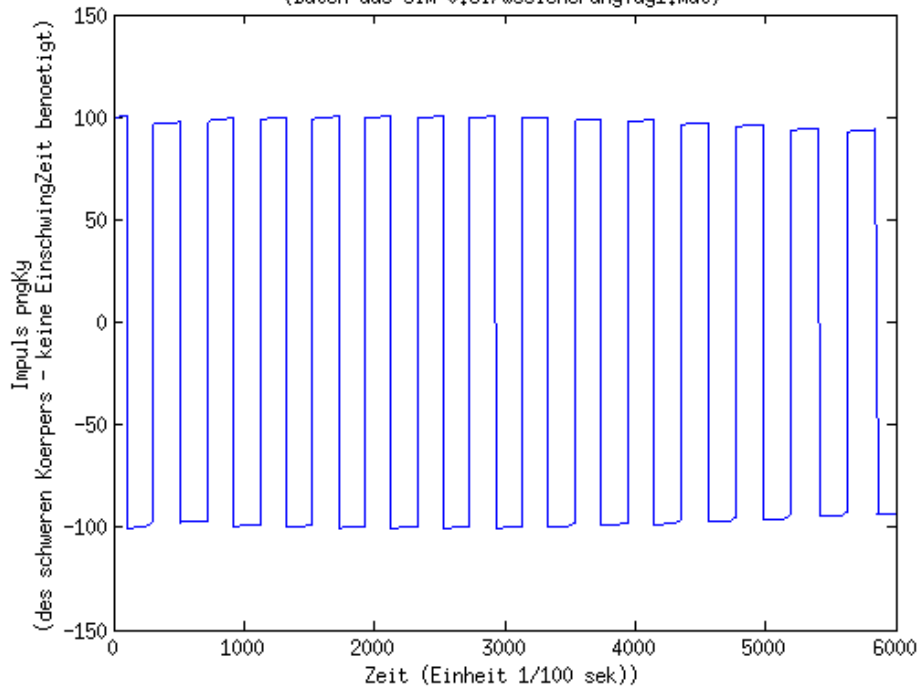
Abbildung 3.4c : Höhere Auflösung von Abb.3.4b (im Unterschied zu Abb. 3.4a).
(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKxTag6groß.tif)

Der Verlauf der Kx -Impulskoordinate ist während der Symmetrie-Zeit regelmäßig, im Gegensatz zu ihrem unregelmäßigen Verhalten zur Einschwing-Zeit (vgl. Abb. 3.4a S.86).

Bemerkung : Von den (maximalen) X - und Y -Werten und dieser regelmäßigen Struktur hängen in direkter Weise die Mittel-Werte der kinetischen Energien ab. Ihr Verhalten (Zu- oder Abnahme hinsichtlich des Vorzeichens von ε) soll später in Teil 3) S.93ff noch genauer betrachtet werden.

Im Gegensatz zu dem unterschiedlichen Verhalten des Kx -Impulses $P_1 = pngKx$ während der sogenannten Einschwing-Zeit (unregelmäßiges Verhalten) und der darauf folgenden Symmetrie-Zeit (geordnetes Verhalten) weist der Ky -Impuls $P_2 = pngKy$ ein schon von Anfang an geordnetes Verhalten auf (unter der Voraussetzung an die Massen $mKx < mKy$) :

regelm. Verhalten des Impulses pngKy zwischen den Startwerten -100 und +100 während der 1. n
(Daten aus Sim=0,6I/wssicherungTag1.mat)



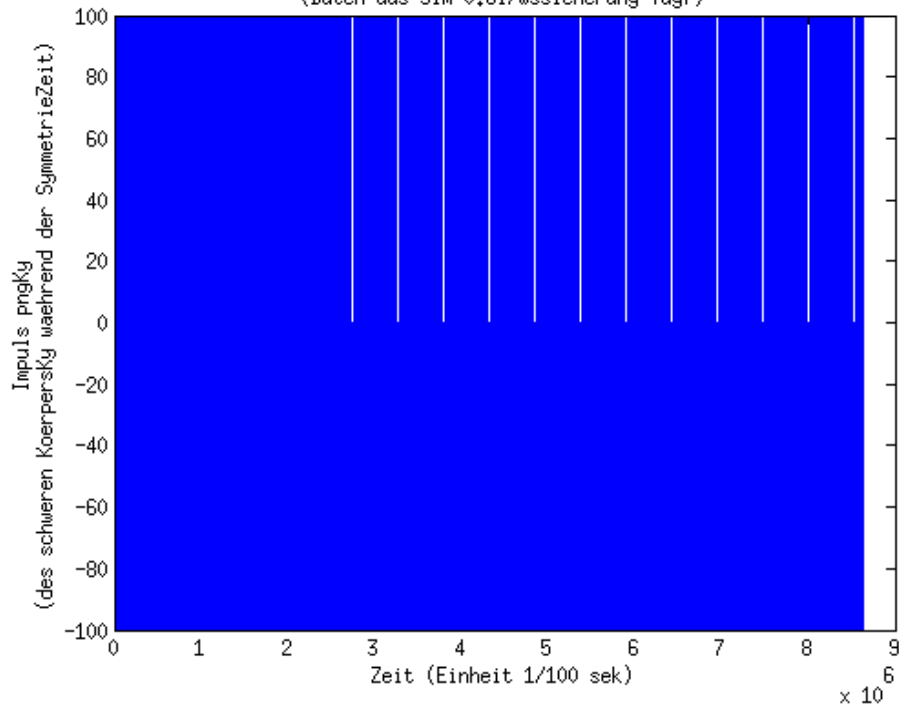
Impulsordinate $P_2(t)=pngKy(t)$,

Betrachtungs-Zeitraum : während der ersten Minute, Startwert : $P_2(0)=100$

Abbildung 3.4d : Fast regelmäßiges Verhalten des Impulses $P_2(t)$ schon ab Start.
(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKy1minTag1.tif)

Auch das spätere Verhalten des Ky-Impulses bleibt geordnet :

symmetrisches Verhalten des Impulses pngKy zwischen den Startwerten -100 und +100 am 7.Tag
(Daten aus Sim=0,6I/wssicherung Tag7)



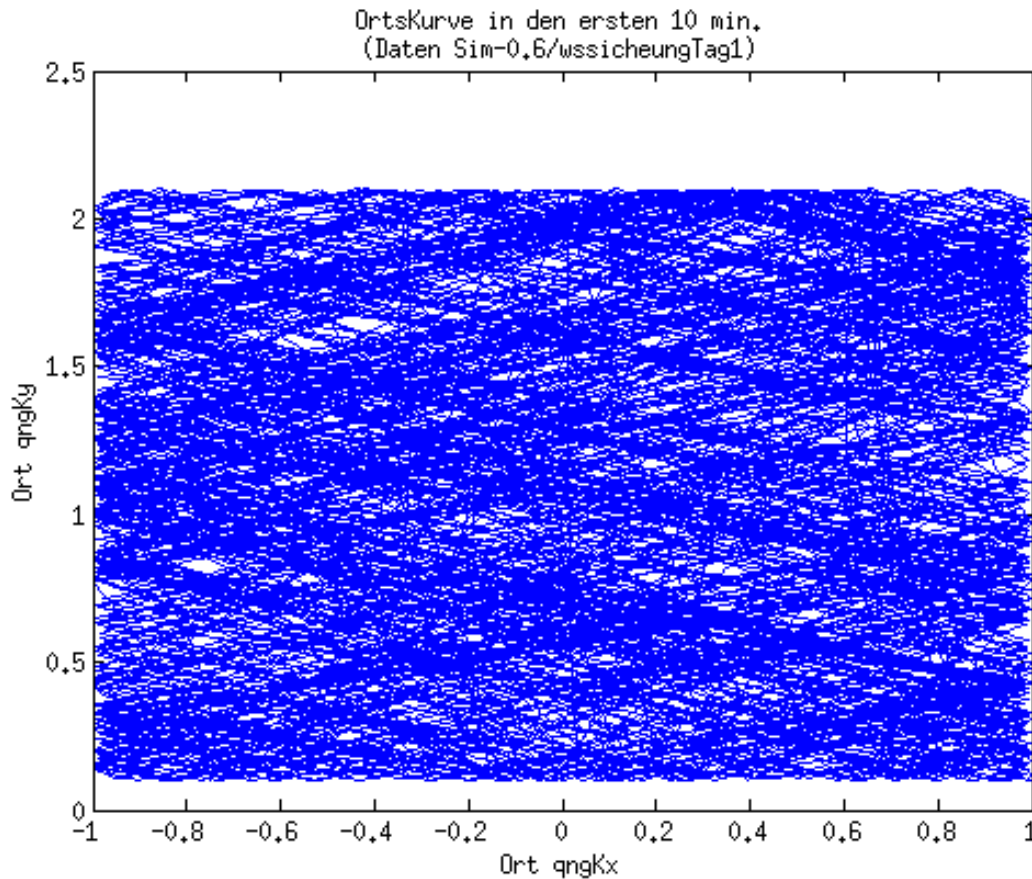
Impulsordinate $P_2(t)=pngKy(t)$,

Betrachtungs-Zeitraum : während des ganzen 7.Tages (24 Stdn)

Abbildung 3.4e : Auch später bleibt der Impuls des schweren Körpers regelmäßig.
(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKyTag7.tif)

c) Diagramme, in denen die Ortswerte⁹ bzw. die Impulswerte gegeneinander aufgetragen werden, füllen selbst in kurzen Teilen der Einschwing-Zeit ihre Bereiche (dicht) aus. In der Symmetrie-Zeit ergeben diese Darstellungen jedoch diskrete (periodisch durchlaufene) Kurven.

Flächenfüllende Ortskurve in der Einschwing-Zeit ("Chaos") :



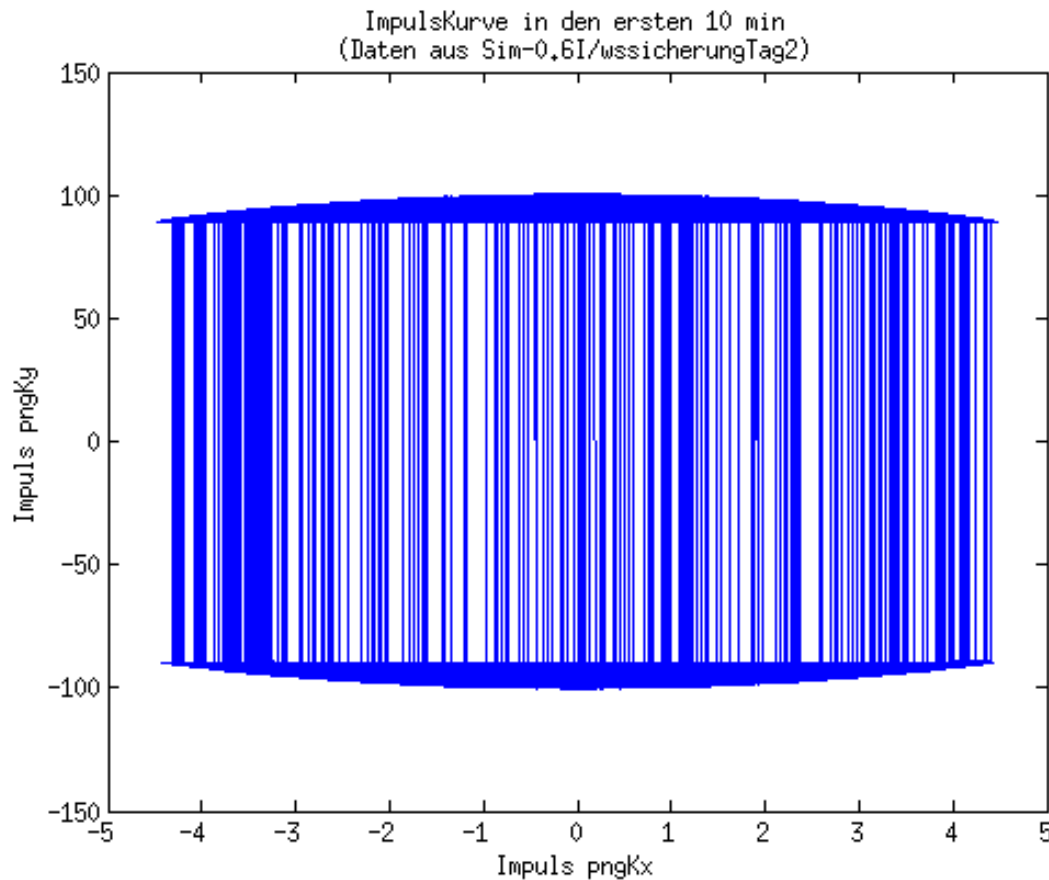
Die das Rechteck $[-1;+1] \times [0.1;2.1]$ dicht ausfüllende Ortskurve ($qngKx$, $qngKy$),
Betrachtungs-Zeitraum : während der ersten 10 Minuten (Einschwing-Zeit)

Abbildung 3.5a : Flächenfüllende (unregelmäßige) Ortskurve ($Q_1(t), Q_2(t)$)
während der Einschwing-Zeit (kurz nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\OrtsKurve10minTag1.tif)

⁹ Die graphische Darstellung der Ortskurve kann aufgefasst werden als die Bewegung eines einzelnen Körpers (Billardkugel) im Rechteck $[-1;+1] \times [0.1;2.1]$ [Sin,1970].

Ebenso
Flächenfüllende Impulskurve in der Einschwing-Zeit :



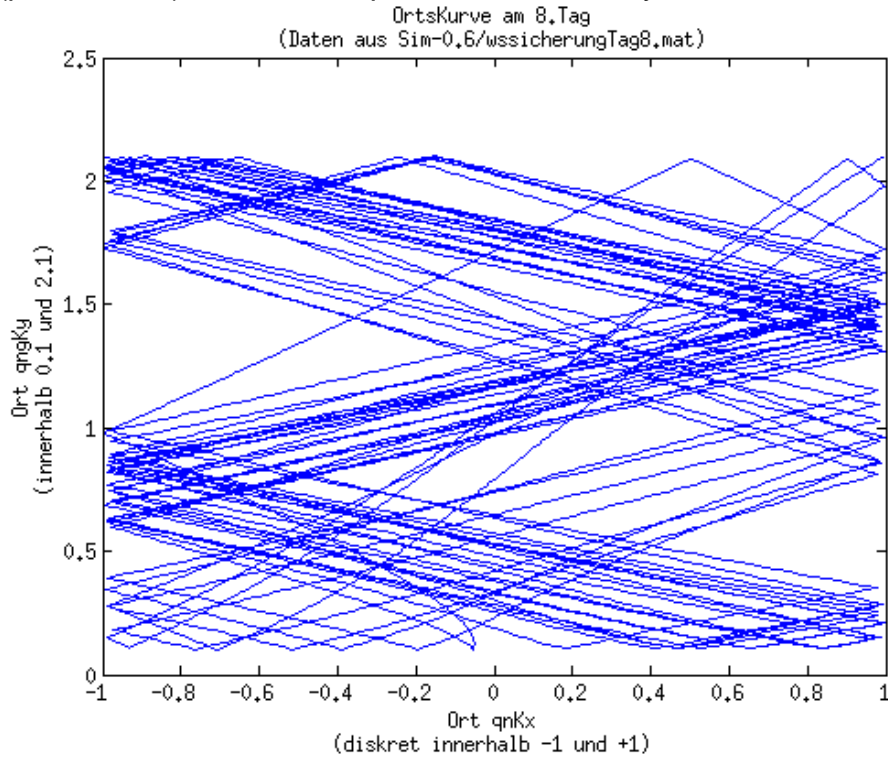
Die das Rechteck $[-4.5;+4.5] \times [-100.3;+100.3]$ dicht ausfüllende Impulskurve (pngKx, pngKy), Betrachtungs-Zeitraum : während der ersten 10 Minuten (Einschwing-Zeit)

Abbildung 3.5b : Ebenso die Impulskurve ($P_1(t), P_2(t)$) (kurz nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKurve10minTag2.tif)

Das Verhalten der Ortskurve und Impulskurve zur Symmetrie-Zeit ist dagegen merklich verschieden von ihrem Verhalten zur Einschwing-Zeit :

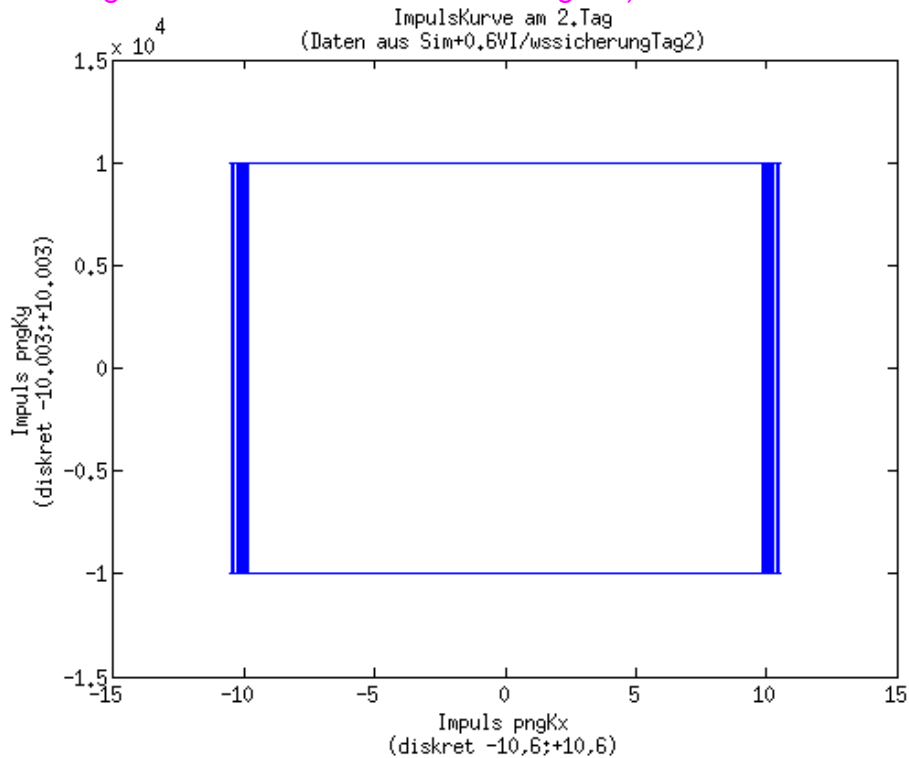
Diskrete (periodische) Orts- und Impuls-Kurve in der Symmetrie-Zeit :



Die diskret liegende Ortskurve ($qngKx$, $qngKy$) in der Symmetrie-Zeit, Betrachtungs-Zeitraum : während des ganzen 8.Tages (24Stdh)

Abbildung 3.5c : Diskrete (periodische) Ortskurve ($Q_1(t), Q_2(t)$) während der Symmetrie-Zeit (lange nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\OrtsKurveTag8.tif)



Die diskret liegende Impulskurve ($pngKx$, $pngKy$) in der Symmetrie-Zeit, Betrachtungs-Zeitraum : während des ganzen 2.Tages (24Stdh)

Abbildung 3.5d : Ebenso die Impulskurve ($P_1(t), P_2(t)$) (lange nach Start).

(work\HSTRohrgK\BilderHSTRohr\ImpulsKurveTag2.tif)

3) Unterschiedliches Verhalten der kinetischen Energien der beiden Körper bei abstoßender bzw. anziehender Paar-Kraft (T-Rohr)

Im Folgenden wird das gegenseitige Verhalten der kinetischen Energien der beiden Körper in der T-Rohr-Anordnung betrachtet. Verglichen werden sollen die kinetischen Energien des Start-Zustandes mit den erreichten¹⁰ kinetischen Energien zur Symmetrie-Zeit (d.h. ihren (unveränderlichen) Mittelwerten zur Symmetrie-Zeit).

Im Hinblick auf Anwendungen seien folgende Voraussetzungen gegeben :

a) Für die Massen der Körper gelte, wie schon früher festgelegt,

$$mKx < mKy$$

(Der Körper Kx auf der x-Achse - gedacht als Elementarteilchen, z.B. Neutrino hat eine sehr viel kleinere Masse als der Körper Ky auf der y-Achse – gedacht als eine Galaxie).

b) Für die Startgeschwindigkeiten der beiden Körper sei deren Verhältnis von der Art der Paar-Kraft abhängig, u.z.

b-abs) Im Falle einer abstoßenden Paar-Kraft zwischen den Körpern (d.h. in den Dgln ist $\varepsilon < 0$) sei zu Anfang

$$\begin{aligned} \dot{Q}_1(\text{Start}) &< \dot{Q}_2(\text{Start}) \\ \left(\frac{P_1(0)}{m_1} &< \frac{P_2(0)}{m_2} \right) \end{aligned}$$

(Die Startgeschwindigkeit des leichten Körpers Kx ist kleiner als die Startgeschwindigkeit des schweren Körpers Ky. Der Anstieg der Ortskurve¹¹ sei zunächst steil (fast parallel zur y-Achse)).

b-anz) Im Falle einer anziehenden Paar-Kraft zwischen den Körpern (d.h. in den Dgln ist $\varepsilon > 0$) sei zu Anfang

$$\begin{aligned} \dot{Q}_1(\text{Start}) &> \dot{Q}_2(\text{Start}) \\ \left(\frac{P_1(0)}{m_1} &> \frac{P_2(0)}{m_2} \right) \end{aligned}$$

(Hier ist der leichte Körper Kx am Start schneller als der schwere Körper Ky. Der Anstieg der Ortskurve am Start sei zunächst flach (fast parallel zur x-Achse)).

c) Für die kinetischen Energien¹² gelte beim Start

$$\text{kinEnKx}(\text{Start}) < \text{kinEnKy}(\text{Start}) .$$

¹⁰ Die kinetischen Energien $\frac{pngK^2}{2 \cdot mK}$ unterliegen, genau wie die Koordinaten $pngK$ (vgl. Abbildungen 3.4a-e), zeitlichen Veränderungen. Ein (durch Glättung) gewonnener Mittelwert ist während der Symmetrie-Zeit mit ihren regelmäßigen(!) Schwankungen jedoch ein bestimmter (zeitunabhängiger) Zahlenwert.

¹¹ Eine Kurve $(Q_1(t), Q_2(t))$ hat den Anstieg $\frac{\dot{Q}_2(t)}{\dot{Q}_1(t)}$.

¹² Die kinetischen Energien zur Start-Zeit sind durch die Vorgaben in a) und b-abs/b-anz) bestimmt. Im abstoßenden Fall b-abs) ist c) keine (echte) Bedingung, da aus a), b-abs) immer c) folgt. Im anziehenden Fall b-anz) ist c) eine echte Zusatz-Bedingung, die durch $mKx \ll mKy$ erfüllt werden kann.

Aus einer Reihe von Simulationen (mit den erwähnten Voraussetzungen) ergibt sich folgendes Verhalten (Die Dgl-Parameter der einzelnen Simulationen sind in der Tabelle S.99,100) festgelegt) :

Im Fall abstoßender Paar-Kraft ($\varepsilon < 0$) :

Die kinetischen Energien bewegen sich aufeinander zu, d.h. $\text{kinEnKx}(\text{Start})$ wächst um ein Mehrfaches auf den Wert $\text{MwkinEnKx}(\text{Symmetrie-Zeit})$, während $\text{kinEnKy}(\text{Start})$ um (fast) denselben Betrag¹³ auf Wert $\text{MwkinEnKy}(\text{Symmetrie-Zeit})$ fällt. (Trend zum gewohnten physikalischen Energie-Ausgleich)

Im Fall anziehender Paar-Kraft ($\varepsilon > 0$) :

Die kinetischen Energien bewegen sich von einander weg, d.h. $\text{kinEnKx}(\text{Start})$ bleibt fast gleich oder fällt um einen gewissen Prozentsatz¹⁴ auf den Wert $\text{MwkinEnKx}(\text{SymmetrieZeit})$, während $\text{kinEnKy}(\text{Start})$ um (fast) denselben Betrag auf den Wert $\text{MwkinEnKy}(\text{Symmetrie-Zeit})$ wächst.

(In den Beispielen, in denen kinEnKx fällt, gibt also in ungewohnter Weise der Körper mit der kleineren kinetischen Energie innerhalb der Einschwing-Zeit¹⁵ noch Energie an den Körper mit der von Hause aus größeren kinetischen Energie ab.)¹⁶

Begründung :

Nach der Vorstellung von Rössler [Roe,2010] im Anschluss an ein Gespräch mit Joseph Ford 1986 beschreibt die Ortskurve $(Q_1(t), Q_2(t))$ genau die Bahn eines einzelnen Körpers, der sich (reibungsfrei) auf einer Fläche $[-1,1] \times [0.1,2.1]$ (Billard-Tisch) mit total elastischen Rändern, aber einer im Nullpunkt (0,0) fest positionierten (abstoßenden bzw. anziehenden) Kraftquelle bewegt, vgl. auch [Sin,1970].

Unter den gemachten unterschiedlichen Voraussetzungen an die beiden Körper in der T-Rohr-Anordnung soll

a) bei abstoßender Paar-Kraft gelten :

$$\dot{Q}_1(\text{Start}) < \dot{Q}_2(\text{Start}) \text{ mit } mKx < mKy$$

b) bei anziehender Paar-Kraft gelten :

$$\dot{Q}_1(\text{Start}) > \dot{Q}_2(\text{Start}) \text{ mit } mKx < mKy .$$

Dies bedeutet für den Einzelkörper des Billard-Tisches : Seine Startgeschwindigkeit ist zuerst

a) steil (parallel zur y-Achse)

b) flach (parallel zur x-Achse).

¹³ Die Gesamtenergie (Hamilton-Funktion) ist ja konstant und die potentielle Energie liefert (bei kleinem ε) keinen entscheidenden Beitrag.

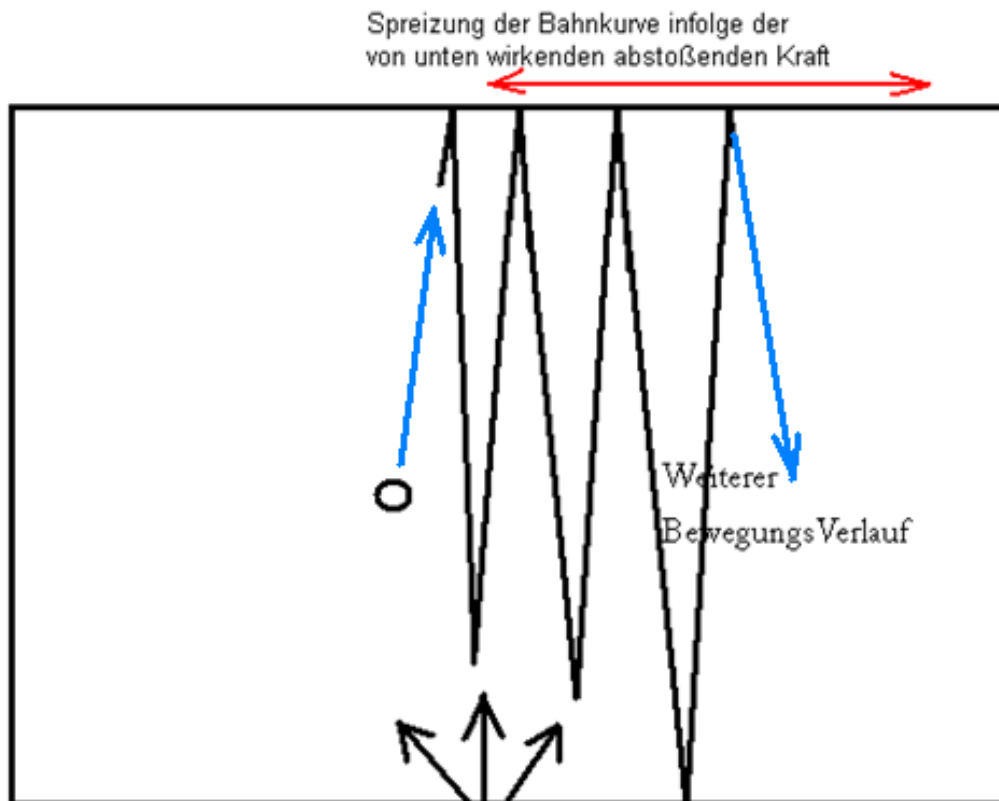
¹⁴ Abnahme der kinetischen Energie ist nur prozentual (maximal 100%) möglich. Mehrfache Abnahme ist–im Gegensatz zur Zunahme–unmöglich.

¹⁵ Beim Erreichen der Symmetrie-Zeit ist der Vorgang des Energie-Austausches abgeschlossen.

¹⁶ In "wirtschaftlicher" Sprechweise :

Das System mit abstoßender Paar-Kraft verhält sich "sozialistisch", indem der energiereiche schwere Körper dem leichten langsamen Körper etwas kinetische Energie abgibt. Dagegen verhält sich ein System mit anziehender Paar-Kraft "kapitalistisch", indem der energiearme, leichte schnelle Körper einen Teil seiner wenigen kinetischen Energie noch an den schwereren Körper abgibt.

Verhalten eines steil startenden Körpers bei abstoßender Kraft :



Billard-Tisch mit abstoßender äußerer Kraft-Quelle.
Auf ihm ein Körper mit (steiler) Start-Geschwindigkeit.

Abbildung 3.6a : Qualitatives Verhalten der steil startenden Ortskurve bei abstoßender Kraft.

(C:\Dok.u.Einst.\admin.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\BillAbstoßend.tif)

Die Spreizung (in Richtung x-Achse) bedeutet (bei fast gleichbleibender Geschwindigkeit in y-Richtung : wegen $mK_x < mK_y$ ändert sich bei Einwirkung einer Paar-Kraft hauptsächlich die Geschwindigkeit des leichten Körpers K_x) :

Erhöhung des Absolutbetrages der Geschwindigkeit in x-Richtung.

Das bedeutet rückübertragen auf das T-Rohr :

Der (zuerst) langsamere leichte Körper auf der x-Achse nimmt Energie auf.

Nach der Einschwing-Zeit ist die Tendenz zur Spreizung abgeschlossen.

Verhalten eines flach startenden Körpers bei anziehender Kraft :

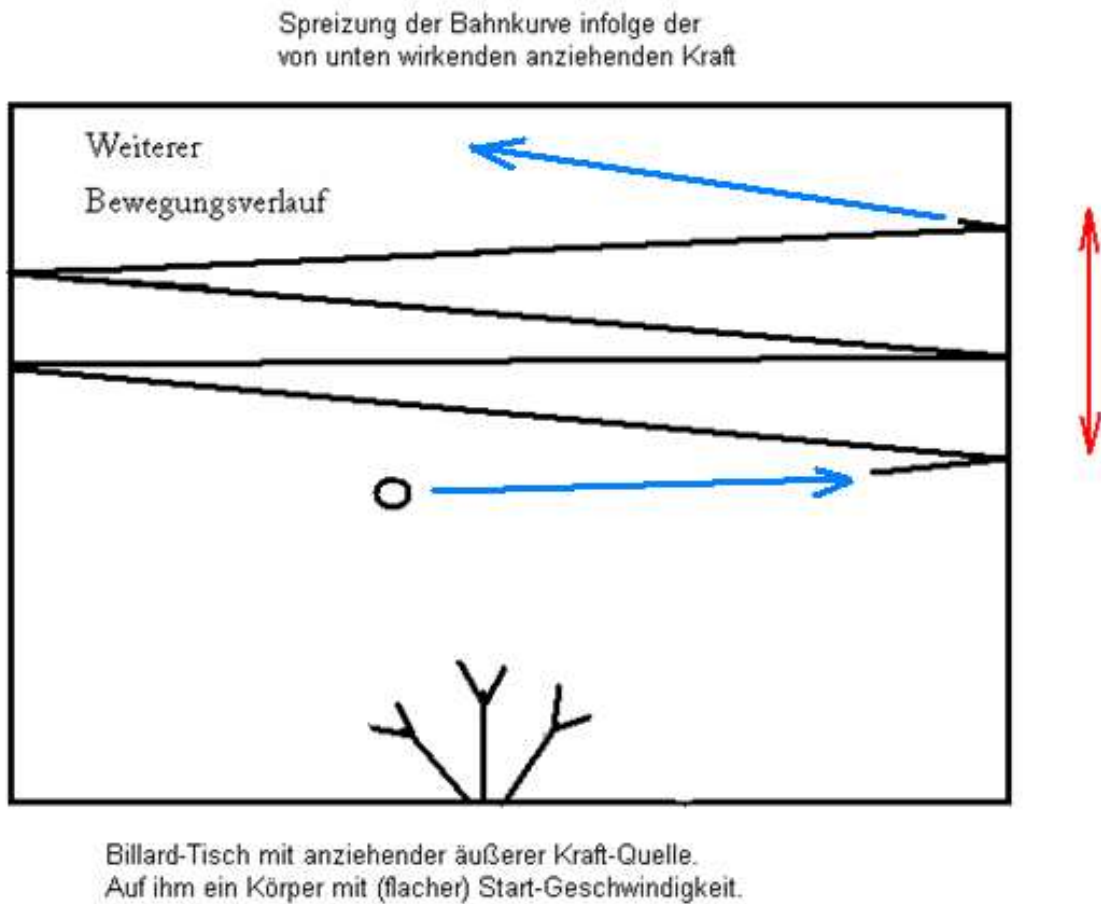


Abbildung 3.6b : Qualitatives Verhalten der flach startenden Ortskurve bei anziehender Kraft.

(C:\Dok.u.Einst.\admin.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\BillAnziehend.tif)

Die Spreizung (in Richtung y-Achse) bedeutet (bei fast gleichbleibender Geschwindigkeit in y-Richtung : wegen $mK_x < mK_y$ ändert sich bei Einwirkung einer Paar-Kraft hauptsächlich die Geschwindigkeit des leichten Körpers K_x) :

Verkleinerung des Absolutbetrages der Geschwindigkeit in x-Richtung.
Das bedeutet rückübertragen auf das T-Rohr :

Der (zuerst) schnelle leichte Körper auf der x-Achse gibt Energie ab.

Nach der Einschwing-Zeit ist die Tendenz zur Spreizung abgeschlossen.

Diese Betrachtung wird auch durch das Computer-Experiment bestätigt :
Zunächst erfahren die Ortskurven in beiden Fällen nur in der Gegend des Ursprunges eine Steigungsveränderung. Außerhalb dieses Bereiches sind die Ortskurven Geradenstücke (vgl. auch Abb. 3.5c, oberes Bild S.92).

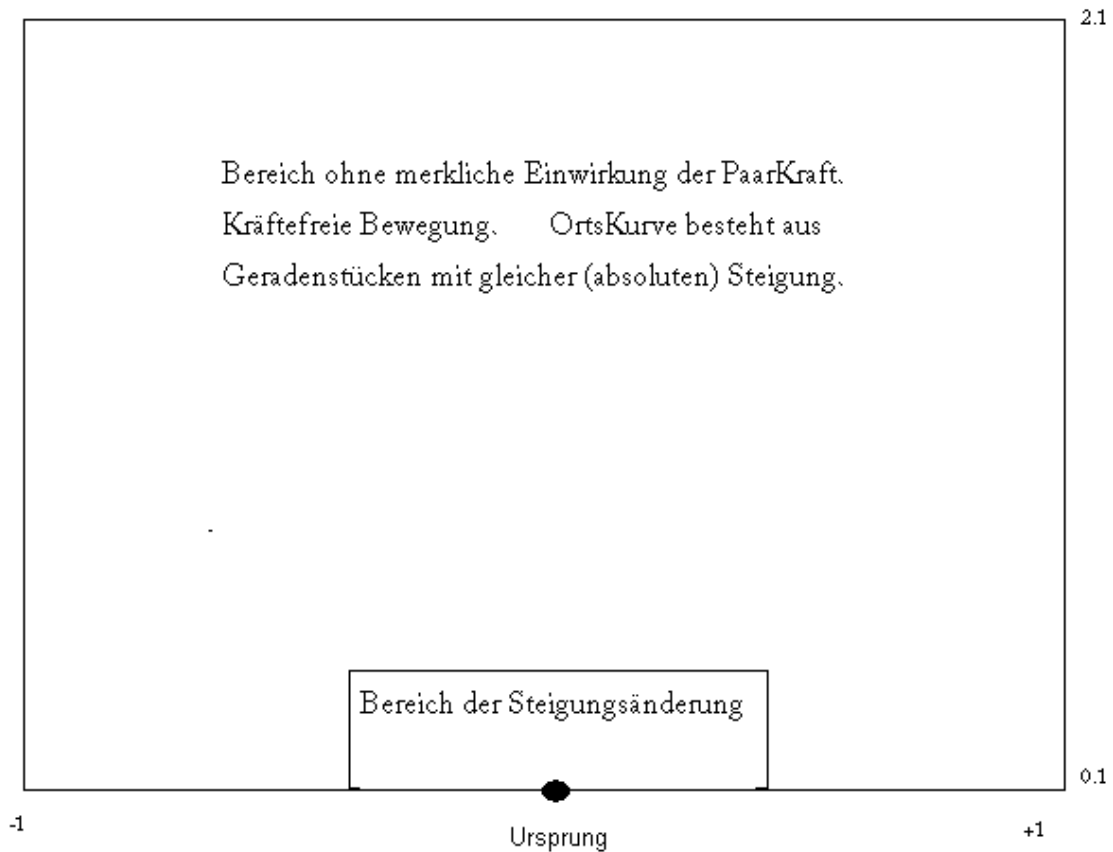


Abbildung 3.7 : Bereiche mit / ohne Steigungsänderung.
(C:\Dok.u.Einst.\admin.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\SteigBereiche.tif)

Tritt dagegen eine Ortskurve in die Gegend des Ursprunges ein, so wird ihre Steigung je nach Art der Paar-Kraft unterschiedlich verändert :

Es werden Ortskurven-Scharen gleichen Anstieges an der x-Achse zur Reflektion gebracht und der Mittelwert der Steigungen der reflektierten Kurven berechnet.

Der Mittelwert (nach Reflektion) zeigt bei abstoßender Paar-Kraft (bzw. anziehender Paar-Kraft) im Verhältnis zur (gemeinsamen) Steigung (vor der Reflektion) eine Verminderung (bzw. Vergrößerung), so dass bei gleichbleibender Geschwindigkeit des schweren Körpers vor und nach Reflektion die Geschwindigkeit des leichten Körpers gestiegen ist (Energie-Aufnahme), bzw. gefallen ist (Energie-Abgabe).

Qualitatives Verhalten der Ortskurven-Anstiege während der Einschwing-Zeit :

Bei abstoßender Paar-Kraft : Die steil gestarteten Ortskurven werden (im Mittel) flacher.

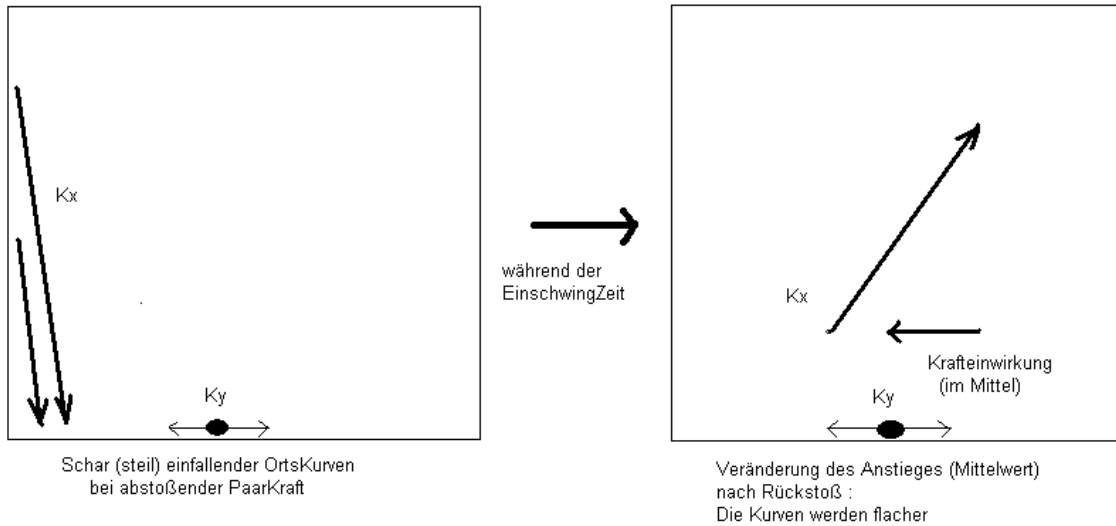


Abbildung 3.8a : Änderungsverhalten der steil startenden Ortskurvenscharen bei abstoßender Paar-Kraft : Die Kurven werden flacher.

(C:\Dok.u.Einst.\admin.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\AbstoßendSchar.tif)

bzw.

Qualitatives Verhalten der Ortskurven-Anstiege während der Einschwing-Zeit :

Bei anziehender Paar-Kraft : Die flach gestarteten Ortskurven werden (im Mittel) steiler.

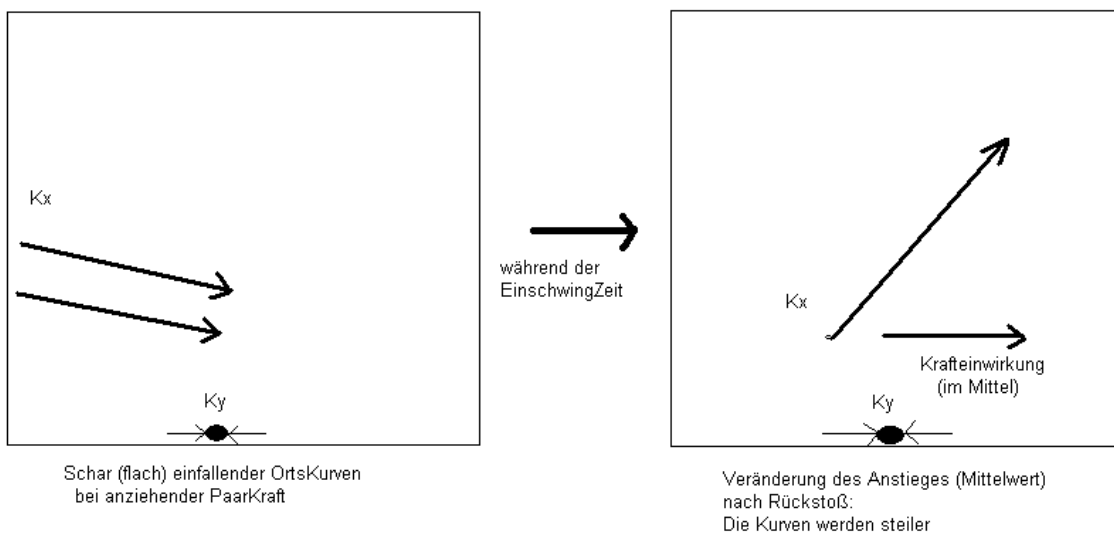


Abbildung 3.8b : Änderungsverhalten der flach startenden Ortskurvenscharen bei anziehender Paar-Kraft : Die Kurven werden steiler.

(C:\Dok.u.Einst.\admin.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\AnziehendSchar.tif)

4) Tabelle mit den Parametern und Ergebnissen der einzelnen Simulationen (T-Rohr)

7 bzw. 12 Langzeit-Simulationen mit abstoßender (bzw. anziehender) Paar-Kraft
 Oberer Block abstoßend (7 Versuche), unterer Block anziehend (12 Versuche)
 Hinweis : Das Ziel ist jeweils in Zeile 4 angegeben.

Teil1

Überblick Massen, StartGeschw., Zu- und Ab-Nahme der kin.Energie			
abstoßend (eps= - 0.6)			
Voraussetzung	$mKx \leq mKy$	$mKx \leq mKy$	kEnkx <= kEnky
Ziel	red. Zunahme kinEnkx		(Modell : Sozialismus)
Versuch	Sim-0.6I	Sim-0.6III	Sim-0.6IV
Massen	$mKx=1$ $mKy=100$	$mKx=1$ $mKy=100$	$mKx=1$ $mKy=100$
StartGeschw	$vKx=0$ $vKy=1$	$vKx=6$ $vKy=1$	$vKx=10$ $vKy=1$
dkinEnkx	+ 3.0192 (von 0)	+ 0.8575 (von 18)	+ 0.1756 (von 50)
dkinEnky	- 3.0910 (von 50)	- 2.4128 (von 50)	- 0.9333 (von 50)
rel. Zunahme			
kinEnkx	+ unendlich fach	+ 5,2 fach Zun.	+ 0,13 fach Zun.
Bemerkung			
Ergebnis :	Alle (I,II,III, VII), welche die Vor. erfüllen, haben (mehrfache) relative Zunahme bei kinEnkx		
	IV,V,VI erfüllen die Vor. nicht. (Ergebnis evtl. o.k.)		

anziehend (eps= + 0.6)			
Voraussetzung	$mKx \leq mKy$	$mKx \gg mKy$	kEnkx <= kEnky
Ziel	red. Abnahme kinEnkx		(Modell : Kapitalismus)
Versuch	Sim+0.6I	Sim+0.6III	Sim+0.6IV
Massen	$mKx=1$ $mKy=100$	$mKx=1$ $mKy=100$	$mKx=1$ $mKy=100$
StartGeschw	$vKx=0$ $vKy=1$	$vKx=6$ $vKy=1$	$vKx=10$ $vKy=1$
dkinEnkx	+ 1.9576 (von 0)	+ 6.1182 (von 0.5)	+ 2.3424 (von 18)
dkinEnky	- 1.9695 (von 50)	- 6.0625 (von 50)	- 2.3620 (von 50)
rel. Abnahme			
kinEnkx	+ unendlich fach	- 0,12 fach	+ 0,004 fach
Schrittweite	mit dt=0,01	mit dt=0,01	mit dt=0,01
Bemerkung	Vor. nicht erfüllt	Vor. erfüllt	Vor. nicht erfüllt
	?? ($mKx > mKy$)	?? ($mKx > mKy$)	?? ($mKx < mKy$)
Ergebnis :	III,IX,XI,XII erfüllen die Vor. und haben relative Abnahme bei kinEnkx		
	VI,VIII sind Problemfälle : Erfüllen die Vor., haben aber nur kurzfristige Abnahme bei kinEnkx		
	I,II,IV,V,VII erfüllen die Vor. nicht. (Ergebnis evtl. o.k.)		

(C:\Doku.u.Einst\adm.\Eig.Dat.\Eigene Bilder\HSMappeTRohrlquerneu.TIF)

Man sieht (oberer Block) : Zu den Versuchen, die die Start-Voraussetzungen erfüllen, stellt sich jeweils mehrfache Zunahme der kinetischen Energie ein (rote Ergebnisse).

Man sieht (unterer Block) : Bei den Versuchen mit zulässigen Start-Voraussetzungen sieht man eine prozentuale Abnahme der kinetischen Energie (rote Ergebnisse).

5) Programm-Schema für T-Rohr (T-Rohr)

Die Programme und (Funktions-)Unterprogramme haben folgenden Aufbau :
(Der Programmtext ist in den mit `***.m` bezeichneten Dateien abgelegt.)

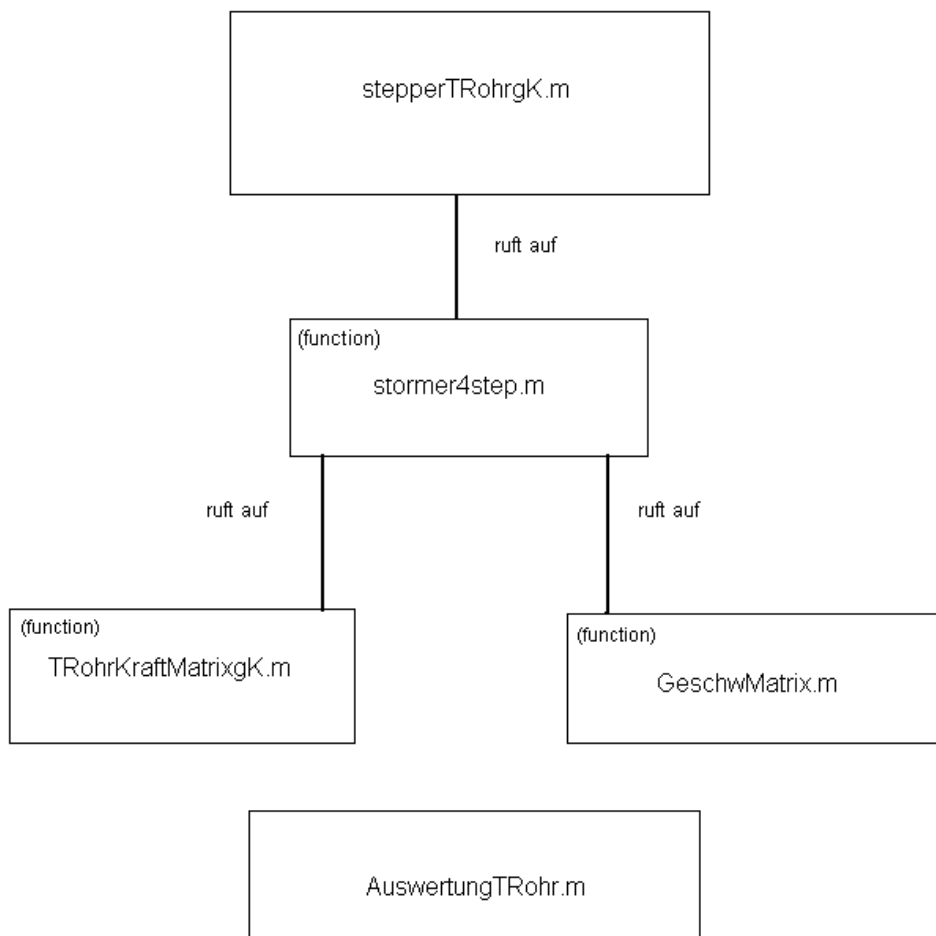


Abbildung 3.9 : Programm-Schema für T-Rohr-Anordnung.

<C:\Doku.u.Einst.\Adm.\Eigene Dateien\Eigene Bilder\PrgrSchemaTRohr.tif>

6) Programm-Quell-Text (T-Rohr)

Das MatLab-Steuer-Programm (stepperTRohrgK.m) :

Aufgabe : Berechnung der Phasenraumkurve (auch als Fortsetzung), (harte) Rückstoß-Steuerung, (stückweise) Graphische Darstellung, Ergebnissicherung. (work\HSTRohrgK\stepperTRohrgK.m)

```
% Numerische Loesung der T-Rohr Dgl (in generalisierten (skalaren)
% Koordinaten) mit hartem Rueckstosz an den Intervall-Enden
%
%
% Funktionen :
% Berechnung der Phasenraumkurve (auch als Fortsetzung)
% (stueckweise) graphische Darstellung des Ortsteiles
% Datensicherung

% (Datum : 17.04.2010) / K.S.

tic;
clear;
clc;
close all;

%*Konstanten*****

% Simulationszeit in Stunden
% (1 Std SimZeit ~ 80 Sek ZDV-Rechenzeit)
% (1 Tag SimZeit ~ 30 Min ZDV-Rechenzeit)
SimZeit=24/1;

% Schrittweite in Sekunden
dt = 0.001;

% benoetigte Iterationen
it=SimZeit*3600/dt;

% Massenvektor der 2 Koerper Kx und Ky
massen=[1/100,10000];

% PaarKraftKonstante (eps>0 : abstoszend, eps<0 : anziehend)
eps = 0.6;

% Auswahl, ob Start mit gewaehlten Anfangswerten (==1) oder Fortsetzung
Neustart = 1;

if Neustart==1
    % Anfangswerte der Phasenraumkurve
    % a) AnfangsOrte
    % (Einschraenkung : qngK(1,1) auf [-1,1]
    %                  qngK(1,2) auf [0.1,2.1])
    qngK=[0.01,1.1];

    % b) AnfangsImpulse
    % (keine Einschraenkung)
    pngK=[1,10000];
else
```

```

% Bei Fortsetzung wird der PhasenraumkurvenEndWert aus der
%                               workspacesicherung des Vorlaufes geladen
load wssicherung qngK pngK;

end %[Neustart]

% Schalter fuer graphische Darstellung
graphDarst = 1;

% ZeitSpanne(BlockZeit) der Ortsbewegung, die ein Bild umfassen soll.
% Voreingestellt : 1/2 Periode fuer Ky (bei anfaenglichem Impuls)
BlockZeit=round(abs(2*massen(2)/pngK(2)));
teilschr=round(BlockZeit/dt);

% Argumente zum Zeichnen der HindernisEllipse
t=linspace(0,pi);

%*Programm*zur*num.Berechnung*der*Phasenraumkurve*****

% Vorbelegung des gesamten Speicherplatzes fuer die Phasenraumkurve
outgK=zeros(4,it);

for i=1:it
    % Sicherung des StartPhasenwertes (i=1)
    % bzw. Anhaengen des Folgewertes
    outgK(:,i)=[qngK,pngK]';

    % Erzeugung des naechsten gen. Ortes und gen.Impulses (Phasenwertes)
    % durch Stoermer-Verfahren bzw. Stoermer4-Verfahren (doppelte Zeit)
    [qngKhilf,pngKhilf] = stormer4step(qngK,pngK,massen,dt);

    % HARTER RUECKSTOSZ (mit GesamtEnergieErhalt) :
    % Falls einer der Koerper die IntervallEnden ueberschreitet,
    % wird der Vorwert des Phasenwertes genommen
    % mit entsprechend negativ gesetzter ImpulsKoordinate

    if abs(qngKhilf(1)) > 1 || abs(qngKhilf(2)-1.1) > 1
        % Impulsaenderung bei hartem Rueckstosz fuer Kx an den
        % IntervallEnden -1,+1
        if abs(qngKhilf(1)) > 1
            % vorherige Impuls wird teilweise negiert
            pngKhilf = [-pngK(1), pngK(2)];
        end %[Kx RueckstoszImpuls]
        % Impulsaenderung bei hartem Rueckstosz fuer Ky an den
        % IntervallEnden 0.1,2.1
        if abs(qngKhilf(2)-1.1)> 1
            % vorheriger Impuls wird teilweise negiert
            pngKhilf = [ pngK(1),-pngK(2)];
        end %[Ky RueckstoszImpuls]
        % vorheriger Ort wird (als Ganzes) beibehalten
        qngKhilf = qngK;
    end %[HARTER RUECKSTOSZ]

    % Der naechste PhasenWert ist der im StoermerVerfahren berechnete
    % mit Korrekturen, falls der Wert die IntervallEnden ueberschreitet

```

```

qngK = qngKhilf;
pngK = pngKhilf;

% Intervallueberpruefung : praktisch UEBRERFLUESSIG
% Bei Nicht-Rueckkehr in das zugehoerige Intervall : Meldung, Abbruch
if ~(abs(qngK(1))<= 1 && abs(qngK(2)-1.1) <= 1)
    figure(i)
text(.05,.5,['\fontsize{12} {\color{red}}'...
    'Einer der Koerper hat seinen Bereich verlassen!'])
text(.25,.7, '\fontsize{12} Iteration mit Ctrl-C abbrechen!' );
disp('Einer der Koerper hat seinen Bereich verlassen!')
disp(num2str([qngK,pngK]))
disp('Iteration mit Ctrl-C abbrechen !');

% Sicherung des bisher erreichten Workspace
% (Gespeicherte Daten von Vorlaeufen werden nicht
% durch Werte dieses abgebrochenen Laufes ueberschrieben!)
save Abbruchwssicherung;

% Moeglichkeit, innerhalb 1 Minute manuell abzuberechnen
pause(60);
% Danach ZwangsAbbruch des Programms
quit;

end %[Intervallueberpruefung]

% Graphische Darstellung der generalisierten Orte des anstehenden
% Teilschrittes
if graphDarst==1 && mod(i,teilschr)==0
    figure('Name',['Bild',num2str(i),': nach ',num2str(i*dt),' sek']);
    hold on;
    % Startpunkt (rot)
    plot(outgK(1,i-teilschr+1),outgK(2,i-teilschr+1), 'r.',
        (Frtstz) 'MarkerSize',30);

    % Gesamtverlauf (blau)
    plot(outgK(1,i-teilschr+1:i),outgK(2,i-teilschr+1:i));
    % Endpunkt (gruen)
    plot(outgK(1,i),outgK(2,i), 'g.', 'MarkerSize',30);
    % HindernisEllipse
    plot(0.2*cos(t),0.1+0.1*sin(t), 'k');

    % Bildrahmen
    axis([-1 1 0.1 2.1]);
    xlabel('gen.Koord q1(t));
    ylabel('gen.Koord q2(t));
    grid on;
    title({'[ANZIEHEND eps=',num2str(eps),'; gen.Koord q2(t) gegen
        (Frtstz) gen.Koord q1(t) angetragen : '];...
    ['Verlauf von (' ,num2str(outgK(1,i-teilschr+1) ,'%1.5f'),...
        ',',num2str(outgK(2,i-teilschr+1) ,'%1.5f'),') ( rot)'...
        '--> (' ,num2str(qngK(1),'%1.5f'),...
        ',',num2str(qngK(2),'%1.5f'),') (gruen)'...
        ' in ',num2str(BlockZeit),' sec']});

    % Figur bleibt auf Bildschirm bis zur naechsten Figur erhalten.
    pause(2);

% Rettung der berechneten graphischen Teil-Darstellung als emf-Bild
% saveas(gcf,['T-Rohr-h TEST',num2str(i)],'fig');
close;

```

```

end %[graphische Darstellung]

end %[Iteration]

%*WorkspaceSicherung*:*Retten*von*Daten*fuer*eine*Fortsetzung*****
save wssicherung;

% Meldung, dass das Programm (ohne ZwangsAbbruch) zu Ende gekommen ist
disp('ProgrammEnde ohne ZwangsAbbruch erreicht')

%*ENDE stepperTRohrgK.m*****

toc

```

Die (Funktions-)Unterprogramme stormer4step.m und GeschwMatrix.m sind dieselben wie beim n-Körper-Problem (vgl. S.73 und S.75)

Zum Funktionsaufruf TRohrKraftMatrixgK(qngK) (TRohrKraftMatrixgK.m)
 Aufgabe : Berechnet die auf die Körper wirkenden generalisierten Kräfte, verursacht durch die zwischen den Körpern herrschende PaarKraft ($\sim 1/r^2$).
 (work\HSTRohrgK\TRohrKraftMatrixgK.m)

```

function TRohrKraftMatrixgK_OrtsMatrixgK =lokinParam(OrtsMatrixgK)
% Aus der OrtsMatrix=(q1,q2) - in den Spalten stehen die gen.Orte der
% Teilchen i=1,2 - wird berechnet die TRohrKraftMatrixgenKoord=(K1,K2)
% - in den Spalten steht die gen. Kraft auf das Teilchen i=1,2 -.

% Die Kraft (auf das Teilchen i) besteht aus
% der gen.PaarKraft (in Richtung der Intervalle), die durch das
% PaarPotential entsteht.

%*Konstanten*****

% PaarKraftKonstante (eps > 0 : anziehend, eps < 0 : abstoßend)
eps=0.6;

%*****
% Hier KEINE Endkräfte, dafür Reflektion in stepperTRohrgk.m

fak=(OrtsMatrixgK*OrtsMatrixgK')^(-1.5);
PaarKraft=-OrtsMatrixgK*fak;

TRohrKraftMatrixgK_OrtsMatrixgK=eps*PaarKraft;

%*ENDE TRohrKraftMatrixgK.m*****

```

Das Programm AuswertungTRohr (AuswertungTRohr.m) :

Aufgabe : Auswertung der von stepperTRohrgK erzeugten Ergebnissicherung wssicherung.mat : Berechnung des zeitlichen Mittelwertes der Energien, graphische Darstellung des zeitlichen Verlaufes der Energien, insbesondere der Verlauf der (geglätteten) kinetischen Energie des Körpers Kx.

(work\HSTRohrgK\AuswertungTRohr.m)

```
%Auswertung der von stepperTRohrgK.m erzeugten Daten wssicherung.mat

% (Datum : 28.02.2010) / K.S. fuer Thekla Breuer geb. Preisz (1885-1957)

tic;
clear;
clc;
close all;

% Laden der durch stepperTRohrgK.m berechneten Daten (Phasenraumkurve)
load wssicherung;

g=it/4;
eit =ones(it,1);
eg=ones(g,1);

%*Berechnung*der*EnergieMittelWerte*und*Glaettung*der*kin.*Energie*von*Kx

% kinetische Energie Kx (~Temperatur Kx)
kinEnKx=1/(2*massen(1))*outgK(3,:).^2 ;
% kinetische Energie Ky (~Temperatur Ky)
kinEnKy=1/(2*massen(2))*outgK(4,:).^2 ;
% kinetische und potentielle Energie gesamt (Hamilton-Funktion)
kupEngs=kinEnKx + kinEnKy - eps*(outgK(1,:).^2 + outgK(2,:).^2).^(-1/2);

%*globaler*Mittelwert*****
MWkinEnKx=1/it*(kinEnKx*eit);
MWkinEnKy=1/it*(kinEnKy*eit);
MWkupEngs=1/it*(kupEngs*eit);

% Daten kinEnKx(:) glaetten (nach wanderndem g-Durchschnitt)
% Speichervorbelegung
ggkinEnKx=zeros(1,it+1-g);
% Startwert
ggkinEnKx(1)=kinEnKx(1:g)*eg;
for i=2:it+1-g
    ggkinEnKx(i)=ggkinEnKx(i-1)-kinEnKx(i-1)+kinEnKx(i+g-1);
end % [glaetten schnell]
ggkinEnKx=ggkinEnKx/g;

%*Graphische*Darstellung*****
% (gesammeltes) Verhalten der kinetischen Energien von Kx und Ky und der
% (Gesamt-)Energie
```

```

figure('Name','Verhalten der Energien (kin.Energ. Kx, kin. Energ. Ky,
(FrtstzG)GesamtEnergie)');
hold on;
plot(kinEnKx,'g');
plot(kinEnKy,'r');
plot(kupEngs,'m');
xlabel([num2str(SimZeit,'%1.3f'),' Stdn-Zeit; 1Einh.~ '
(FrtstzG),num2str(dt,'%1.4f'),' sec']);
ylabel('kin.Energie von Kx(gruen)/Ky(rot)/GesamtEnergie(mag.)');
grid on;
title(['ANZIEHEND eps=',num2str(eps),'; kinetische Energie von
(FrtstzG)Kx(gruen)/Ky(rot)/GesamtEnergie(mag.)']);

figure('Name','geglattete kinetische Energie von Kx')
plot(ggkinEnKx(1,:), 'g');
xlabel([num2str(SimZeit,'%1.3f'),' Stdn-Zeit; 1Einh.~ '
(FrtstzG),num2str(dt,'%1.4f'),' sec']);
ylabel('kin.Energie von Kx(gruen)/Ky(rot)/GesamtEnergie(mag.)');
grid on;
title(['(Mit laufendem Durchschnitt ueber ',num2str(g),' ) geglaettete
(FrtstzG)kinetische Energie von Kx(gruen)']);

%*EnergieAenderung*von*Kx*in*der*unteren*Quadrathaelfte*****
dkinEnKx=zeros(1,it);
thalb=round(teilschr/2);
for i=1:it-thalb
    if outgK(4,i) < 0 && outgK(4,i+1) > 0 && i-thalb > 0
        % Hier wird die Aenderung der kinetischen Energie von Kx zwischen
        % ~(x1,1.1)(Mitte)-->(x2,0.1) (Aufschlag unten)
        % -->~(x3,1.1)(wieder Mitte) festgehalten.
        % In der oberen Haelfte (x,1.1-2.1) nur minimale Aenderung
        dkinEnKx(i)=1/2*massen(1)*(outgK(3,i+thalb)^2-outgK(3,i-thalb)^2);
    else
        dkinEnKx(i)=0;
    end
end %[Aenderung kinetische Energie von Kx im unteren Quadrat]

%Aufsummation der Aenderungen
s=0;
for i=1:it
    s=s+dkinEnKx(i);
end
disp(['Die (ungefaehre) Aenderung von
kinEnKx(Start)=' ,num2str(1/2*massen(1)*outgK(3,1)^2), ' bis
kinEnKx(' ,num2str(it-thalb), ') betraegt ', num2str(s)])
disp(['Zum Vergleich : kinEnKx(' ,num2str(it-thalb), ') = '
(FrtstzG),num2str(1/2*massen(1)*outgK(3,it-thalb)^2)]);

%*****
disp('_____');
disp('Programm normal zu Ende gekommen');
disp('_____');
disp('_____');

%*ENDE AuswertungTRohr.m*****
toc

```

Bemerkungen hinsichtlich der behandelten Beispiele

Das Rücklaufverhalten der Gasmoleküle

Das exakt rücklaufende Verhalten der kontinuierlichen Phasenraumkurve von mechanischen Systemen, die von einer reflektionssymmetrischen Hamilton-Funktion gesteuert werden, kann auch mit einer diskreten numerischen Phasenraumkurve nachvollzogen werden, wenn das numerische Verfahren zeitreversibel ist. Nach allgemeinem Volksglauben soll ein gewisses Funktional (die "Entropie") über lange Zeiten andauernd wachsen. Wie kann das (bei Rücklauf in den Ausgangszustand) sein?

Die Antwort ist, dass dabei Gebrauch gemacht wird von Boltzmann's "Hypothese des molekularen Chaos". Üblicherweise wird diese mit Überlegungen zur Korrelation der Teilchen gestützt. Das gerechnete Beispiel zeigt, dass im Rahmen der Hamiltonschen Formulierung der Mechanik die verloren gegangene Ordnung der Teilchen (ihre Position) sich für endliche Zeitintervalle wieder herstellen lässt, wenn es gelingt, zu einem Zeitpunkt alle Geschwindigkeiten gemeinsam umzukehren.

Der Einfluss von Rundungsfehlern für das Wiedererreichen des Ausgangszustandes nach Rücklauf wurde mit älteren Methoden u.a. von Orban und Bellemans [OB,1967] untersucht, vergleiche auch [PKM,1988]. Hinsichtlich der Ungenauigkeiten, die auf Grund von Rundungsfehlern entstehen, hat eine Gruppe in Jülich [Pap,2006] unter Verwendung des *StV*-Verfahrens die besten numerischen Ergebnisse vorgelegt. Es wäre interessant, in diese Ergebnisse das hier vorgestellte *StV4*-Verfahren miteinzubeziehen.

Mögliche Bedeutung des T-Rohr-Beispiels

Die Interaktion von kleinen und großen Teilchen, die verschieden sind, was ihre Masse angeht, ist ein Stiefkind der Statistischen Mechanik. Meist werden mehr oder weniger gleich große Massen und große Partikelanzahlen angenommen. Festzustellen, was mit einer einzelnen leichten Partikel passiert, wenn sie durch eine Wolke von schweren Teilchen fliegt, ist eine ungewohnte Fragestellung. Sie ist schwer numerisch zu behandeln. Es bot sich deshalb an, eine weitere Vereinfachung auf zwei Teilchen vorzunehmen und dann die Bewegung noch zusätzlich auf formal eine einzige Dimension zu reduzieren. Das ist das Paradigma der "T-Rohr-Statistischen-Mechanik", wie man es nennen könnte.

Erstaunlicherweise genügt diese Vereinfachung, um berühmte Vorstellungen zu überprüfen und zu bestätigen: Chandrasekhar erkannte schon 1943, dass schnelle leichte Teilchen von unkorrelierten schweren sich anziehenden Teilchen gebremst werden [Cha,1943]. Allerdings ist dieses Resultat, was die Möglichkeit unterschiedlicher Massen angeht, bisher weitgehend unbekannt geblieben.

Im vorgestellten T-Rohr-Beispiel konnte erstmals diese Erkenntnis mit einem unzweifelhaften numerischen Ergebnis verifiziert werden. Die dazu notwendigen langen Rechenzeiten auch auf Universitätsrechnern ermöglichten nur wenige Beispiele zu rechnen. Dennoch zeigten sie eindeutig das erwartete Ergebnis. Mit

anderen numerischen Verfahren wäre dieses Resultat möglicherweise in dieser Eindeutigkeit schwerer zu erhalten gewesen.

Mathematisch gesehen handelt es sich bei den genannten beiden T-Rohr-Beispielen um Hamiltonsches Chaos, vgl. [AFH,1995]. Diese Systeme enthalten in ihrem Phasenraum außer chaotischen (nichtperiodischen) noch quasiperiodische und periodische Trajektorien, die inselhaft in allen Größen als sogenannte "KAM-Tori" im Phasenraum eingebettet sind. Die gerechneten Beispiele zeigen, dass trotz der vorhandenen hohen numerischen Genauigkeit nach langer Zeit eine "nichtchaotische Insel" mit numerisch periodischem Verhalten die Trajektorie eingefangen hat. Untersuchungen zur Eindeutigkeit und numerischen Stabilität dieser Inseln – mit Algorithmen verschiedener Genauigkeit – erscheinen lohnend. Sie sind notwendig sehr zeitintensiv.

Das gefundene Hauptresultat ist die numerische Bestätigung von "dissipativem" und "antidissipativem" Verhalten bei Hamiltonschen Vielteilchensystemen je nach Vorzeichen der Potentiale. Das heißt im letzteren Fall, dass das leichte schnelle Teilchen kinetische Energie an das schwere Teilchen abgibt. Dieses an zwei Teilchen verschiedener Masse erzielte bemerkenswerte Resultat harret nun seiner Bestätigung oder Einschränkung an Vielteilchensystemen, siehe folgende Schlussbemerkungen und Ausblick.

Schlussbemerkungen und Ausblick

Die vorliegende mathematische Arbeit beschäftigt sich mit einem derzeit aktuellen numerischen Thema, der Gewinnung und Benutzung relativ hochgenauer, universeller und sogenannter symplektischer Simulationsalgorithmen für mechanische Hamiltonsche Systeme bei Langzeitberechnungen. Solche universellen Verfahren werden bereits in verschiedenen Arbeitsgruppen verwendet. Die Herleitungen sind dabei oft von einer vornehmen mathematischen Art in dem Sinn, dass dabei umfangreiche mathematische Hilfssätze (z.B. Differentialformenkalkül) benutzt werden. Ihre generelle Anwendbarkeit steht meist weniger im Vordergrund in dem Sinn, dass erwartet wird, dass andere Arbeitsgruppen ihre eigenen, mehr oder weniger gleichwertigen Algorithmen selbst erstellen.

Der in der vorliegenden Arbeit vorgestellte StV4-Algorithmus ist besonders durchsichtig in seiner durchgängig elementaren Herleitung. Und er ist robust insofern, als er maximal leicht zu kopieren bzw. zu übernehmen und zu installieren ist.¹

Das alteingesessene RK4-Verfahren (Runge-Kutta 4. Ordnung) diene hierbei als Vorbild und Richtschnur. Dieses ist ja leider trotz seiner Universalität nicht so sehr für Langzeit- und Rücklauf-Berechnungen bei Hamiltonschen Systemen geeignet (weniger langzeit-stabil, nicht zeitreversibel). StV4 könnte diese als dringend empfundene Lücke für diese Systemklasse schließen als eine Art bevorzugtes "Arbeitspferd".

Der dritte praktische Teil beschäftigt sich mit zwei in der Praxis wichtigen Prototyp-Klassen von mechanischen Hamilton-Systemen, nämlich der Molekulardynamik und der Himmelsmechanik. Im ersten Fall geht es um ein Gas, das, sich eine Zeit selbst überlassen, nach Impulsumkehr wieder in den (geordneten) Anfangszustand zurück geführt werden konnte. Ein historisches Vorbild waren hierbei die Untersuchungen von Orban und Bellemans [OB,1967]. Das zweite Beispiel gehört in eine andere "Klasse" von Hamilton-Systemen, in die sogenannte Himmelsmechanik. Hier gibt es – im Gegensatz zur Molekulardynamik – Vielteilchensysteme mit anziehendem Potential (statt dem überwiegend abstoßendem Lennard-Jones Potential in der Molekulardynamik).

Ein "Gas aus Sternen" spielt z.B. in der Theorie der Kugelsternhaufen eine große Rolle. Der große Theoretiker in diesem Bereich war Subrahmanian Chandrasekhar, zur jüngeren Zeit ist Piet Hut zu nennen. Ein berühmtes Problem ist hierbei der "Core-Collapse", der noch nicht verstanden ist.

Eine ungelöste Frage ist in diesem Zusammenhang, ob in diesem Hamiltonschen Vielteilchensystem ebenfalls die Maxwell-Verteilung gilt. Man weiß, dass bei Hinzufügen von attraktiven kurzreichweitigen Potentialen in der Molekulardynamik sogenannte Virialkoeffizienten bei der Berechnung des Gleichgewichtes ins Spiel

¹ Programme, die das traditionelle symplektische (einfache) Störmer-Verlet-Verfahren StV benutzen, können durch einfache Code-Änderung von drei Zeilen auf das StV4-Verfahren umgestellt werden, indem ein StV-Schritt durch 3 StV-Schritte mit den richtigen skalierten Schrittweiten ersetzt wird, vgl. (for ... end)-Aufruf in dem MatLab-Programm stormer4step.m S. 73.

kommen. Das führte zu der Ansicht, dass es auch in der Himmelsmechanik eine Version der Maxwell-Verteilung geben müsste. Das wurde z.B. von Chandrasekhar in seiner klassischen Arbeit von 1943 vermutet. Diese Frage ist jedoch bis heute ungelöst.

Die numerische Behandlung derartiger Vielteilchenprobleme ist problematisch. Unpublizierte Versuche von Florian Grond (2005) und John Kozak mit Jack Brezinski (2009) erbrachten kein vorzeigbares Ergebnis. Wegen dieses Dilemmas kam die Idee auf, die überwiegende Mehrzahl der gravitierenden Teilchen in eine einzige Masse zu verdichten und darüber hinaus das Problem auf eine einzige Dimension zu reduzieren. So entstand das T-Rohr-Beispiel: Es dient der Erzielung verlässlicher quantitativer Abschätzungen hinsichtlich der Erkundung eines neuen qualitativen Verhaltens bei Vielteilchensystemen, das der Maxwell-Verteilung widerspricht. Natürlich kann man bei zwei Teilchen keine Gleichgewichtsverteilung erwarten. Dennoch wäre ein Befund, bei dem das Äquipartitionsprinzip (das Herz der Maxwell-Verteilung) verletzt ist, im Hinblick auf die numerisch derzeit noch nicht zugängliche größere Fragestellung relevant. All dies nur als Entschuldigung für die Vorstellung eines so trivialen Hamiltonschen Zwei-Teilchensystems, wie es in der Geometrie der T-Rohr-Anordnung dargestellt ist.

Konkret ergab sich in mehreren Langzeitsimulationen ein konvergierendes Resultat: Das schnelle leichte Teilchen verlor über lange Zeiträume Bewegungsenergie an das schwere Teilchen. Das ist sehr überraschend. Es widerspricht eklatant der möglichen Ausbildung einer Maxwell-Verteilung, wenn das Resultat sich als verallgemeinerbar erweist.

Noch schlimmer: Eine Umkehrung der Zeitrichtung bei derselben Anfangsbedingung wird notwendig dasselbe qualitative Verhalten des leichten Teilchens erzeugen, Verlust an kinetischer Energie. Was vollkommen unerwartet ist. Wenn jedoch nach einer gewissen Rechenzeit die Bewegungsrichtung umgekehrt wird, läuft das Teilchen natürlich zum Energiemaximum zurück. Man kennt diese Fragestellung aus Boltzmann's Arbeiten und seiner Einführung des Begriffes der "Hypothese des molekularen Chaos". Mit anderen Worten: Wir befinden uns hier mitten im Herzen der Statistischen Mechanik. Ungewohnt ist nur, dass an die Stelle eines äquipartitionierenden (gleichverteilenden) nun ein anti-äquipartitionierendes (disproportionierendes) Verhalten getreten ist.

Das heuristisch gefundene Resultat soll nicht überbewertet werden, aber es sieht so aus, als ob die numerische Untersuchung mit robust symplektischen Algorithmen bei Systemen dieser Art eine Zukunft besitzen könnte.

Literaturverzeichnis

- [Arn, 1989] V.I. Arnol'd. *Mathematical Methods of Classical Mechancs*. New York : Springer-Verlag, 2nd edition, 1989.
- [AFH, 1995] J. Argyris, G. Faust, M. Haase. *Die Erforschung des Chaos*. Braunschweig, Wiesbaden : Vieweg, 1994.
- [BCM, 2008] S. Blanes, F. Casas and A. Murua. *Splitting and Composition Methods in numerical Integration of differential Equations*. Bol.Soc.Esp.Mat.Apl., **45**(2008)83-145
- [Beu, 2002] O. Beucher. *MATLAB und Simulink , Grundlegende Einführung*. Bonn : Addison-Wesley, 2.Auflage, 2002.
- [CH, 1986] G. Ciccotti and W.G. Hoover (eds). *Molecular Dynamics Simulations of Statistical Mechanical Systems*. North Holland, Amsterdam 1986. Dort der Beitrag von H.J.C. Berendsen and W.F. van Gunsteren *Practical Algorithms for Dynamic Simulations*.
- [Cha, 1943] S. Chandrasekhar. *Principles of Stellar Dynamics (1943)*. New York : Dover Publications, Inc., enlarged edition, 2005.
- [HL, 1997] E. Hairer and Ch. Lubich. *The life-span of backward error analysis for numerical integrators*. Numer. Math., **76**(1997)441-462.
- [HLW, 2002] E. Hairer, Ch. Lubich and G. Wanner. *Geometric Numerical Integration*. Berlin Heidelberg : Springer-Verlag, 2002.
- [LR, 2005] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge UK : Cambridge University Press, 2005.
- [McQ, 2006] R.I. McLachlan and R. Quispel. *Geometric Integrators for ODEs*. J.Phys.A : Math.Gen., **39**(2006)5251-5285.
- [OB, 1967] J. Orban and A. Bellemans. *Velocity-Inversion and Irreversibility in a Dilute Gas of Hard Disks*. Physics Letters **24A**(1967)620-621.
- [Pap, 2006] Th. Papke. *Integrationsverfahren für molekulardynamische Simulationen : Untersuchungen zur Effizienz und Genauigkeit*. Interner Bericht. Forschungszentrum Jülich, 2006.
- [PKM, 1988] I. Prigogine, E. Kestemont and M. Mareschal. *Velocity Correlations and Irreversibility : A Molecular Dynamics Appraoch*. In : From Chemical to Biological Organization (M. Markus, S.C. Müller and G. Nicolis eds.), pp.22-26. Berlin : Springer-Verlag, 1988.
- [Roe, 1983] O.E. Röessler. *Macroscopic Behavior in a Simple Chaotic Hamiltonian System*. Lecture Notes in Physics **179**(1983)67-77.

[Roe, 2010] O.E. Rössler. *Hun Tun versus Big Bang : How Classical Chaos implies both "Thermodynamics" and "Cryodynamics"*. Int.J.Bifurcation and Chaos (im Druck).

[Sin, 1970] Ya.G. Sina'i. *Dynamical systems with elastic reflections*, Russian Math.Surveys **25**(1970)137-189.

StichwortverzeichnisAbbildung

symplektische Abbildung 7

Differentialgleichung (Dgl)

Newton-Dgl 3

Hamilton-Dgl 4

zeitreversible Dgl 5

Energie

Gesamt-Energie (Hamilton-Funktion) 3

kinetische Energie 3

potentielle Energie 3

Fehlerbetrachtung

durch Forward Analysis 35

durch Backward Analysis 36

Fluss einer Dgl

als Zeit-parametrisierte Abbildungsschar 6

Zeit-Symmetrie des Flusses 6,15

schwache Zeit-Reversibilität des Flusses 15

Zeit-Reversibilität des Flusses 15

1.Variation eines Flusses 6

Symplektizität des Flusses 8

Hamilton-Funktion (HF)

mechanische HF 3

elektrodynamische HF 14

additiv aufgeteilte HF 4

reflektionssymmetrische HF 4

Matrizen

Masse-Matrix M 3

Struktur-Matrix J 4

Reflektions-Matrix S 4

Numerische Verfahren

Euler-Verfahren 33

EulerA-Verfahren 43

EulerB-Verfahren 47

Störmer-Verlet-Verfahren 51

StV4 als symmetrische Dreifach-Verknüpfung 54

Ordnung verschiedener Verfahren 64

Vererbung von Eigenschaften

bei Zweifach-Verknüpfung 7,16

bei symmetrischer Dreifach-Verknüpfung 16

Akademische Lehrer

Köln

Reine Mathematik :

K. Dörge
F.W. Schäfke
H. König

Angewandte Mathematik :

J. Schröder
Th. Meis
R. Bulirsch

Exp. Physik :

F. Kirchner

Theo. Physik :

F. Sauter
P. Mittelstaedt

Org. Chemie :

E. Vogel

Anorg. Chemie :

F. Fehér

Tübingen

Chaostheorie :

O.E. Rössler

Ergänzungen Theo. Physik :

K. Bräuer

Theo. Mechanik :

H. Yserentant

Lebenslauf

Ich wurde am 30.06.1942 als Sohn des Bauingenieurs Joseph Sonnleitner und seiner Ehefrau Hildegard, geborene Breuer, in Frauenthal/Liblar (bei Köln) geboren.

Von 1948 bis 1952 besuchte ich die Katholische Volksschule Horrem, anschließend bis 1961 das Staatliche altsprachliche Dreikönigsgymnasium in Köln.

Nach Militärzeit (Marine) und Programmierstätigkeit habe ich an der Universität Köln Mathematik mit Nebenfach Physik studiert und 1983 mit Diplom abgeschlossen. Thema der Diplomarbeit "Fehlerabschätzungen bei Interpolation in Sobolev-Räumen".

Nach weiterer Tätigkeit als Mentor der Fern-Universität Hagen und als Programmierer in der Materialfluss-Planung (Köln und Tübingen) habe ich 2004 Kontakt zur Universität Tübingen aufgenommen und unter Anleitung von Prof.Dr.O.E. Rössler im Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Tübingen bis 2010 diese Dissertation erstellt.

Danksagung

Den Vorschlägen meines Betreuers O.E. Rössler folgend, habe ich versucht, einiges seiner Ideenwelt (insbesondere die T-Rohr-Simulation) mathematisch zu formulieren. Den Diskussionen zwischen ihm und Herrn Kollegen Doktor Frank Kuske über Phänomene im Weltall und deren mögliche Deutung war ich leider nicht immer gewachsen. Soweit ich das beurteilen kann, haben sie mich beide behutvoll in die Geheimnisse dieser Welten eingeführt.

Im Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Tübingen habe ich eine sehr zuvorkommende Behandlung erfahren, wofür ich allen danken möchte : Prof.Dr.Günter Häfeling (Chemie), Prof.Dr.Dr.Peter Ruth (Pharmazie), Dr.Wolfhard Koch, Dr.Jörg Becker, Dr.Dietrich Hoffmann, Dr.Georg C. Hartmann, Dr.Dieter Fröhlich (alle Chemie), Dr.Michael Bäcker (Pharmazie), Prof.Dr.Nils Schopohl (Physik), PD.Dr.Kurt Bräuer (Physik), Dr.Frank Kuske (Physik).

Mich hat immer sehr gewundert, welchen Anteil die Genannten meinem (ihnen wahrscheinlich sehr fremden) Tun entgegen gebracht haben.

Zu Hause in Köln hat mein Studienkollege StR Klaus Schneider (Geschwister-Scholl-Gymnasium, Düsseldorf) mich von vielen Sorgen frei gehalten.

Stans in aliorum umeris tandem pensum propositum feliciter absolvi ... (26.04.2010)