

# Splitting-Verfahren

Juri Chomé

Mathematisches Institut der Universität Basel



## Einführung

Die Idee hinter Splitting-Verfahren ist, in günstigen Fällen, Teile einer gewöhnlichen Differentialgleichung einzeln exakt zu berechnen und diese Information zur Lösung des gesamten Systems zu nutzen. Eine grosse Sparte sind *Hamiltonsche Systeme*, zu denen die Schrödingergleichung und das Fermi-Pasta-Ulam Problem gehören.

Vorteil dieser Verfahren ist unter anderem eine aussergewöhnlich einfache Implementierung. Für die Analyse qualitativer Merkmale ist die gute Energieerhaltung zudem von Wichtigkeit.

### Ausgangslage und Verfahren

Wir betrachten eine gewöhnliche Differentialgleichung in  $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R})$ , die sich in zwei Komponenten aufspalten lässt deren Flüsse man exakt berechnen kann. Gegeben ist demnach

$$\dot{y} = f^{[1]}(y) + f^{[2]}(y)$$

und der jeweilige exakte Fluss  $\varphi_t^{[j]}$  der Gleichung  $\dot{y} = f^{[j]}(y)$ . Mit einer Schrittweite  $h$  ergibt sich daraus das *Lie-Trotter* Splitting-Verfahren

$$\Phi_h = \varphi_h^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]}$$

und das dazu adjungiert Verfahren  $\Phi_h^* = \varphi_h^{[2]} \circ \varphi_h^{[1]}$ . Eine mögliche Variante ist, das Verfahren

$$\Psi_h = \varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]}$$

zu betrachten, bekannt unter dem Namen *Strang Splitting*. Letzteres lässt sich allerdings zurückführen auf die Verknüpfung beider *Lie* Splitting-Verfahren:

$$\Psi_h = \varphi_{h/2}^{[1]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[2]} \circ \varphi_{h/2}^{[1]} = \Phi_{h/2} \circ \Phi_{h/2}^*.$$

## Ordnung

Mittels Taylorentwicklung sehen wir dass *Lie-Trotter* erste Ordnung besitzt:

$$\begin{aligned} \Phi_h(y_0) &= y_0 + h(f^{[1]}(y_0) + f^{[2]}(y_0)) + \mathcal{O}(h^2) \\ &= (\varphi_h^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]})(y_0) + \mathcal{O}(h^2). \end{aligned}$$

Allgemein kann man Verfahren höherer Ordnung bilden mittels Verknüpfung adjungierter Verfahren und geeignet gewählten Koeffizienten  $a_1, \dots, a_m, b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$ :

$$\Psi_h := \Phi_{b_m h} \circ \Phi_{a_m h}^* \circ \dots \circ \Phi_{b_1 h} \circ \Phi_{a_1 h}^*$$

mit  $\sum(a_i + b_i) \stackrel{!}{=} 1$  und  $\sum(a_i^{p+1} + (-1)^p b_i^{p+1}) \stackrel{!}{=} 0$ . Sind letztere Bedingungen erfüllt, kann man zeigen dass, für  $\Phi_h$  der Ordnung  $p$ ,  $\Psi_h$  die Ordnung  $p+1$  haben wird. Hieraus folgt unter anderem, dass das *Strang Splitting* ein numerisches Verfahren der Ordnung 2 ist.

## Weitere Möglichkeiten

Zum Einen lassen sich weitere Verfahren finden, unter der schwächeren Voraussetzung, dass nur einer der beiden exakten Flüsse berechenbar ist. Zum Beispiel besitzt

$$\Phi_h = \varphi_h^{[1]} \circ \varphi_h^{[2]}$$

ebenfalls erste Ordnung für einen Integrator  $\Phi_h^{[2]}$  der Ordnung eins.

Eine andere naheliegende Überlegung ist, das Vektorfeld in mehr als zwei Terme aufzuteilen:  $\dot{y} = f^{[1]}(y) + \dots + f^{[N]}(y)$ . Unter anderem lässt sich wieder die offensichtliche Methode erster Ordnung bilden:

$$\Phi_h = \varphi_h^{[1]} \circ \dots \circ \varphi_h^{[N]}.$$

## Erinnerung: Hamilton-Gleichungen

Wir betrachten von jetzt an Gleichungen gegeben unter der Form

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y)$$

mit  $y = (p, q)$ , der dazugehörigen Hamilton-Funktion  $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$  und der Matrix  $J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix} = -J^{-1} = -J^T$ . Voraussetzung ist demnach, dass  $H = T + P$  so dass sich die exakten Flüsse  $\varphi_t^T$  und  $\varphi_t^P$  des jeweiligen Hamilton-Systems explizit berechnen lassen.

Für den exakten Fluss  $\varphi_t^H$  der Hamiltonschen Gleichung gilt die Eigenschaft der *Energieerhaltung*:

$$H(\varphi_t^H(y)) = H(y).$$

## Beispiel: Schrödingergleichung

Ein prominentes Beispiel aus der Physik ist die Schrödingergleichung

$$i\partial_t u(t, x) = -\Delta u(t, x) + V(x)u(t, x) + \lambda|u(t, x)|^2 u(t, x)$$

mit periodischen Randbedingungen  $u(0, x) = u_0(x)$  und  $t \in \mathbb{R}$ ,  $x \in \mathbb{T}^d$ , dessen Hamilton-Funktion folgende Form besitzt:

$$H(u, \bar{u}) = \int_{\mathbb{T}^d} (|\nabla u(x)|^2) dx + \int_{\mathbb{T}^d} (V(x)|u(x)|^2 + \frac{\lambda}{2}|u(x)|^4) dx =: P + T$$

wobei  $P(u, \bar{u})$  die potentielle und  $T(u, \bar{u})$  die kinetische Energie ist.

## Backward Error Analysis

Um den Fehler des *Lie-Trotter* Verfahren über lange Zeit zu beschreiben sucht man eine Hamilton-Funktion  $H_h$  so dass das Verfahren die dazugehörige Gleichung an den Zeitpunkten  $nh$  exakt löst:

$$(\Phi_h)^n = (\varphi_h^T \circ \varphi_h^P)^n \stackrel{!}{=} \varphi_{nh}^{H_h}.$$

Wir werden uns allerdings damit zufrieden geben müssen, dass dieses  $H_h$  nur bis auf ein Fehler  $\mathcal{O}(h^N)$  für ein beliebiges  $N$  die nötigen Bedingungen erfüllt und schreiben deshalb  $H_h^N$ . Im Folgenden bezeichne  $\Phi_h$  das Lie-Trotter-Splitting:

## Resultate der Fehlerrechnung

**Satz:** Seien  $N \in \mathbb{N}$ ,  $M > 0$  und  $h_0$  fix und  $H = P + T$  wie oben. Dann existiert eine Konstante  $C = C_{M,N,h_0}$  so dass für alle  $h < h_0$  eine glatte Hamilton-Funktion  $H_h^N$  existiert die für jedes  $y \in \mathbb{R}^{2d}$  mit  $\|y\| \leq M$  folgende Ungleichungen erfüllt:

$$\begin{aligned} |H(y) - H_h^N(y)| &\leq Ch \\ \|\varphi_h^{H_h^N}(y) - \Phi_h(y)\| &\leq Ch^{N+1}. \end{aligned}$$

**Corollar:** Seien  $y_0 \in \mathbb{R}^{2d}$  und  $M, N > 0$  gegeben. Definiere die Folge  $y_{n+1} := \Phi_h(y_n)$  und verlange, dass  $\|y_n\| \leq M \forall n \geq 0$ . Dann existiert ein  $h_0$  so dass für alle  $h < h_0$  folgendes gilt:

$$\begin{aligned} |H_h^N(y_n) - H_h^N(y_0)| &\leq Cnh^{N+1} \\ |H(y_n) - H(y_0)| &\leq ch \end{aligned} \quad \text{für } n \leq h^{-N}$$

mit Konstanten  $C$  und  $c$  in Abhängigkeit von  $N$  und  $M$ .

Der Fehler des Strang-Splitting lässt sich auf ähnliche Art beschreiben. Da das Verfahren die Ordnung 2 besitzt, kann man in den beiden obigen Aussagen den Term  $h$  verbessern zu  $h^2$ .

## Numerisches Beispiel: Das FPU-Problem

Zur Veranschaulichung der Erhaltungseigenschaften des *Strang-Splitting* im Vergleich mit dem expliziten und symplektischen Euler-Verfahren betrachten wir das gestörte *Fermi-Pasta-Ulam* Problem, das durch die Hamiltonfunktion

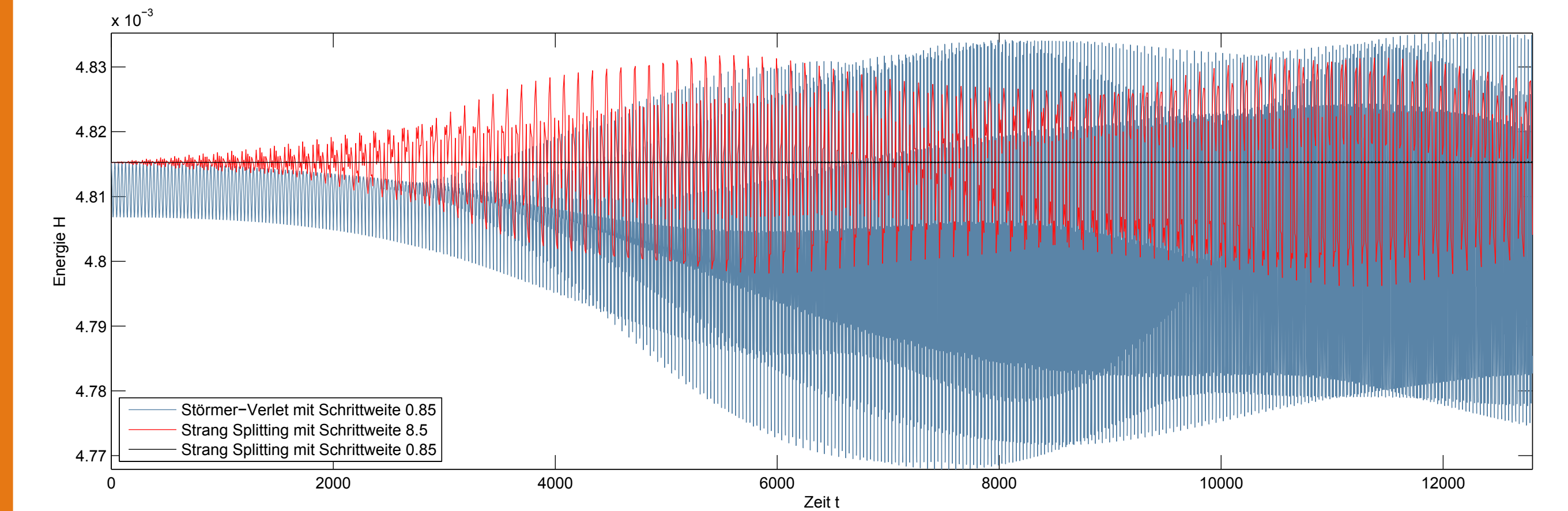
$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{N-1} p_i^2 + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (q_{i+1} - q_i)^2 + \frac{\varepsilon \lambda}{s} \sum_{i=1}^{N-1} (q_{i+1} - q_i)^s$$

gegeben ist, mit  $q_0 = q_N = 0$ . Für die Implementierung werden die Konstanten  $N = 32$ ,  $m = \kappa = 1$ ,  $\lambda = 1/4$ ,  $\varepsilon = 1$  und  $s = 3$  gewählt. Die Anfangsbedingungen lauten  $q_i = \sqrt{2/N} \sin(i\pi/N)$  und  $p_i = 0$ . Das betrachtete Zeitintervall hat die Länge  $200T$  mit  $T = \pi/\sin(\pi/2N)$ . Das Gleichungssystem wird in folgende Teile zerlegt:

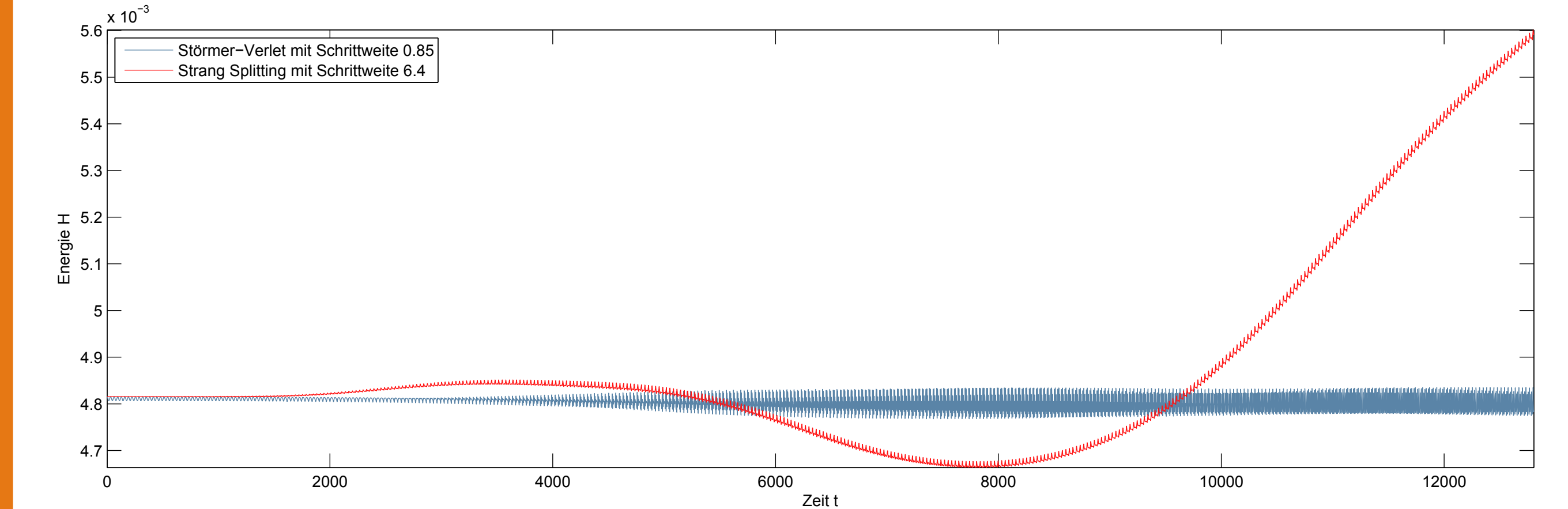
$$(1) \begin{cases} \dot{p}_i = -2q_i + q_{i+1} + q_{i-1} \\ \dot{q}_i = p_i \end{cases} \quad \text{und} \quad (2) \begin{cases} \dot{p}_i = \frac{1}{4}(q_{i+1} - q_i)^2 - \frac{1}{4}(q_i - q_{i-1})^2 \\ \dot{q}_i = 0. \end{cases}$$

Wir können (2) exakt lösen. Für (1) lautet der Fluss  $\varphi_t(y_0) = e^{At} \cdot y_0$ , wobei  $A$  die Matrix ist, die das linke Gleichungssystem beschreibt.

Da die Energie  $H(p, q)$  eine Erhaltungsgrösse ist, zeichnen wir die Evolution der Energie der numerischen Lösung in der Zeit. Das *Splitting-Verfahren* erhält die Energie besser als *Störmer-Verlet* bereits ab einem Zehnfachen der Schrittweite.



**Bemerkung:** Ein Nachteil ist, dass Splitting-Verfahren bei gewissen resonanten Schrittweiten die Energie stark verfälschen können. Das Problem kann teilweise umgangen werden, wenn man die Splitting-Verfahren mit geeigneten impliziten Integratoren kombiniert. Die zweite Grafik zeigt eine solche Situation bei dem vorgestellten Problem. Störmer-Verlet kann übrigens ebenfalls Resonanzprobleme aufweisen, hier dient die blaue Kurve aus der oberen Grafik lediglich als Vergleich.



## Literatur

- [1] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner: *Geometric Numerical Integration*
- [2] B. Leimkuhler, S. Reich: *Simulating Hamiltonian Dynamics*
- [3] E. Faou: *Geometric numerical integration of semilinear Hamiltonian PDEs* (<http://www.irisa.fr/ipso/perso/faou/ETH/ETH.html>)