Optimierung & Numerik — Vorlesung 11

11.8 Erhalt erster Integrale

Betrachte die autonome Differentialgleichung $x' = f(x)$ auf einem Phasenraum Ω_0.

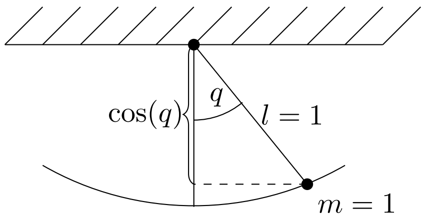
Definition. Eine Funktion $\mathcal{E}\colon \Omega_0 \to \mathbb{R}$ heißt **erstes Integral**, wenn

$$\mathcal{E}(\Phi^t x) = \mathcal{E}(x)$$

für alle $x \in \Omega_0$ und alle zulässigen t gilt.

Alternative Bezeichnungen: Invariante, Erhaltungsgröße, engl.: constant of motion

Beispiel. Mathematisches (Faden-)pendel



Bewegungsgleichungen für Winkel q:

$$\ddot{q} + \frac{g}{l}\sin q = 0$$

bzw. als System erster Ordnung:

$$\dot{p} = -mgl\sin q$$
$$\dot{q} = \frac{1}{ml^2}p$$

Erhält $\mathcal{E}(p,q) = \frac{1}{2}\frac{1}{ml^2}p^2 - mgl\cos q$ (die totale Energie).

Beispiel. Betrachte ein System mit N Partikeln

- $q_i \in \mathbb{R}^3,\ i = 1,\dots,N$ Positionen, $p_i \in \mathbb{R},\ i = 1,\dots,N$ Impulse
- m_i: Massen
- Paarweise Interaktion über Kräfte, die vom Abstand abhängen.

Bewegungsgleichungen:

$$q_i' = \frac{p_i}{m_i}, \qquad p_i' = \sum_{j=1}^{N} \nu_{ij}(q_i - q_j)$$

mit

$$\nu_{ij}(y) = -\nu_{ji}(-y)$$

daraus folgt insbesondere dass $\nu_{ii} = 0$.

Die Bewegungsgleichungen erhalten den Gesamtimpuls $P = \sum_{i=1}^N p_i$, denn

$$\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^N p_i = \sum_{i=1}^N p_i' = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \nu_{ij}(q_i - q_j) = 0$$

Ebenso: Der Gesamtdrehimpuls $L = \sum_{i=1}^N q_i \times p_i$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\sum_{i=1}^N q_i \times p_i &= \sum_{i=1}^N q_i' \times p_i + \sum_{i=1}^N q_i \times p_i' \\ &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \underbrace{p_i \times p_i}_{=0} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N q_i \times \nu_{ij}(q_i - q_j) \\ &= 0.\end{aligned}$$

Klassifikation der Erhaltungsgrößen: (für diese Beispiele)

- Impuls: linear
- Drehimpuls: quadratisch
- Energie beim Fadenpendel: nichtlinear

Man hätte nun gerne numerische Verfahren, die erste Integrale erhalten.

Zunächst eine einfache Charakterisierung mit Hilfe von f:

Lemma 11.15 ([DB08, 6.56]). Sei f lokal Lipschitz-stetig. Eine Funktion $\mathcal{E} \in C^1(\Omega_0, \mathbb{R})$ ist genau dann erstes Integral, wenn

$$\nabla\mathcal{E}(x) \cdot f(x) = 0$$

für alle $x \in \Omega_0$.

Beweis. Die Kettenregel liefert $0 = \frac{d}{dt}\mathcal{E}(\Phi^t x) = \nabla\mathcal{E}(\Phi^t x) \cdot \frac{d}{dt}\Phi^t x = \nabla\mathcal{E}(\Phi^t x) \cdot f(\Phi^t x)$. □

Beispiel. Wir zeigen Energieerhaltung des Fadenpendels. Für dieses Modell gilt:

$$\begin{aligned} f(x) = f(p,q) &= \begin{pmatrix} -mgl\sin q \\ \frac{p}{ml^2} \end{pmatrix} \\ \mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(p,q) &= \frac{1}{2}\frac{p^2}{ml^2} - mgl\cos q \end{aligned}$$

Der Gradient der Energie ist

$$\nabla\mathcal{E}(p,q) = \begin{pmatrix} \frac{p}{ml^2} \\ mgl\sin q \end{pmatrix}$$

Damit erhält man

$$\nabla\mathcal{E}(p,q) \cdot f(p,q) = \frac{p}{ml^2}(-mgl\sin q) + mgl\sin q\frac{p}{ml^2} = 0$$

Satz 11.18 ([HLW16, Thm. IV.1.5]). Alle Runge-Kutta-Verfahren erhalten lineare Invarianten.

Beweis. Sei $\mathcal{E}$ lineare Invariante, also $\mathcal{E}(x) = d^T x$ mit festem Vektor d. Nach dem vorigen Satz ist dann $d^T f(x) = 0$ für alle $x \in \Omega_0$. Für eine Stufe k_i eines beliebigen RK-Verfahrens ist dann

$$d^T k_i = d^T f\Big(x + \tau \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j\Big) = 0.$$

Also ist

$$\mathcal{E}(x_{k+1}) = d^T x_{k+1} = d^T \Big(x_k + \tau \sum_{i=1}^{s} b_i k_i\Big) = d^T x_k = \mathcal{E}(x_k)$$

□

Für die quadratischen Invarianten betrachten wir zunächst einen wichtigen Spezialfall:

Frage: Für welche linearen autonomen Differentialgleichungen $x' = Ax$ erhält der Phasenfluss Φ^t die Euklidische Norm $\|\Phi^t x\|_2 = \|x\|_2$ für alle t? **Antwort:** Genau dann, wenn $\Phi^t = \exp(tA)$ eine orthogonale Matrix ist.

Satz 11.19 ([DB08, 6.18]). Sei $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$. Die Matrix $\exp(tA)$ ist genau dann orthogonal, wenn A schiefsymmetrisch ist.

Beweis. **(⇒)** Sei $\exp(tA) \in O(d)$ für alle t. Dann ist

$$I = \exp(tA)^T \exp(tA) = \exp(tA^T)\exp(tA).$$

Differenziere nach t und betrachte $t = 0$

$$0 = \Big(A^T \exp(tA^T)\exp(tA) + \exp(tA^T) A \exp(tA)\Big)\Big|_{t=0} = A^T + A$$

(⇐)

$$\begin{aligned} I &= \exp(tA - tA) = \exp(tA)\cdot\exp(-tA) \quad \text{(da } A \text{ mit } A \text{ kommutiert)}\\ &= \exp(tA)\cdot\exp(tA^T)\\ &= \exp(tA)\cdot\exp(tA)^T \end{aligned}$$

□

Zentral ist anscheinend die Eigenschaft

$$\exp(z)\cdot\exp(-z) = 1 \qquad \forall z \in \mathbb{C}.$$

Das nennt man **Reversibilität**.

Man hätte diese Eigenschaft gerne auch für diskrete Verfahren.

Definition. Eine diskrete Evolution Ψ heißt reversibel, wenn

$$\Psi^{t,t+\tau}\Psi^{t+\tau,t}x = x$$

für alle $(t,x) \in \Omega$ und hinreichend kleine τ.

Beispiel. Das explizite Euler-Verfahren ist nicht reversibel.

Reversible rationale Approximationen der Exponentialfunktion erzeugen normerhaltende diskrete Flüsse.

Satz 11.20 ([DB08, 6.21]). Sei R eine rationale, konsistente, reversible Approximation der Exponentialfunktion. Dann gilt für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$

$$R(\tau A) \in O(d) \qquad \forall \tau > 0$$

genau dann, wenn $A = -A^T$.

Beweis. Weitestgehend wie bei Satz 11.19. □

Beispiel.

$$R(z) = \frac{1+\frac{z}{2}}{1-\frac{z}{2}} = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{4} + \mathcal{O}(z^4) = e^z + \mathcal{O}(z^3)$$

- Die entsprechende Matrix-Abbildung heißt **Cayley-Transformation**.
- Stabilitätsfunktion insbesondere der impliziten Mittelpunktsregel $\to$ dem einfachsten Gauß-Verfahren.

Gauß-Verfahren erhalten sogar beliebige quadratische Invarianten!

Satz 11.21 ([DB08, 6.58]). Die Differentialgleichung $x' = f(x)$ mit lokal Lipschitz-stetigem f besitze das quadratische erste Integral $\mathcal{E}$, d.h.

$$\mathcal{E}(x) = x^T E x + e^T x + \eta$$

mit $E \in \mathbb{R}^{d\times d}$, $e \in \mathbb{R}^d$, $\eta \in \mathbb{R}$. Jedes Gaus-Verfahren erzeugt einen Phasenfluss Ψ, der $\mathcal{E}$ erhält, d.h.

$$\mathcal{E}(\Psi^\tau x) = \mathcal{E}(x)$$

für alle $x \in \Omega_0$ und zulässige τ.

Beweis. Ganz ähnlich wie der Beweis der B-Stabilität. Sei $x \in \Omega_0$, und τ so klein, dass das Kollokationspolynom

$$u \in P_s, \quad u(0) = x, \quad u(\tau) = \Psi^\tau x$$

existiert. Da $\mathcal{E}$ quadratisch ist, ist $q(\theta) := \mathcal{E}(u(\theta\tau))$ ein Polynom in P_{2s}. Der Hauptsatz der Integralrechnung liefert

$$\mathcal{E}(\Psi^\tau x) = q(1) = q(0) + \int_0^1 q'(\theta)\, d\theta = \mathcal{E}(x) + \int_0^1 q'(\theta)\, d\theta.$$

Zu zeigen ist nun also $\int_0^1 q'(\theta)\, d\theta = 0$. Nutze die Quadraturformel des Gauß-Verfahrens. Diese ist für Polynome in P_{2s-1} exakt:

$$\int_0^1 q'(\theta)\, d\theta = \sum_{j=1}^s b_j q'(c_j).$$

Es sind aber alle $q'(c_j) = 0$, denn

$$\begin{aligned} q'(c_j) &= \big(\mathcal{E}(u(c_j\tau))\big)' \\ &= \tau \nabla\mathcal{E}(u(c_j\tau)) \cdot u'(c_j\tau) && \text{(Kettenregel)} \\ &= \tau \nabla\mathcal{E}(u(c_j\tau)) \cdot f(u(c_j\tau)) && \text{(Kollokationseigenschaft)} \\ &= 0 && \text{(da } \mathcal{E} \text{ eine Invariante ist)} \end{aligned}$$

□

Was ist mit der Energieerhaltung des Fadenpendels? $\to$ Das behandeln wir später mit der Theorie der Hamiltonschen Systeme.

Literaturverzeichnis

[DB08] Peter Deuflhard and Folkmar Bornemann. *Numerische Mathematik 2 – Gewöhnliche Differentialgleichungen.* de Gruyter, 2008.

[HLW16] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. *Geometric Numerical Integration—Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.* Springer, zweite auflage edition, 2016.