Optimierung & Numerik — Vorlesung 11

11.8 Erhalt erster Integrale

Betrachte die autonome Differentialgleichung

$$x' = f(x)$$

auf einem Phasenraum Ω_0.

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

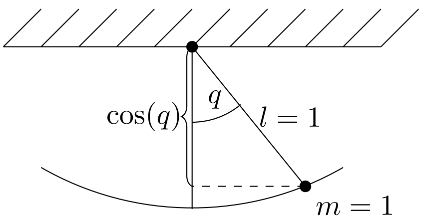
$$\mathcal{E}(\Phi^t x) = \mathcal{E}(x)$$

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:

$$\begin{aligned}\dot{p} &= -mgl\sin q\\ \dot{q} &= \frac{1}{ml^2}p.\end{aligned}$$

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 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. Kettenregel:

$$0 = \frac{d}{dt}\mathcal{E}(\Phi^t x) = \nabla\mathcal{E}(\Phi^t x) \cdot \frac{d}{dt}\Phi^t x = \nabla\mathcal{E}(\Phi^t x) \cdot f(\Phi^t x). \qquad \square$$

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

$$f(x) = f(p,q) = \begin{pmatrix} -mgl\sin q \\ \frac{p}{ml^2} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}(p,q) = \frac{1}{2}\frac{p^2}{ml^2} - mgl\cos q$$

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

$$\|\Phi^t x\|_2 = \|x\|_2 \quad \forall t?$$

$\Rightarrow$ 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. Teil I) $\exp(tA) \in O(d) \Rightarrow A = -A^T$

- 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 $t = 0$

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

Teil II) $A = -A^T \Rightarrow \exp(tA) \in O(d)$

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

□

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 (Db & Bo 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 D.Gl. $x' = f(x)$ mit lokal Lipschitz-stetigem f besitze das quadratische erste Integral $\mathcal{E}$, d.h.

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

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.

- $\mathcal{E}$ ist quadratisch. Deshalb ist
$$q(\theta) := \mathcal{E}(u(\theta\tau))$$
ein Polynom in P_{2s}.
- Hauptsatz der Integralrechnung:
$$\mathcal{E}(\Psi^\tau x) = q(1) = q(0) + \int_0^1 q'(\theta)\, d\theta = \mathcal{E}(x) + \int_0^1 q'(\theta)\, d\theta.$$
- Zu zeigen ist also $\int_0^1 q'(\theta)\, d\theta = 0$.
- Nutze 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
$$\begin{aligned} q'(c_j) &= \big(\mathcal{E}(u(c_j\tau))\big)' \\ &= \tau \nabla \mathcal{E}(u(c_j\tau)) \cdot u'(c_j\tau) \quad \text{(Kettenregel)} \\ &= \tau \nabla \mathcal{E}(u(c_j\tau)) \cdot f(u(c_j\tau)) \quad \text{(Kollokationseigenschaft)} \\ &= 0 \quad \text{(da } \mathcal{E} \text{ eine Invariante ist).} \end{aligned}$$
$\square$

Was ist mit der Energieerhaltung des Fadenpendels?

- 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.