



WESTFÄLISCHE
WILHELMS-UNIVERSITÄT
MÜNSTER

Symplektische Integration und Bewegung von Teilchen in Potentialen

Gautam Dilip Banhatti

Bachelorarbeit im Institut für theoretische Physik
1-Fach-Bachelor Physik, WWU Münster

Erstgutachter: Prof. Dr. S.J. Linz
Zweitgutachter: Prof. Dr. G. Münster

Plagiatserklärung der / des Studierenden

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit über _____
_____ selbstständig verfasst worden ist, dass keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen benutzt worden sind und dass die Stellen der Arbeit, die anderen Werken – auch elektronischen Medien – dem Wortlaut oder Sinn nach entnommen wurden, auf jeden Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht worden sind.

(Datum, Unterschrift)

Ich erkläre mich mit einem Abgleich der Arbeit mit anderen Texten zwecks Auffindung von Übereinstimmungen sowie mit einer zu diesem Zweck vorzunehmenden Speicherung der Arbeit in eine Datenbank einverstanden.

(Datum, Unterschrift)

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Herleitung der Hamiltonfunktion	1
2.1 Newtonsche Mechanik	2
2.2 Relativistische Mechanik	3
3 Die symplektische Eigenschaft	4
4 Numerische Runge-Kutta-Methoden	7
4.1 Runge-Kutta (RK)	8
4.2 Partitioniertes Runge-Kutta (PRK)	9
4.2.1 Ein Schema expliziter, symplektischer PRK-Verfahren	9
4.2.2 Ein anderes Schema expliziter, symplektischer PRK-Verfahren	10
4.3 Runge-Kutta-Nyström (RKN)	10
4.3.1 Ein Schema expliziter, symplektischer RKN-Verfahren	11
4.4 Ordnung der Methoden	11
5 Verwendete numerische Methoden	12
6 Verwendete Testsysteme	14
6.1 Klassischer harmonischer Oszillator	15
6.2 Mathematisches Pendel	16
6.3 Relativistischer (an)harmonischer Oszillator	18
7 Untersuchung der numerischen Methoden	21
7.1 Klassischer harmonischer Oszillator	23
7.2 Mathematisches Pendel	27
7.3 Relativistischer (an)harmonischer Oszillator	38
8 Zusammenfassung und Diskussion	43

1 Einleitung

In dieser Arbeit geht es um die Untersuchung verschiedener numerischer Runge-Kutta-Methoden für die Berechnung der Trajektorien in hamiltonschen Systemen. Hierbei werden symplektische und nicht-symplektische Methoden verwendet. Wegen der zeitlichen Rahmenbedingungen der Arbeit wurden nur eindimensionale Probleme betrachtet. Insgesamt werden drei Beispiele hamiltonscher Systeme betrachtet, zwei hiervon aus der klassischen, nicht-relativistischen Mechanik (der harmonische Oszillator und das mathematische Pendel), das dritte aus der relativistischen Mechanik (der relativistische (an)harmonische Oszillator).

Zunächst werden die Begriffe eines hamiltonschen Systemes und die symplektische Eigenschaft hamiltonscher Systeme näher erläutert. Danach werden verschiedene Klassen numerischer Methoden eingeführt, hierzu zählen die Runge-Kutta- (RK), die partitonierten Runge-Kutta (PRK), und die Runge-Kutta-Nyström- (RKN) Methoden. Aus diesen werden dann sieben spezielle Verfahren ausgewählt, darunter symplektische und nicht-symplektische Methoden. Als nächstes werden die drei betrachteten Testsysteme beschrieben. Auf diese Testsysteme sind die ausgewählten numerischen Verfahren angewandt worden, und im letzten Teil der Arbeit werden die Ergebnisse dieser Berechnungen dargestellt, beschrieben und diskutiert. Zum Schluss werden die gewonnenen Erkenntnisse zusammengefasst, und es werden verschiedene Möglichkeiten genannt, die in dieser Arbeit begonnenen Gedanken und Untersuchungen weiterzuführen.

Warum sind diese Überlegungen relevant? Überall dort, wo Differentialgleichungen nicht analytisch gelöst werden können, muss auf Numerik zurückgegriffen werden. Dies ist jedoch immer mit numerischen Fehlern verbunden, welcher unter Umständen mit der Zeit zunimmt. Durch eine hohe Rechengenauigkeit, sowie der Wahl von Methoden einer hohen Ordnung kann der Fehler minimiert werden, jedoch kann sich auf langen Zeitskalen der Fehler häufen. Somit sind qualitative Aussagen über das Langzeitverhalten der Systeme, allein aus den Ergebnissen numerischer Berechnungen, im Allgemeinen problematisch oder sogar unmöglich.

Speziell bei hamiltonschen Systemen gibt es zusätzlich charakteristische Eigenschaften, wie die Energieerhaltung, und die Erhaltung des Phasenraumvolumens. Aus der symplektischen Eigenschaft folgt die Erhaltung des Phasenraumvolumens, welche durch numerische Simulationen bestenfalls erhalten werden sollten. Daher stellt sich die Frage, ob numerische Methoden, welche die symplektische Eigenschaft erfüllen, speziell für hamiltonsche Systeme geeigneter sind als bewährte nicht-symplektische Methoden. Interessant ist auch zu betrachten, ob die numerischen Lösungen auch auf langen Zeitskalen die exakte Lösung approximieren, oder sich von ihnen entfernen.

2 Herleitung der Hamiltonfunktion

Ein *hamiltonsches System* kann durch eine Funktion, die *Hamiltonfunktion* $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, und den zugehörigen *hamiltonschen Bewegungsgleichungen*

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}. \quad (1)$$

beschrieben werden. Dabei bezeichnet \mathbf{q} den Ort, und \mathbf{p} den Impuls. Im Folgenden werden hamiltonsche Systeme im Kontext der newtonischen (nicht-relativistischen) und der relativistischen Mechanik beschrieben.

2.1 Newtonsche Mechanik

Dieser Abschnitt folgt den Ausführungen aus [6].

Betrachte ein System aus Punktteilchen in einem Potential, mit evtl. holonomen Zwangsbedingungen, welches durch verallgemeinerte Koordinaten

$$q_1, \dots, q_n \quad (2)$$

beschrieben werden kann. Die weiteren Kräfte, welche neben den Zwangskräften auftreten, können folglich komplett durch ein Potential $V(q_1, \dots, q_n, t)$ beschrieben werden, und es lässt sich eine Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}, t) - V(q, t) \quad (3)$$

aufstellen. Hierbei ist $q = (q_1, \dots, q_n)$, und T ist die kinetische Energie. Es gelten die lagrangeschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (4)$$

Die verallgemeinerten Impulse werden durch

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}(q, \dot{q}, t) \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (5)$$

definiert. Diese Beziehungen können nach den $\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n$ aufgelöst werden, sodass eine Darstellung

$$q_i = q_i(q, p, t) \quad \text{für } i = 1, \dots, n \quad (6)$$

möglich ist. (Hier wurde die Notation $p = (p_1, \dots, p_n)$ verwendet). Die Hamiltonfunktion ist dann gegeben durch

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^n \dot{q}_i(q, p, t)p_i - \mathcal{L}(q, \dot{q}(q, p, t), t). \quad (7)$$

(Hier wurde die Kurzschreibweise $\dot{q} = (\dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$ verwendet.) Aus den lagrangeschen Bewegungsgleichungen ergeben sich die folgenden hamiltonschen Bewegungsgleichungen:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (8)$$

Seien nun $q(t), p(t)$ Lösungen dieser Bewegungsgleichungen. Es gilt:

$$\frac{d}{dt} H(q(t), p(t), t) = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) \quad (9)$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \quad (10)$$

$$= \frac{\partial H}{\partial t}. \quad (11)$$

Somit ist die Hamiltonfunktion H genau dann eine Konstante der Bewegung, wenn H nicht explizit von der Zeit abhängt, d.h. $H = H(q, p)$.

Ist die kinetische Energie nur quadratisch von den q_i abhängig, d.h. $T = \sum_{i,j=1}^n \alpha_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$, so ergibt sich

$$H(q, p, t) = T(p) + V(q, t), \quad (12)$$

d.h. die Hamiltonfunktion gibt in diesem Fall die Gesamtenergie des Systems an.

2.2 Relativistische Mechanik

Die Ausführungen in diesem Abschnitt sind sinngemäß aus [12] entnommen, wobei im Gegensatz zur Quelle der Begriff der relativistischen Masse *nicht* verwendet wird, sondern mit m die (Ruhe-)Masse bezeichnet wird. Der Grund für diese Wahl ist, dass die relativistische Masse nicht lorentz-invariant ist, im Gegensatz zur Ruhemasse.

Im Folgenden wird diese Schreibweise verwendet: Vierervektoren sind durch Großbuchstaben der Form $\{X^\alpha\} = \{X^0, X^1, X^2, X^3\}$ gegeben, wobei $\alpha = 1, 2, 3$ die räumlichen Komponenten sind. Dreidimensionale Vektoren sind durch fettgedruckte Kleinbuchstaben gegeben. Die Vierervektoren sind vom betrachteten Bezugssystem abhängig, bei einem Übergang zu einem anderen Bezugssystem muss eine Lorentz-Transformation auf die Komponenten angewandt werden.

Betrachte den Spezialfall eines einzelnen freien Teilchens in einem Potential. Im Folgenden werden zwei Bezugssysteme betrachtet: Ein festes Laborsystem S , bezüglich dessen das Potential bekannt ist, sowie das System S' , dass sich mit dem Teilchen mitbewegt. Die Zeit im Laborsystem S sei mit t bezeichnet, die *Eigenzeit des Teilchens* im System S' sei τ . Alle folgenden Vierervektoren beziehen sich auf das System S . Sei

$$\{Q^\alpha\} = \{ct, \mathbf{q}\}, \quad \alpha = 0, 1, 2, 3 \quad (13)$$

der Vierervektor, der die Position des Teilchens beschreibt. Verwende die gewohnten Bezeichnungen $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{q}}{dt}$, $\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt}$ für die Geschwindigkeit und Beschleunigung bezüglich S , und sei $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ der *Lorentzfaktor*. Für den Zusammenhang zwischen dt und $d\tau$ gilt:

$$\gamma d\tau = dt. \quad (14)$$

Die Vierergeschwindigkeit V^α und Viererbeschleunigung A^α sind dann durch

$$\{V^\alpha\} = \left\{ \frac{dQ^\alpha}{d\tau} \right\} = \gamma \left\{ \frac{dQ^\alpha}{dt} \right\} = \gamma \{c, \mathbf{v}\}, \quad \{A^\alpha\} = \left\{ \frac{dV^\alpha}{d\tau} \right\} = \gamma \frac{d}{dt}(\gamma \{c, \mathbf{v}\}) \quad (15)$$

gegeben. Sei \mathbf{f}_0 die Dreierkraft, die im Ruhesystem S' des Teilchens auf dieses wirkt. Die Viererkraft in S ist dann gegeben durch

$$\{F^\alpha\} = \left\{ \gamma \frac{\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{v}}{c}, \mathbf{f}_0 + (\gamma - 1) \frac{\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{v}}{v^2} \mathbf{v} \right\}. \quad (16)$$

Definiere den Viererimpuls durch $P^\alpha = mV^\alpha$. Die Bewegungsgleichungen sind gegeben durch

$$m \frac{d^2 Q^\alpha}{d\tau^2} = F^\alpha \quad \text{oder} \quad \frac{dP^\alpha}{d\tau} = F^\alpha \quad (17)$$

Dies sind lorentz-invariante Bewegungsgleichungen, welche im Ruhesystem S' des Teilchens in die newtonschen Bewegungsgleichungen übergehen.

Der Impuls ist in der relativistischen Mechanik durch $\mathbf{p} = \gamma m \mathbf{v}$ gegeben, was den räumlichen Komponenten von P^α entspricht. Definiere

$$\mathbf{f} = \frac{1}{\gamma} \mathbf{f}_0 + \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{\mathbf{f}_0 \cdot \mathbf{v}}{v^2} \mathbf{v}. \quad (18)$$

Mit diesen Bezeichnungen und den Bewegungsgleichungen ergeben sich die sog. *relativistischen Bewegungsgleichungen*

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{f}, \quad \frac{d}{dt}(\gamma mc^2) = \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}. \quad (19)$$

Die Kraft \mathbf{f} kann als diejenige Kraft verstanden werden, welche vom Laborsystem S aus gesehen auf das Teilchen wirkt. Wie man sieht, ist im Allgemeinen $\mathbf{f} \neq \mathbf{f}_0$. Doch falls \mathbf{f}_0 parallel oder senkrecht auf \mathbf{v} steht, ergeben sich folgende Beziehungen:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}_0 \quad \text{falls} \quad \mathbf{f}_0 \parallel \mathbf{v}, \quad (20)$$

$$\mathbf{f} = \frac{1}{\gamma} \mathbf{f}_0 \quad \text{falls} \quad \mathbf{f}_0 \perp \mathbf{v}. \quad (21)$$

Sei nun die Kraft \mathbf{f} durch ein Potential $V(\mathbf{q}, t)$ bzgl. des Laborsystems S gegeben, d.h. $\mathbf{f} = -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}, t)$. Dann lautet die Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = -\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}, t). \quad (22)$$

Gesucht ist nun eine Lagrangefunktion \mathcal{L} , sodass diese Bewegungsgleichung der Lagrangeschen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{q}} \quad (23)$$

entspricht. Dies ist für die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} - V(\mathbf{q}, t) \quad (24)$$

erfüllt. Der Übergang von der lagrangeschen zur hamiltonschen Formulierung erfolgt nun wie im nicht-relativistischen Fall: Setze

$$H = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathcal{L} = \gamma mc^2 + V(\mathbf{q}, t) = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} + V(\mathbf{q}, t), \quad (25)$$

wobei $\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}}$ der kanonische Impuls ist, der mit der bisherigen Definition $\mathbf{p} = \gamma m\mathbf{v}$ übereinstimmt.

Auch hier ergibt sich dann aus der lagrangeschen Bewegungsgleichung die hamiltonsche Bewegungsgleichung:

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}. \quad (26)$$

Diese Hamiltonfunktion gibt zudem die relativistische Energie an, denn

$$H = \gamma mc^2 + V = mc^2 + (\gamma - 1)mc^2 + V = E_0 + T + V, \quad (27)$$

dabei ist $E_0 = mc^2$ die Ruheenergie und $T = (\gamma - 1)mc^2$ die relativistische kinetische Energie.

Auch hier gilt genau dann Energieerhaltung, wenn die Hamiltonfunktion nicht explizit von der Zeit abhängt, d.h. wenn das Potential V nicht explizit von der Zeit abhängt.

3 Die symplektische Eigenschaft

Die Ausführungen aus diesem Abschnitt sind sinngemäß [1, vor allem Kap. 9], [11, Kap. 7] und [14, Kap. 2] entnommen.

Ausgangspunkt für die folgenden Betrachtungen ist das Integraltheorem von Poincaré-Cartan:

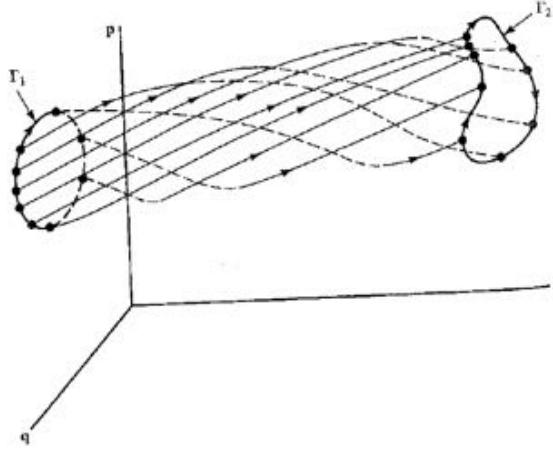


Abbildung 1: Skizze der geschlossenen Kurven Γ_1 und Γ_2 aus dem Integraltheorem von Poincaré-Cartan, Quelle: [11, Kap. 7].

Theorem (Poincaré-Cartan). *Sei ein Hamiltonsystem durch eine Funktion $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ gegeben. Betrachte den erweiterten Phasenraum $\{\mathbf{q}, \mathbf{p}, t\}$, und betrachte eine geschlossene Kurve Γ_1 in diesem Raum. Betrachte die Trajektorien durch die Punkte auf Γ_1 , welche die hamiltonschen Bewegungsgleichungen erfüllen, und eine beliebige andere geschlossene Kurve Γ_2 , welche dieselben Trajektorien umkreist (siehe Abb. 1). Dann ist der Wert des Integrals von $\mathbf{p} d\mathbf{q} - H dt = p_1 dq_1 + \dots + p_n dq_n - H dt$ (die sog. Poincaré-Cartan-Integralinvariante) entlang der Kurven Γ_1 und Γ_2 gleich:*

$$\oint_{\Gamma_1} \mathbf{p} d\mathbf{q} - H dt = \oint_{\Gamma_2} \mathbf{p} d\mathbf{q} - H dt. \quad (28)$$

Betrachte nun den Spezialfall geschlossener Kurven, die sich in den Ebenen konstanter Zeit befinden (vgl. Abb. 2), dann ist entlang dieser Kurven $dt = 0$, somit folgt der Spezialfall des Theorems:

Theorem (Symplektische Eigenschaft, Variante 1). *Sei ein Hamiltonsystem durch eine Funktion $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ gegeben. Betrachte den erweiterten Phasenraum $\{\mathbf{q}, \mathbf{p}, t\}$, und betrachte eine geschlossene Kurve γ_0 von Anfangswerten zum Zeitpunkt t_0 , und die geschlossene Kurve γ_1 zum Zeitpunkt t_1 , die durch die Zeitentwicklung dieser Anfangswerte gemäß den hamiltonschen Bewegungsgleichungen entsteht (siehe Abb. 2). Dann gilt*

$$\oint_{\gamma_1} \mathbf{p} d\mathbf{q} = \oint_{\gamma_2} \mathbf{p} d\mathbf{q}, \quad (29)$$

dabei ist $\mathbf{p} d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^n p_i dq_i$.

Diese Eigenschaft wird als *symplektische Eigenschaft* bezeichnet.

Für die weiteren Ausführungen wird die Theorie von Differentialformen, und Integration über Differentialformen, verwendet. Dies ist eine umfangreiche Theorie, und eine genauere Behandlung würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Für Details sei auf [1, Kap. 7 bis 9] verwiesen.

Mithilfe der Theorie der Differentialformen und dem Integralsatz von Stokes für Differentialformen lässt sich die symplektische Eigenschaft etwas anders formulieren: Es gilt

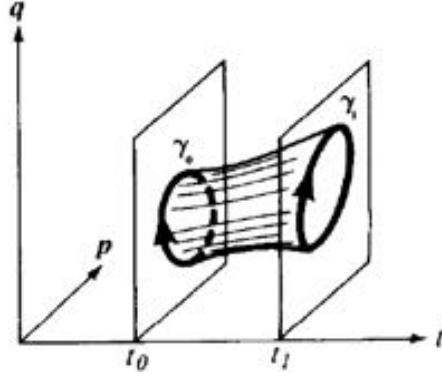


Abbildung 2: Skizze der geschlossenen Kurven γ_0 und γ_1 zu Zeitpunkten t_0 bzw. t_1 , Quelle: [1, Kap. 7].

$$d(\mathbf{p} d\mathbf{q}) = d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq_i, \text{ daher folgt}$$

$$\oint_{\gamma_i} \mathbf{p} d\mathbf{q} = \int_{\sigma_i} d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}, \quad (30)$$

wobei σ_i die (orientierte) Fläche bezeichnet, welche von γ_i eingeschlossen wird. Somit kann das obige Theorem umformuliert werden:

Theorem (Symplektische Eigenschaft, Variante 2). *Sei ein Hamiltonsystem durch eine Funktion $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ gegeben. Betrachte den erweiterten Phasenraum $\{\mathbf{q}, \mathbf{p}, t\}$, und betrachte eine geschlossene Kurve γ_0 von Anfangswerten zum Zeitpunkt t_0 , und die geschlossene Kurve γ_1 zum Zeitpunkt t_1 , die durch die Zeitentwicklung dieser Anfangswerte gemäß den hamiltonschen Bewegungsgleichungen entsteht (siehe Abb. 2). Sei σ_i die Fläche, welche von γ_i eingeschlossen wird. Dann gilt*

$$\int_{\sigma_1} d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q} = \int_{\sigma_2} d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}. \quad (31)$$

Diese Aussage lässt sich auch geometrisch beschreiben: Betrachte im $2n$ -dimensionalen Phasenraum (ohne die Zeitachse) eine orientierte 2-dimensionale Fläche $A(t_0)$, und betrachte zu jedem Zeitpunkt $t > t_0$ die Fläche $A(t)$, die sich aus der zeitlichen Weiterentwicklung der Punkte von $A(t_0)$ gemäß der hamiltonschen Bewegungsgleichungen ergibt. Betrachte nun die Projektionen $A(t)_i$ dieser Flächen auf die Koordinatenebenen (p_i, q_i) , und sei $m(t) = \sum_{i=1}^n \text{Vol}(A(t)_i)$ die Summe der Flächeninhalte der Projektionen. Die Aussage des letzten Theorems ist nun gerade, dass diese Summe $m(t)$ nicht von der Zeit abhängt.

Die symplektische Eigenschaft lässt sich auch differentiell formulieren: Man sagt:

Theorem (Symplektische Eigenschaft, Variante 3). *Die Differentialform $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}$ ist eine absolute Integralinvariante der hamiltonschen Bewegungsgleichungen, d.h. diese Differentialform wird unter dem Fluss der hamiltonschen Bewegungsgleichungen erhalten.*

Ein genaueres Verständnis dieser Aussage erfordert Kenntnisse der Rechenregeln für Differentialformen, daher wird sie hier nicht weiter erläutert.

Diese symplektische Eigenschaft impliziert das *Theorem von Liouville*, welches die Volumenerhaltung im Phasenraum beschreibt:

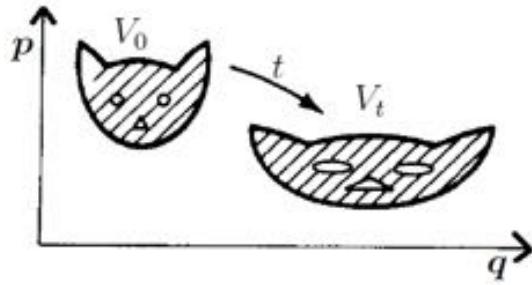


Abbildung 3: Volumenerhaltung im Phasenraum, Quelle: [1, Kap. 3].

Theorem (Liouville). *Der Fluss der hamiltonschen Bewegungsgleichungen ist volumenerhaltend, d.h. wird ein $2n$ -dimensionaler Bereich V_0 im $2n$ -dimensionalen Phasenraum entlang der hamiltonschen Bewegungsgleichungen um die Zeit t weiterentwickelt, so hat der so entstehende $2n$ -dimensionale Bereich V_t dasselbe Volumen wie V_0 (siehe Abb. 3).*

Im Fall $n = 1$ stimmt die symplektische Eigenschaft mit dem Theorem von Liouville überein, für $n > 1$ ist die symplektische Eigenschaft eine stärkere Aussage.

Im Folgenden wird häufiger die Formulierung verwendet, dass eine numerische Methode als *symplektisch* bezeichnet wird. Hiermit ist Folgendes gemeint: Sei die Iteration der numerischen Methode durch die Funktion I bezeichnet, d.h. $y_{n+1} = I(y_n)$. Diese Funktion nimmt den Anfangswert y_n und berechnet die numerische Approximation y_{n+1} des Wertes nach einem Zeitschritt Δt . Die numerische Methode heißt dann symplektisch, falls I eine symplektische Transformation ist, d.h. falls sie die Differentialform $d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}$ erhält. Diese Bedingung kann, wie oben, auch in der Integralform

$$\oint_{\gamma} \mathbf{p} d\mathbf{q} = \oint_{I(\gamma)} \mathbf{p} d\mathbf{q}, \quad (32)$$

beschrieben werden, wobei $I(\gamma)$ das Bild von γ ist, und sowohl γ als auch $I(\gamma)$ geschlossene Wege im Phasenraum sind. Auch hier folgt aus der symplektischen Eigenschaft, dass I volumenerhaltend ist.

An dieser Stelle ist sinnvoll anzumerken, dass symplektische Methoden im Allgemeinen nicht energieerhaltend sind. (Zum genaueren Verständnis siehe [14, Abschnitt 10.3.2], wo es um dieses Thema geht).

4 Numerische Runge-Kutta-Methoden

Die folgenden Ausführungen sind in Anlehnung an [14, Kapitel 6]. Es werden drei verschiedene Klassen numerischer Methoden eingeführt: Die Runge-Kutta- (RK), die partitionierten Runge-Kutta- (PRK), sowie die Runge-Kutta-Nyström-Methoden (RKN). Diese numerischen Verfahren sind im Prinzip zur Approximation der Lösungen beliebiger Differentialgleichungen anwendbar, mit einigen Einschränkungen. Für die weiteren Überlegungen sind jedoch nur hamiltonsche Systeme von Interesse, daher werden diese Verfahren in diesem Abschnitt schon bei ihrer Einführung auf die hamiltonschen Bewegungsgleichungen bezogen.

4.1 Runge-Kutta (RK)

Betrachte die zu einer Hamiltonfunktion $H(q, p, t)$ gehörenden Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (33)$$

Mit $y(t) := (q(t), p(t))$ kann dies auch als eine Differentialgleichung geschrieben werden:

$$\dot{y}(t) = F(y, t) := \left(\frac{\partial H}{\partial p}(q, p, t), -\frac{\partial H}{\partial q}(q, p, t) \right). \quad (34)$$

Es soll nun darum gehen, mit bekanntem Anfangswert $y_0 = y(t_0)$ die weiteren Werte y_n zu Zeitpunkten $t_n, n = 1, 2, 3, \dots$ zu approximieren.

In der Runge-Kutta-Methode wird die Iteration für den Zeitschritt $t_n \mapsto t_{n+1} = t_n + h_n$ durch folgende Beziehungen beschrieben:

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, \dots, s \quad (35)$$

$$Y_i = y_n + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} F(Y_j, t_n + c_j h_n), \quad i = 1, \dots, s \quad (36)$$

$$y_{n+1} = y_n + h_n \sum_{i=1}^s b_i F(Y_i, t_n + c_i h_n). \quad (37)$$

Die verwendeten Koeffizienten a_{ij}, b_i können dann wie folgt in einem *Tableau* zusammengefasst werden:

$$\begin{array}{c|ccc} & a_{11} & \dots & a_{1s} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & a_{s1} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \dots & b_s \end{array} \quad (38)$$

Damit das Verfahren konvergiert, muss die *Konsistenzbedingung* $\sum_{i=1}^s b_i = 1$ erfüllt sein.

Falls $a_{ij} = 0$ für $i \leq j$, ist die Methode *explizit*, d.h. der neue Wert y_{n+1} kann direkt aus dem vorherigen Wert y_n berechnet werden. Andernfalls ist die Methode *implizit*, d.h. in jedem Iterationsschritt muss ein (nicht notwendigerweise lineares) Gleichungssystem gelöst werden, um y_{n+1} zu bestimmen.

Eine solche Methode ist genau dann symplektisch, wenn die Koeffizienten a_{ij}, b_i die Beziehungen

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j \quad \text{für alle } i, j = 1, \dots, s \quad (39)$$

erfüllen. Der Beweis dieser Aussage verwendet Rechnungen mit Differentialformen, und ist z.B. in [14, Theorem 6.1] zu finden.

Setzt man in der obigen Bedingung $i = j$, so ergibt sich $b_i = 0$ oder $a_{ii} = b_i$ für jedes $i = 1, \dots, s$. Für ein konsistentes, symplektisches Verfahren muss mindestens eines der b_i ungleich Null sein, weshalb dann $a_{ii} = b_i \neq 0$ für diesen Index gelten muss. Somit ist das Verfahren aber nicht explizit. Daher gibt es kein konsistentes, explizites RK-Verfahren, dass gleichzeitig symplektisch ist.

4.2 Partitioniertes Runge-Kutta (PRK)

Betrachte den Fall einer separablen Hamiltonfunktion $H(q, p, t)$, d.h. von der Form

$$H(q, p, t) = V(q, t) + T(p). \quad (40)$$

In diesem Fall kann ein partitioniertes Runge-Kutta-Verfahren (PRK) angewandt werden. Dieses wird durch Koeffizienten beschrieben, die in zwei Tableaus angeordnet werden können:

$$\begin{array}{c|ccccc} & a_{11} & \dots & a_{1s} & & \\ \hline & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & a_{s1} & \dots & a_{ss} & & \\ \hline b_1 & \dots & b_s & & & \end{array} \quad \begin{array}{c|ccccc} & A_{11} & \dots & A_{1s} & & \\ \hline & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & A_{s1} & \dots & A_{ss} & & \\ \hline B_1 & \dots & B_s & & & \end{array} \quad (41)$$

Die Iteration für den Zeitschritt $t_n \mapsto t_{n+1} = t_n + h_n$ wird hier durch folgende Gleichungen beschrieben:

$$C_i = \sum_{j=1}^s A_{ij}, \quad i = 1, \dots, s \quad (42)$$

$$P_i = p_n + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} (-\nabla_q V(Q_j, t_n + C_j h_n)), \quad i = 1, \dots, s \quad (43)$$

$$Q_i = q_n + h_n \sum_{j=1}^s A_{ij} \nabla_p T(P_j), \quad i = 1, \dots, s \quad (44)$$

$$p_{n+1} = p_n + h_n \sum_{i=1}^s b_i (-\nabla_q V(Q_i, t_n + C_i h_n)) \quad (45)$$

$$q_{n+1} = q_n + h_n \sum_{i=1}^s B_i \nabla_p T(P_i). \quad (46)$$

Die Koeffizienten müssen die Konsistenzbedingung $\sum_{i=1}^s b_i = \sum_{i=1}^s B_i = 1$ erfüllen, damit das Verfahren konvergiert.

Das Verfahren ist explizit, falls $a_{ij} = A_{ij} = 0$ für $i < j$, und $a_{ii} = 0$ oder $A_{ii} = 0$ für jedes $i = 1, \dots, s$. Andernfalls ist das Verfahren implizit.

Das Verfahren ist genau dann symplektisch, falls die Koeffizienten die Bedingung

$$b_i A_{ij} + B_j a_{ji} = b_i B_j \quad \text{für alle } i, j = 1, \dots, s \quad (47)$$

erfüllen. Der Beweis dieser Aussage ist in [14, Theorem 6.2] zu finden.

4.2.1 Ein Schema expliziter, symplektischer PRK-Verfahren

Die PRK-Verfahren, welche durch Tableaus der Form

$$\begin{array}{c|ccccc} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & \\ \hline & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & & \\ & b_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & & \\ \hline & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \\ & b_1 & b_2 & b_3 & \dots & b_{s-1} & 0 & & \\ \hline b_1 & b_2 & b_3 & \dots & b_{s-1} & b_s & & & \end{array} \quad \begin{array}{c|ccccc} & B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & & \\ \hline & B_1 & B_2 & 0 & \dots & 0 & & \\ & B_1 & B_2 & B_3 & \dots & 0 & & \\ \hline & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & B_1 & B_2 & B_3 & \dots & B_s & & \\ \hline B_1 & B_2 & B_3 & \dots & B_{s-1} & B_s & & & \end{array} \quad (48)$$

beschrieben werden, sind explizit und symplektisch. Die Iteration $t_n \mapsto t_{n+1}$ kann vereinfacht wie folgt angegeben werden:

$$Q_0 = q_n, \quad P_1 = p_n \quad (49)$$

$$Q_i = Q_{i-1} + h_n B_i \nabla_p T(P_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad (50)$$

$$P_{i+1} = P_i + h_n b_i (-\nabla_q V(Q_i, t_n + C_i h_n)) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad (51)$$

$$q_{n+1} = Q_s, \quad p_{n+1} = P_{s+1}. \quad (52)$$

Im Folgenden wird dieses Verfahren mit der Schreibweise

$$(b_1, \dots, b_s)[B_1, \dots, B_s] \quad (53)$$

abgekürzt.

4.2.2 Ein anderes Schema expliziter, symplektischer PRK-Verfahren

Ein ähnliches PRK-Verfahren wird durch Tableaus der Form

$$\begin{array}{c|ccccccccc} b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_1 & b_2 & 0 & \dots & 0 & B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_1 & b_2 & b_3 & \dots & 0 & B_1 & B_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ b_1 & b_2 & b_3 & \dots & b_s & B_1 & B_2 & B_3 & \dots & B_{s-1} & 0 \\ \hline b_1 & b_2 & b_3 & \dots & b_s & B_1 & B_2 & B_3 & \dots & B_{s-1} & B_s \end{array} \quad (54)$$

beschrieben, auch diese Verfahren sind explizit und symplektisch. Die Iteration $t_n \mapsto t_{n+1}$ kann vereinfacht wie folgt angegeben werden:

$$P_0 = p_n, \quad Q_1 = q_n \quad (55)$$

$$P_i = P_{i-1} + h_n b_i (-\nabla_q V(Q_i, t_n + C_i h_n)) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad (56)$$

$$Q_{i+1} = Q_i + h_n B_i \nabla_p T(P_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, s \quad (57)$$

$$p_{n+1} = P_s, \quad q_{n+1} = Q_{s+1}. \quad (58)$$

Im Folgenden wird dieses Verfahren mit der Schreibweise

$$[b_1, \dots, b_s](B_1, \dots, B_s) \quad (59)$$

abgekürzt.

4.3 Runge-Kutta-Nyström (RKN)

Betrachte eine separable Hamiltonfunktion $H(q, p, t)$ der speziellen Form

$$H(q, p, t) = \frac{1}{2} p^T M p + V(q, t), \quad (60)$$

wobei M eine konstante, symmetrische und invertierbare Matrix ist. In diesem Fall kann ein Runge-Kutta-Nyström-Verfahren verwendet werden, welches durch ein Tableau der Form

$$\begin{array}{c|ccccccccc} \gamma_1 & \alpha_{11} & \dots & \alpha_{1s} & & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & & & & & \\ \hline \gamma_s & \alpha_{s1} & \dots & \alpha_{ss} & & & & & & \\ \hline & \beta_1 & \dots & \beta_s & & & & & & \\ \hline & b_1 & \dots & b_s & & & & & & \end{array} \quad (61)$$

beschrieben wird. Der Zeitschritt $t_n \mapsto t_{n+1}$ berechnet sich dann mithilfe der folgenden Gleichungen:

$$Q_i = q_n + h_n \gamma_i M p_n + h_n^2 \sum_{j=1}^s \alpha_{ij} M \nabla_q V(Q_j, t_n + \gamma_j h_n) \quad (62)$$

$$p_{n+1} = p_n + h_n \sum_{i=1}^s b_i \nabla_q V(Q_i, t_n + \gamma_i h_n) \quad (63)$$

$$q_{n+1} = q_n + h_n M p_n + h_n^2 \sum_{i=1}^s \beta_i M \nabla_q V(Q_i, t_n + \gamma_i h_n) \quad (64)$$

Die Methode ist explizit falls $a_{ij} = 0$ für $i \leq j$ erfüllt ist. Sie ist symplektisch und konsistent, falls die Bedingungen

$$\beta_i = b_i(1 - \gamma_i) \quad \text{für alle } i = 1, \dots, s \quad (65)$$

$$b_i(\beta_j - \alpha_{ij}) = b_j(\beta_i - \alpha_{ji}) \quad \text{für alle } i, j = 1, \dots, s \quad (66)$$

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \quad (67)$$

erfüllt sind. Der Beweis dieser Aussage ist in [14, Theorem 6.3 und Abschnitt 4.5] zu finden.

4.3.1 Ein Schema expliziter, symplektischer RKN-Verfahren

Betrachte RKN-Verfahren mit folgendem Tableau:

γ_1	0	0	...	0	0
γ_2	$b_1(\gamma_2 - \gamma_1)$	0	...	0	0
γ_3	$b_1(\gamma_3 - \gamma_1)$	$b_2(\gamma_3 - \gamma_2)$...	0	0
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots
γ_s	$b_1(\gamma_s - \gamma_1)$	$b_2(\gamma_s - \gamma_2)$...	$b_{s-1}(\gamma_s - \gamma_{s-1})$	0
	$b_1(1 - \gamma_1)$	$b_2(1 - \gamma_2)$...	$b_{s-1}(1 - \gamma_{s-1})$	$b_s(1 - \gamma_s)$
	b_1	b_2	...	b_{s-1}	b_s

(68)

Diese Verfahren sind symplektisch und explizit. Sie können auch als $s+1$ -stufiges PRK-Verfahren implementiert werden: Sie sind identisch mit

$$(b_1, \dots, b_s, 0)[\gamma_1 - \gamma_0, \gamma_2 - \gamma_1, \dots, \gamma_{s+1} - \gamma_s], \quad \text{mit } \gamma_0 = 0 \text{ und } \gamma_{s+1} = 1, \quad (69)$$

wobei $\nabla_p T(p) = \nabla_p \left(\frac{1}{2} p^T M p \right) = \frac{1}{2} (M + M^T)p = Mp$, da M symmetrisch ist.

4.4 Ordnung der Methoden

Für eine numerische Methode, welche Funktionswerte $y(t_i)$ durch y_i approximiert, sagt man, sie habe die Ordnung r , falls für den globalen Fehler gilt:

$$y_N - y(t_N) = O(h^r), \quad \text{für } h \rightarrow 0. \quad (70)$$

Dabei ist y_N der numerisch bestimmte Wert, und $h = \max_n h_n$ ist der maximale verwendete Zeitschritt.

Die Bedingungen, die erfüllt werden müssen, damit eine Methode Ordnung $\geq r$ hat, sind für die oben vorgestellten RK-, PRK- und RKN-Methoden Bedingungen an die Koeffizienten im jeweiligen Tableau. Diese Bedingungen können kombinatorisch mithilfe von Graphen mit r Ecken bestimmt werden. (Für Details siehe [14, Kapitel 4 und 7]). Die oben angegebenen Konsistenzbedingungen sind gerade die Ordnungsbedingungen für $r = 1$.

An dieser Stelle lässt sich auch eine Bemerkung zu den symplektischen RKN-Methoden machen, welche auch in [14, Remark 8.5] zu finden ist:

Es stellt sich die Frage, warum diese expliziten symplektischen RKN-Methoden gesondert betrachtet werden, wenn sie sich doch als symplektische PRK-Methode implementieren lassen. Die RKN-Methoden beziehen sich auf eine speziellere Form der Hamiltonfunktion als die PRK-Methoden, und im Falle einer solchen Hamiltonfunktion ist die Ordnung der RKN-Methoden im Allgemeinen höher als die der zugehörigen PRK-Methode. Dies trifft jedoch bei symplektischen Methoden nur auf Methoden der Ordnung 4 oder höher zu.

5 Verwendete numerische Methoden

Im Folgenden werden verschiedene bekannte und weniger bekannte Methoden vorgestellt, welche für die Simulation der Testsysteme verwendet werden. Wie sich herausstellt, lassen sich alle Methoden im Formalismus des letzten Abschnittes als RK-, PRK- oder RKN-Methode verstehen, und durch entsprechende Tableaus angeben. Alle Methoden sind explizit, unter diesen sind symplektische sowie nicht-symplektische Methoden.

Euler Die bekannte Euler-Methode kann als 1-stufige RK-Methode mit dem Tableau

$$\begin{array}{c|c} 0 \\ \hline 1 \end{array} \quad (71)$$

beschrieben werden. Ausgeschrieben lautet die Iteration

$$p_{n+1} = p_n + h f(q_n), \quad (72)$$

$$q_{n+1} = q_n + h g(p_n). \quad (73)$$

Dies ist eine nicht-symplektische Methode 1. Ordnung. Im Folgenden wird diese Methode mit **Euler** bezeichnet.

Euler-Cromer Die Euler-Cromer-Methode (siehe [5] und [15]) kann als 1-stufige PRK-Methode mit dem Tableau

$$\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array} \quad (74)$$

bzw. mit der verkürzten Notation

$$1 \quad (75)$$

beschrieben werden. Ausgeschrieben lautet die Iteration

$$p_{n+1} = p_n + h f(q_n), \quad (76)$$

$$q_{n+1} = q_n + h g(p_{n+1}). \quad (77)$$

Es handelt sich um eine symplektische Methode 1. Ordnung. Im Folgenden wird diese Methode mit **EC** bezeichnet.

Eine symplektische RKN-Methode 2. Ordnung Die betrachtete symplektische RKN-Methode 2. Ordnung kann durch das Tableau

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & 0 \\ \hline \frac{1}{2} & \\ \hline & 1 \end{array} \quad (78)$$

beschrieben werden, d.h. mit dem obigen Schema expliziter symplektischer RKN-Verfahren wird das Verfahren durch die Koeffizienten $\gamma_1 = \frac{1}{2}$ und $b_1 = 1$ beschrieben.

Ausgeschrieben lautet die Iteration dieses Verfahrens

$$Q_n = q_n + \frac{h}{2} g(p_n), \quad (79)$$

$$p_{n+1} = p_n + h f(Q_n), \quad (80)$$

$$q_{n+1} = q_n + \frac{h}{2} (g(p_n) + g(p_{n+1})). \quad (81)$$

Diese Methode ist äquivalent zur sog. Leapfrog-Methode (siehe [14, Remark 8.3]), oder zur Verlet-Methode (siehe [16]), bei der die Impulse p zu den Zeiten $n h$ und die Positionen, hierzu versetzt, zu den Zeiten $(n + \frac{1}{2}) h$ bestimmt werden. Dies sieht man wie folgt: Das Zwischenergebnis der Rechnung Q_n , das oben in (79) verwendet wird, ist eine Approximation von q zum Zeitpunkt $t_n + \frac{h}{2}$, schreibe daher $Q_n = q_{n+\frac{1}{2}}$. Für den nächsten Wert $q_{n+\frac{3}{2}} = Q_{n+1}$ gilt nach (79) und (81):

$$q_{n+\frac{3}{2}} = Q_{n+1} = q_{n+1} + \frac{h}{2} g(p_{n+1}) = Q_n + h g(p_{n+1}) = q_{n+\frac{1}{2}} + h g(p_{n+1}). \quad (82)$$

Außerdem folgt aus (80) direkt

$$p_{n+1} = p_n + h f(Q_n) = h f(q_{n+\frac{1}{2}}). \quad (83)$$

Da diese RKN-Methode Ordnung 2 hat und symplektisch ist, folgt mit der Bemerkung am Ende vom Abschnitt 4.4, dass sie auch als PRK-Methode die Ordnung 2 besitzt. Eine direkte Überprüfung der Ordnungsbedingungen (nach [14, Abschnitt 4.3]) bestätigt dies. Im Folgenden wird diese Methode mit SRKN_O2 bezeichnet.

Eine symplektische PRK-Methode 3.Ordnung Die betrachtete symplektische PRK-Methode 3. Ordnung kann durch die Kurzschreibweise

$$\left[\frac{7}{24}, \frac{3}{4}, \frac{-1}{24} \right] \left(\frac{2}{3}, -\frac{2}{3}, 1 \right) \quad (84)$$

beschrieben werden. Diese symplektische Methode wird in [14, Abschnitt 8.4.5] beschrieben, und geht auf [13] zurück, wo diese Methode als eine möglichst einfache symplektische Methode 3. Ordnung vorgestellt wird. Im Folgenden wird diese Methode mit SPRK_O3 bezeichnet.

Klassische Runge-Kutta-Methode Die sog. klassische Runge-Kutta-Methode (siehe [2]), welche auf den Namensgeber dieser Methoden W.Kutta zurückgeht, ist eine 4-stufige

RK-Methode und wird durch folgendes Tableau beschrieben:

$$\begin{array}{c|cccc} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array} \quad (85)$$

Dies ist eine nicht-symplektische Methode 4. Ordnung. Im Folgenden wird diese Methode mit RK_klass bezeichnet.

Eine symplektische PRK-Methode 4. Ordnung Die betrachtete symplektische PRK-Methode 4. Ordnung kann durch die Kurzschreibweise

$$(\omega, \nu, \omega, 0) \left[\frac{\omega}{2}, \frac{\omega + \nu}{2}, \frac{\omega + \nu}{2}, \frac{\omega}{2} \right] \quad (86)$$

beschrieben werden, wobei

$$\omega = \frac{1}{3}(2 + 2^{1/3} + 2^{-1/3}) \quad \text{und} \quad \nu = 1 - 2\omega. \quad (87)$$

Diese Methode ist aus [14, Abschnitt 8.4.6] entnommen, und geht auf [7] und [4] zurück. Im Folgenden wird diese Methode mit SPRK_O4 bezeichnet.

Eine symplektische RKN-Methode 4. Ordnung Diese symplektische RKN-Methode 4. Ordnung ist eine 5-stufige RKN-Methode nach dem obigen Schema expliziter symplektischer RKN-Methoden und wird mit folgenden Koeffizienten beschrieben:

$\gamma_1 = 0$	$b_1 = 0, 0617588581356263250$
$\gamma_2 = 0, 2051776615422863869$	$b_2 = 0, 3389780265536433551$
$\gamma_3 = 0, 6081989431465009739$	$b_3 = 0, 6147913071755775662$
$\gamma_4 = 0, 4872780668075869657$	$b_4 = -0, 1405480146593733802$
$\gamma_5 = 1$	$b_5 = 0, 1250198227945261338$

Diese Methode ist aus [14, Abschnitt 8.5.3] entnommen, und geht auf die Doktorarbeit von M.P. Calvo (1992, Universidad de Valladolid) zurück. Die Koeffizienten sind gerade so gewählt, dass der Fehlerterm 5. Ordnung für p und q minimiert wird.

Wie im Abschnitt 4.4 beschrieben, besitzt diese Methode nur dann Ordnung 4, wenn sie als RKN-Methode implementiert werden kann, d.h. im Fall, dass die Hamiltonfunktion in der Form (60) dargestellt werden kann. Andernfalls müssen die Ordnungsbedingungen für PRK-Methoden überprüft werden (siehe [14, Abschnitt 4.3]). Es stellt sich heraus, dass diese Methode als PRK-Methode die Ordnung 3 besitzt.

Im Folgenden wird diese Methode mit SRKN_O4 bezeichnet.

6 Verwendete Testsysteme

In diesem Abschnitt werden die verwendeten eindimensionalen Testsysteme vorgestellt: Der klassische harmonische Oszillator, das mathematische Pendel, und der relativistische (an)harmonische Oszillator. Es wird jeweils die Hamiltonfunktion hergeleitet, und

durch Reparametrisierungen und Reskalierungen in eine dimensionslose Form überführt, und zwar so, dass die Beträge der Funktionswerte ungefähr in einem Bereich von < 100 liegen. Dies ist für die Numerik wichtig, denn wenn die verschiedenen Werte zu viele Größenordnungen auseinanderliegen, kann es bei den Berechnungen mit Gleitkommazahlen, z.B. bei der Addition, zu Fehlern kommen.

6.1 Klassischer harmonischer Oszillator

Mit der Ortskoordinate \hat{q} ist das Potential durch $V(\hat{q}, t) = \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$ gegeben, dabei ist ω die Frequenz. Damit ist

$$\mathcal{L}(\hat{q}, \dot{\hat{q}}, t) = \frac{1}{2}m\dot{\hat{q}}^2 - \frac{1}{2}k\hat{q}^2. \quad (88)$$

Dabei ist m die Masse des oszillierenden Teilchens. Der verallgemeinerte Impuls berechnet sich zu

$$\hat{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\hat{q}}} = m\dot{\hat{q}}. \quad (89)$$

Somit berechnet sich die Hamiltonfunktion zu

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2. \quad (90)$$

Die Bewegungsgleichungen lauten damit

$$\dot{\hat{p}} = -m\omega^2\hat{q}, \quad \dot{\hat{q}} = \frac{\hat{p}}{m}. \quad (91)$$

Die Hamiltonfunktion und die zugehörigen Bewegungsgleichungen können durch eine geeignete Zeitparametrisierung und Wahl neuer Koordinaten vereinfacht werden: Setze zunächst $\tau = \omega t$ bzw. $d\tau = \omega dt$. Es gilt dann allgemein für eine Funktion $f(t)$ der Zeit: $\frac{d}{d\tau}f = \frac{1}{\omega}\frac{d}{dt}f$.

Somit lauten die Bewegungsgleichungen bzgl. τ wie folgt:

$$\frac{d}{d\tau}\hat{p} = -m\omega\hat{q}, \quad \frac{d}{d\tau}\hat{q} = \frac{\hat{p}}{m\omega}. \quad (92)$$

Die Hamiltonfunktion bzgl. τ , welche zu diesen Bewegungsgleichungen passt, lautet

$$\tilde{H}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m\omega} + \frac{m\omega}{2}\hat{q}^2. \quad (93)$$

Wähle nun neue Koordinaten

$$p = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega}}, \quad q = \sqrt{m\omega}\hat{q}, \quad (94)$$

hieraus ergeben sich die vereinfachten Bewegungsgleichungen

$$\frac{dp}{d\tau} = -q, \quad \frac{dq}{d\tau} = p. \quad (95)$$

Die neue Hamiltonfunktion bzgl. p, q, τ , welche zu diesen Bewegungsgleichungen passt, ist durch

$$H(q, p) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \quad (96)$$

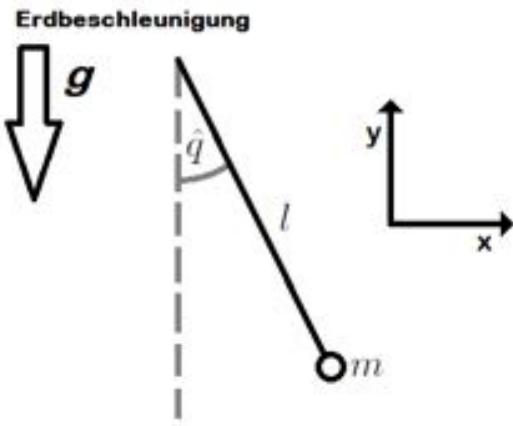


Abbildung 4: Mathematisches Pendel.

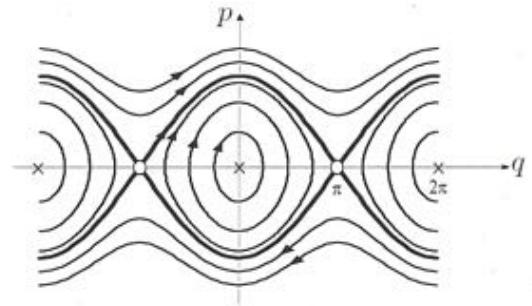


Abbildung 5: Phasenportrait der Lösungen des mathematischen Pendels, Gleichung (106), Quelle: [8].

gegeben. Dies ist eine sehr einfache Hamiltonfunktion ohne die Parameter m und ω . Für die numerischen Simulationen wird im Folgenden (96) bzw. (95) verwendet. Die allgemeine Lösung hiervon lautet

$$q(\tau) = q(0) \cos(\tau) + p(0) \sin(\tau), \quad (97)$$

$$p(\tau) = -q(0) \sin(\tau) + p(0) \cos(\tau). \quad (98)$$

Die Trajektorien im Phasenraum entsprechen somit konzentrischen Kreisen um den Ursprung, wobei die Bewegung im Uhrzeigersinn verläuft.

Die Rücktransformation in die ursprünglichen Koordinaten mit Zeitparametrisierung t ist durch

$$\hat{q}(t) = \frac{1}{\sqrt{m\omega}} q(\tau(t)) = \frac{1}{\sqrt{m\omega}} q(\omega t), \quad (99)$$

$$\hat{p}(t) = \sqrt{m\omega} p(\tau(t)) = \sqrt{m\omega} p(\omega t) \quad (100)$$

gegeben.

6.2 Mathematisches Pendel

Das System des mathematischen Pendels kann durch eine einzelne Koordinate \hat{q} beschrieben werden, welche dem Winkel zwischen der Auslenkung des Fadens und der Ruhelage entspricht (siehe Abb.4). Da in der folgenden Betrachtung auch Winkel in der Nähe von $\hat{q} = \pi$ betrachtet werden, ist es sinnvoller von einem masselosen Stab statt einem Faden auszugehen.

Lege den Nullpunkt des Gravitationspotentials der Erde auf die Höhe der Befestigung des Stabes, dann ergibt sich für die Lagrangefunktion

$$\mathcal{L}(\hat{q}, \dot{\hat{q}}, t) = T(\hat{q}, \dot{\hat{q}}, t) - V(\hat{q}, t) = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\hat{q}}^2 + mgl \cos(\hat{q}). \quad (101)$$

Dabei ist l die Länge des Stabes, m die Pendelmasse und g die Erdbeschleunigung. Hieraus ergibt sich der verallgemeinerte Impuls p :

$$\hat{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\hat{q}}} = ml^2 \dot{\hat{q}}. \quad (102)$$

Somit berechnet sich die Hamiltonfunktion zu

$$H(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2ml^2} - mgl \cos(\hat{q}). \quad (103)$$

Die zugehörigen Bewegungsgleichungen lauten

$$\dot{\hat{p}} = -mgl \sin(\hat{q}), \quad \dot{\hat{q}} = \frac{\hat{p}}{ml^2}. \quad (104)$$

Wie bei dem harmonischen Oszillator können die Bewegungsgleichungen durch eine Reparametrisierung vereinfacht werden: Setze

$$\tau = \sqrt{\frac{g}{10l}} t, \quad q = \hat{q}, \quad p = \sqrt{\frac{10l}{g}} \frac{\hat{p}}{ml^2}. \quad (105)$$

Hiermit ergeben sich die vereinfachten Bewegungsgleichungen

$$\frac{dp}{d\tau} = -10 \sin(q), \quad \frac{dq}{d\tau} = p. \quad (106)$$

Die zu diesen Bewegungsgleichungen passende Hamiltonfunktion bzgl. der Variablen q, p, τ ist dann durch

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2} - 10 \cos(q) \quad (107)$$

gegeben. Diese Hamiltonfunktion (107) bzw. die zugehörigen Bewegungsgleichungen (106) werden im folgenden für die numerischen Simulationen verwendet. Die Lösungen $q(\tau), p(\tau)$ dieses Systems lassen sich gemäß folgenden Beziehungen zurück in die ursprünglichen Koordinaten $\hat{q}(t), \hat{p}(t)$ transformieren:

$$\hat{q}(t) = q(\tau(t)) = q\left(\sqrt{\frac{g}{10l}} t\right). \quad (108)$$

$$\hat{p}(t) = ml^2 \sqrt{\frac{g}{10l}} p(\tau(t)) = ml^2 \sqrt{\frac{g}{10l}} p\left(\sqrt{\frac{g}{10l}} t\right). \quad (109)$$

Die Lösungen lassen sich nicht in einer einfachen Form angeben, jedoch lassen sie sich durch Betrachtung des Phasenportraits (Abb. 5) gut qualitativ beschreiben:

In der Mitte liegt der stabile Fixpunkt, welcher der Ruhelage des Pendels entspricht. In der Umgebung dieses Punktes ist das Verhalten des Pendels mit dem harmonischen Oszillator vergleichbar. (Tatsächlich wird für kleine Werte von q die sog. *Kleinwinkelnäherung* $\sin(q) \approx q$ verwendet, sodass die Lösung der des harmonischen Oszillators entspricht.) Die Punkte bei $p = 0, q = \pm\pi$ entsprechen instabilen Fixpunkten: Dies ist die Position, wo das Pendel komplett nach oben ausgelenkt ist. Die äußeren Bahnkurven, die oben und unten im Phasenportrait zu sehen sind, entsprechen dem Fall, dass das Pendel genug Energie hat um überzuschlagen, und somit ständig wiederholt überschlägt: Bei den oberen Kurven dreht sich das Pendel gegen den Uhrzeigersinn (denn q steigt monoton mit

der Zeit), und die unteren Kurven entsprechen der Drehung im Uhrzeigersinn. Da q eine Winkelkoordinate ist, sind Anfangswerte q_1 und q_2 mit $q_1 - q_2 = z\pi$, $z \in \mathbb{Z}$ äquivalent, daher ist auch das Phasenportrait in q -Richtung 2π -periodisch. Tatsächlich sind alle Lösungen periodisch: In der Umgebung des stabilen Fixpunktes ist die Periode wegen der Kleinwinkelnäherung ungefähr durch $T = \frac{2\pi}{\sqrt{10}}$ gegeben, für Lösungen die sich dem instabilen Fixpunkt nähern geht die Periode T gegen unendlich. Die exakten Lösungen lassen sich mithilfe von elliptischen Integralen angeben, siehe hierzu [10].

6.3 Relativistischer (an)harmonischer Oszillator

Betrachte den harmonischen Oszillator im Kontext der relativistischen Mechanik, d.h. sei wieder \hat{q} die Ortskoordinate, und $V(\hat{q}, t) = \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$ sei das Potential. Nach (25) ist die Hamiltonfunktion durch

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) = c\sqrt{\hat{p}^2 + m^2c^2} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \quad (110)$$

gegeben, wobei c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist. Somit ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$\dot{\hat{p}} = -m\omega^2\hat{q}, \quad \dot{\hat{q}} = \frac{pc}{\sqrt{\hat{p}^2 + m^2c^2}}. \quad (111)$$

Um relativistische Effekte zu sehen, sind besonders hohe Geschwindigkeiten nahe an der Lichtgeschwindigkeit von Interesse, wodurch die Werte von p und q sehr groß werden können. Daher ist eine Reskalierung hier besonders wichtig. Setze daher

$$p = \frac{\hat{p}}{mc}, \quad q = \frac{\hat{q}}{c}. \quad (112)$$

Die Bewegungsgleichungen (111) verändern sich dann zu

$$\dot{p} = -\frac{k}{m}q, \quad \dot{q} = \frac{p}{\sqrt{p^2 + 1}}. \quad (113)$$

Zu diesen Bewegungsgleichungen ergibt sich die Hamiltonfunktion

$$H(q, p) = \sqrt{p^2 + 1} + \frac{kq^2}{2m}. \quad (114)$$

Im Folgenden wird $\frac{k}{m} = 1$ gesetzt, sodass sich (113) und (114) vereinfachen zu

$$H(q, p) = \sqrt{p^2 + 1} + \frac{q^2}{2}, \quad \dot{p} = -q, \quad \dot{q} = \frac{p}{\sqrt{p^2 + 1}}. \quad (115)$$

Dieses System (115) wird im Folgenden für die numerischen Berechnungen verwendet. Im Vergleich zum harmonischen Oszillator (96) und zum mathematischen Pendel (107) hängt hier die Hamiltonfunktion nicht quadratisch vom Impuls ab. Somit besitzt diese Hamiltonfunktion nicht die Form, die zur Verwendung von RKN-Verfahren notwendig ist (vgl. (60) im Abschnitt 4.3). Da die verwendeten RKN-Verfahren SRKN_O2 und SRKN_O4 auch als PRK-Verfahren aufgefasst werden können, siehe (69), können auch diese Verfahren noch verwendet werden, nur muss für die Ordnung der Verfahren betrachtet werden,

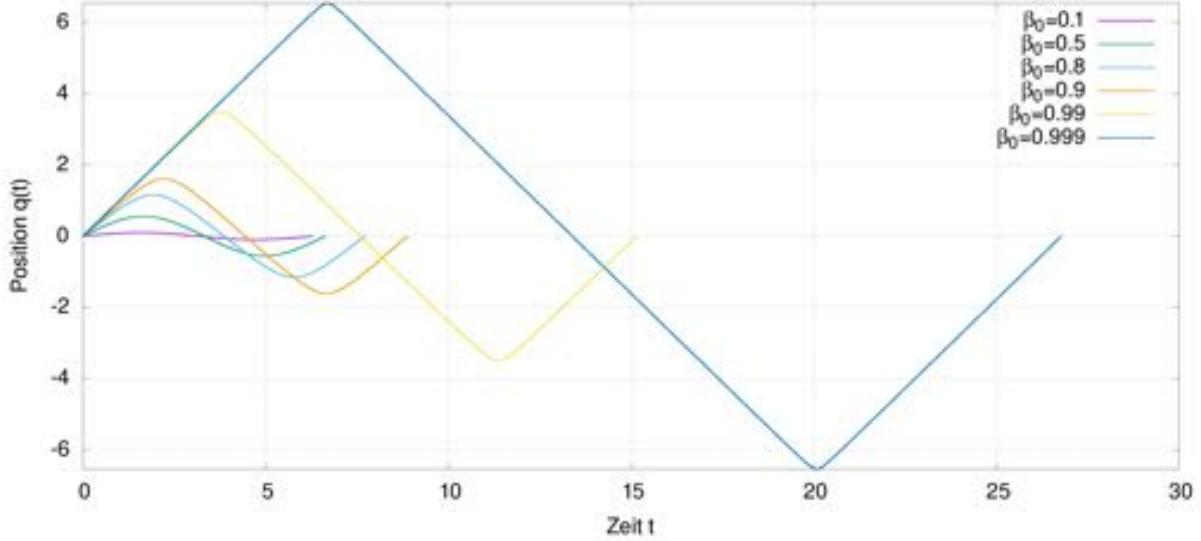


Abbildung 6: Exakte Lösung des relativistischen harmonischen Oszillators mit Anfangswerten $q_0 = 0, \beta_0 > 0$ für verschiedene Werte von β_0 .

welche Ordnung sie als PRK-Verfahren besitzen.

Für den Zusammenhang zwischen der Geschwindigkeit v und dem Impuls \hat{p} gilt mit $\beta = \frac{v}{c}$:

$$\hat{p} = \frac{mv}{\sqrt{1 - \beta^2}} = mc \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (116)$$

Somit folgt für den reskalierten Impuls p

$$p = \frac{\hat{p}}{mc} = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{p}{\sqrt{1 + p^2}}. \quad (117)$$

Somit ist p eindeutig durch β bestimmt, und umgekehrt.

Die exakte Lösung des Systems (115) ist bekannt: Die Lösung der Positionskoordinate $q(t)$ des relativistischen (an)harmonischen Oszillators lässt sich nach [9] mithilfe von elliptischen Integralen bestimmen, jedoch nur in der Form ihrer Umkehrfunktion $t(q)$, sodass eine Verwendung dieser Ergebnisse zum Vergleich der numerischen und exakten Lösung nicht möglich ist: Für eine gegebene Zeit t_1 lässt sich nicht ohne weiteres der Wert von $q(t_1)$ bestimmen. Die Lösung lässt sich jedoch graphisch darstellen: In Abb. 6 sind die exakten Lösungen für verschiedene Anfangswerte der Form $q_0 = 0, \beta_0 > 0$ dargestellt, diese wurden mit dem Softwarepaket Mathematica berechnet. Dabei wurde $p_0 = p_0(\beta_0)$ mit (117) berechnet.

Es ist zu erkennen, dass mit Annäherung an die Lichtgeschwindigkeit die Amplitude und die Periode steigen. Im Gegensatz dazu steigt im klassischen Fall nur die Amplitude, die Periode jedoch bleibt konstant bei $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Dieser Oszillator kann deshalb nicht mehr als harmonisch bezeichnet werden, daher der Zusatz *anharmonisch*, nur im nicht-relativistischen Grenzfall entspricht dieser einem harmonischen Oszillator.

Nach [9] ist die Amplitude durch

$$A = \sqrt{2(\gamma_0 - 1)} \quad (118)$$

gegeben, wobei γ_0 der Lorentzfaktor zum Zeitpunkt $t = 0$ ist. In Abb. 7 ist $q(t)/A$ in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt, d.h. mit der Amplitude auf 1 normiert.

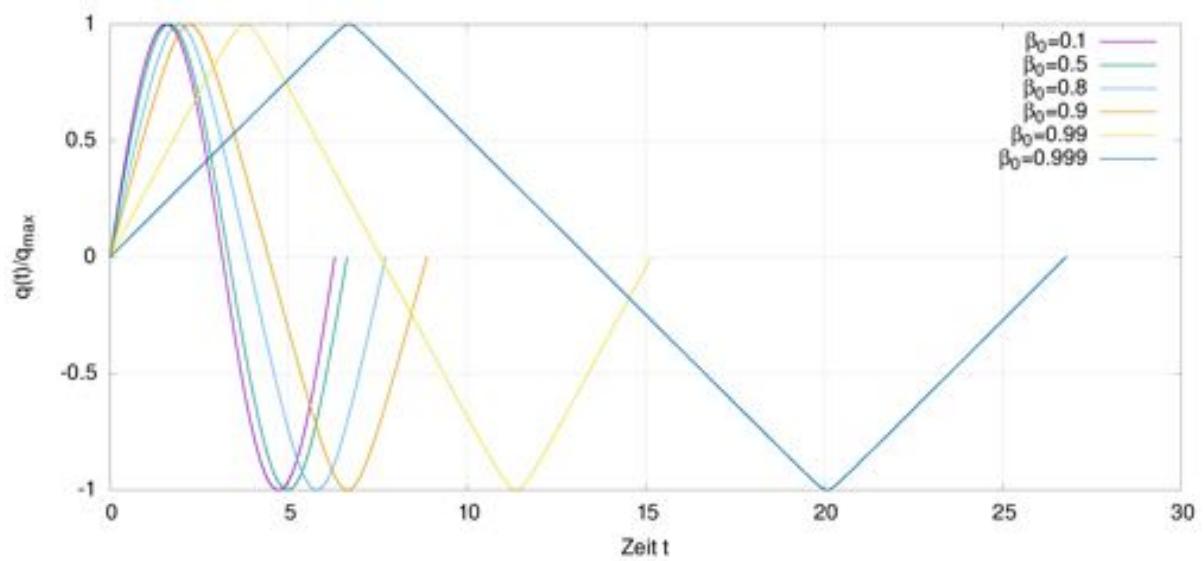


Abbildung 7: Exakte Lösung des relativistischen harmonischen Oszillators mit Anfangswerten $q_0 = 0, \beta_0 > 0$ für verschiedene Werte von β_0 , mit der Amplitude auf 1 skaliert.

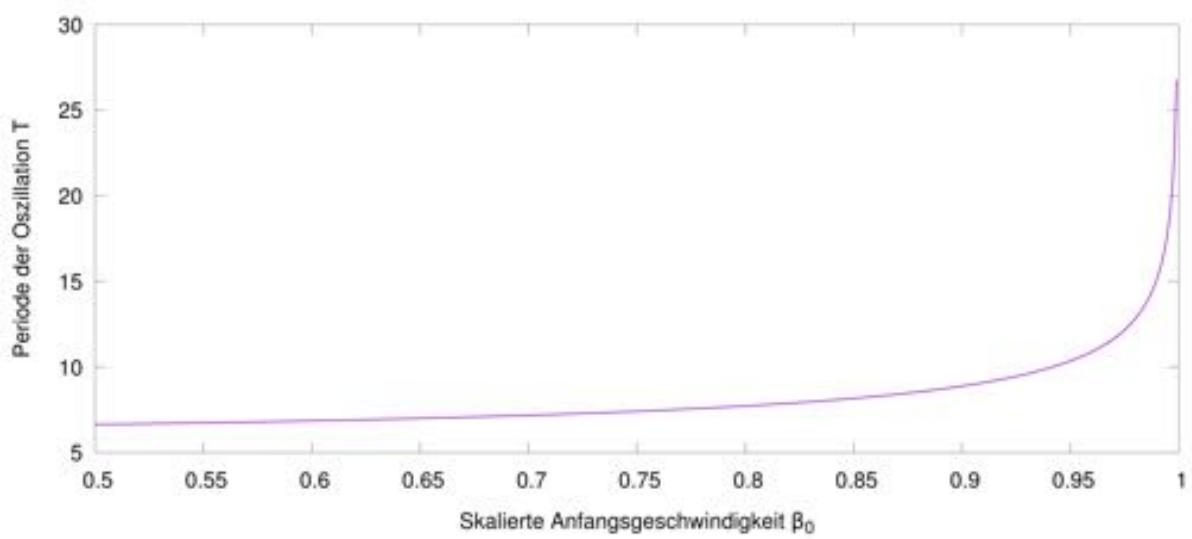


Abbildung 8: Periodendauer T einer Schwingung des relativistischen Oszillators in Abhängigkeit von β_0 , mit Anfangsposition $q_0 = 0$.

In dieser Abbildung ist der Unterschied in der Periode schon von $\beta_0 = 0,1$ nach $\beta_0 = 0,5$ zu erkennen. Bei den kleineren Werten von β_0 ähnelt der Verlauf einer Sinus-Kurve, bei Werten von β_0 nahe 1 wird die Kurve zickzack-förmig, fast stückweise linear, sodass sich die Geschwindigkeit nur an den Umkehrpunkten das Vorzeichen ändert.

Die Periode T lässt sich auch explizit in Abhängigkeit von β_0 angeben:

$$\frac{T}{4} = \sqrt{2(\gamma_0 + 1)} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - m \sin^2 \theta} d\theta - \sqrt{\frac{2}{\gamma_0 + 1}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - m \sin^2 \theta}}, \text{ mit } m = \frac{\gamma_0 - 1}{\gamma_0 + 1}. \quad (119)$$

Dieses Resultat ergibt sich aus den Ausführungen in [9]. Eine graphische Darstellung von T in Abhängigkeit von β_0 (siehe Abb. 8) zeigt, dass die Periode für $\beta \rightarrow 1$ rapide gegen Unendlich geht.

7 Untersuchung der numerischen Methoden

Im Folgenden werden die Ergebnisse der numerischen Simulation vorgestellt. Die im Abschnitt 5 vorgestellten Verfahren wurden auf die im Abschnitt 6 vorgestellten Systeme angewendet. Als Energie wird jeweils der Wert der Hamiltonfunktion bezeichnet, wobei dies aufgrund der Reskalierungen und Reparametrisierungen nicht genau der physikalischen Energie entspricht, sondern sich um einen Faktor unterscheidet.

Als Programmiersprache wurde C++ verwendet. Die graphischen Darstellungen wurden mithilfe des Programms gnuplot angefertigt. Für die Berechnung der exakten Lösungen bei dem mathematischen Pendel und dem relativistischen Oszillatoren wurde die Auswertung elliptischer Integrale benötigt, diese Rechnungen wurden mit dem Softwarepaket Mathematica durchgeführt. Der Quellcode in C++ ist im Anhang 4 zu finden.

Anfangs war unklar, welcher Datentyp für die Gleitkommazahlen verwendet werden sollte, `double` (Gleitkommazahl, 16 signifikante Stellen) oder `long double` (Gleitkommazahl, 19 signifikante Stellen). Folgender Test zeigte, dass die Verwendung von `long double` notwendig war:

Rechengenauigkeit Für das beschriebene System des harmonischen Oszillators (96) wurden mit den Anfangswerten $q(0) = 0, p(0) = 1$ die Trajektorien im Phasenraum mit den verschiedenen Verfahren numerisch berechnet, und mit der exakten Lösung verglichen. Die Berechnungen wurden mit konstantem Zeitschritt $h = h_n$ für die verschiedenen Werte $h = 10^{-1}, 10^{-2}, \dots, 10^{-5}$ durchgeführt. Die Rechnungen wurden jeweils einmal mit dem Datentyp `double` und dem Datentyp `long double` durchgeführt.

In Abb.9 bzw. in Abb.10 sind die maximalen Fehler der Energie für die Datentypen `double` bzw. `long double` in Abhängigkeit von der gewählten Schrittweite dargestellt, für die verschiedenen verwendeten numerischen Methoden. Es wäre zu erwarten, dass der Fehler der numerischen Simulation mit dem Zeitschritt abnimmt. In Abb.9 ist jedoch zu erkennen, dass dies bei Energiefehlern von der Größenordnung 10^{-13} für den Datentyp `double` nicht mehr der Fall ist: Die Methoden der Ordnung 4 erreichen den minimalen Energiefehler bei $h = 10^{-3}$.

Bei dem Datentyp `long double` ist zu erkennen, dass die Energiefehler bei allen Verfahren von $h = 10^{-1}$ bis $h = 10^{-4}$ abnehmen, wie erwartet. Erst bei $h = 10^{-5}$ steigt bei manchen Verfahren höherer Ordnung wieder der Wert des Fehlers (vgl. Abb.10).

Wegen dieser Ergebnisse besteht Grund zur Annahme, dass die Fehler bei genügend

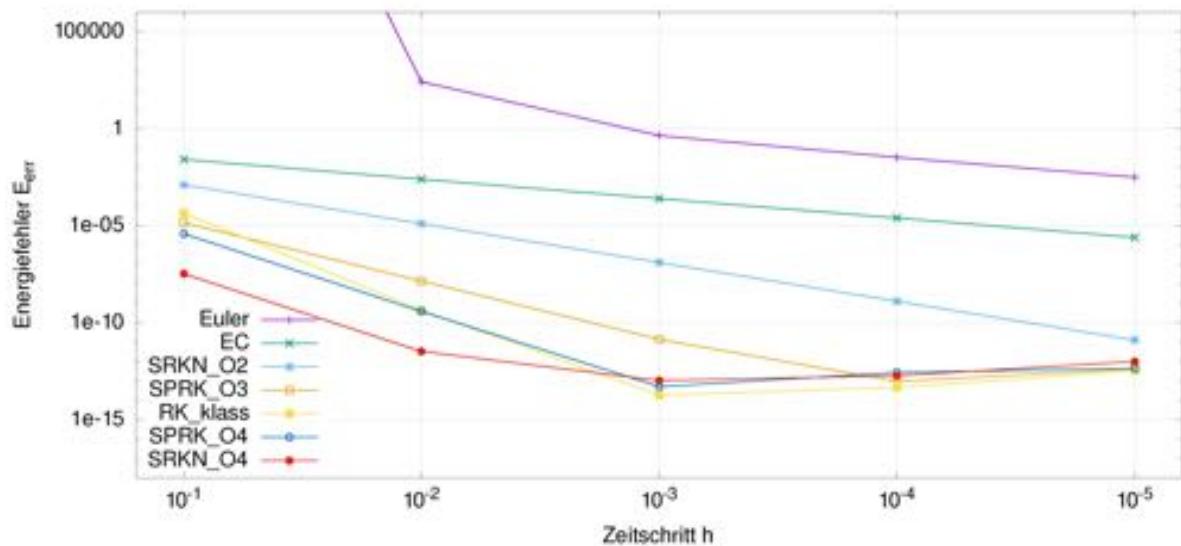


Abbildung 9: Fehler der Energie für die verschiedenen numerischen Verfahren bei der Simulation des harmonischen Oszillators, in Abhängigkeit von der Schrittweite h , mit Datentyp `double`.

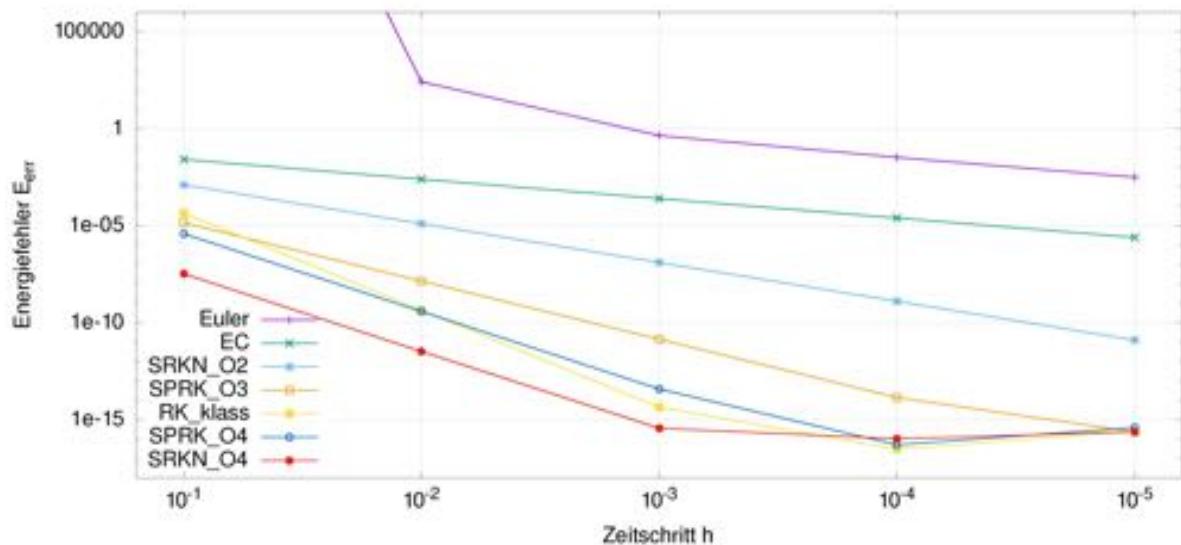


Abbildung 10: Fehler der Energie für die verschiedenen numerischen Verfahren bei der Simulation des harmonischen Oszillators, in Abhängigkeit von der Schrittweite h , mit Datentyp `long double`.

genauer Rechengenauigkeit bei Verkleinerung des Zeitschrittes auch kleiner werden. Sonstige Effekte sind auf Rundungsfehler zurückzuführen. Im Folgenden wird mit der Rechengenauigkeit des Datentyps `long double` gerechnet, hierfür ist ein Zeitschritt von $h \geq 10^{-4}$ sinnvoll. Bei dem Zeitschritt $h = 10^{-5}$ treten wahrscheinlich Rundungsfehler auf, außerdem ist dieser Zeitschritt auch in der Hinsicht problematisch, dass sehr viel Speicherplatz für die Daten benötigt wird.

Symplektische Methoden sind nicht energieerhaltend Wie schon am Ende vom Abschnitt 3 angemerkt, sind symplektische Methoden im Allgemeinen nicht energieerhaltend. Zum Beispiel ergibt sich speziell für den Fall des harmonischen Oszillators für die symplektische Methode SRKN_O2 aus der Iterationsvorschrift für die Energie folgendes Resultat:

$$H(q_{n+1}, p_{n+1}) - H(q_n, p_n) = h^3 \left(-\frac{q_n p_n}{4} \right) + h^4 \left(\frac{q_n^2 - p_n^2}{8} \right) + h^5 \left(\frac{q_n p_n}{8} \right) + h^6 \left(\frac{p_n^2}{32} \right) \neq 0. \quad (120)$$

Es ist aber zu erkennen, dass die Energie sich nicht stark ändert: Die Energieänderung in einem Iterationsschritt hängt hier kubisch vom Zeitschritt h und quadratisch vom Betrag der Werte q_n bzw. p_n ab.

Alle drei Testsysteme (96), (107) und (115) sind durch autonome Hamiltonfunktionen gegeben, daher gilt hier Energieerhaltung. Der Energiefehler der numerischen Rechnung wird durch die Differenz $E_{\text{err},n} = |H(q_n, p_n) - H(q_0, p_0)|$ angegeben. Wurde der zeitliche Verlauf des Energiefehlers betrachtet, so wurden die Betragsstriche weggelassen, um einen besser erkennbaren Verlauf zu erhalten.

7.1 Klassischer harmonischer Oszillator

Ergebnisse

Zunächst wurde die Abhängigkeit des Energiefehlers vom Zeitschritt betrachtet. Das System (96) wurde mit den Anfangswerten $q(0) = 0, p(0) = 1$ mit den sieben im Abschnitt 5 vorgestellten Methoden simuliert, für eine Zeitspanne von $t = 0$ bis $t = 200\pi$, mit verschiedenen Zeitschritten $h = 10^{-1}, \dots, 10^{-5}$, und es wurde jeweils der maximale Energiefehler $E_{\text{err}} = \max_n E_{\text{err},n}$ berechnet. Dieser wurde in Abhängigkeit vom Zeitschritt auf einer logarithmischen Skala graphisch dargestellt, siehe Abb. 10. Diese Ergebnisse sind im letzten Abschnitt schon zum Teil beschrieben worden, an dieser Stelle soll nochmal genauer auf den Vergleich der verschiedenen Methoden eingegangen werden.

Wie schon zuvor angemerkt, sind die Ergebnisse bei $h = 10^{-5}$ sehr wahrscheinlich von Rundungsfehlern beeinflusst, daher werden diese Datenpunkte ignoriert. Es ist zu erkennen, dass die Energiefehler bei der Euler-Methode bei allen Zeitschritten sehr groß sind: Bei den Zeitschritten $h = 10^{-2}, 10^{-3}$ liegt ein Fehler > 1 vor, sogar beim Zeitschritt $h = 10^{-4}$ liegt der Energiefehler bei über 10^{-2} . Von den anderen Methoden lassen sich vier nach ihrer Genauigkeit wie folgt ordnen (ungenaueste zuerst): EC, SRKN_O2, SPRK_O3, SPRK_O4. Die Methode SRKN_O4 liefert bei $h = 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}$ jeweils einen genaueren Energiewert als SPRK_O4, jedoch bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ ist letztere besser. Die Methode 4. Ordnung RK_klass ist bei dem Zeitschritt $h = 10^{-1}$ noch ungenauer in der Energie als die Methode SPRK_O3 3. Ordnung, jedoch ist sie bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ die genaueste Methode. Bei $h = 10^{-4}$ liefern alle drei Methoden 4. Ordnung sehr gute

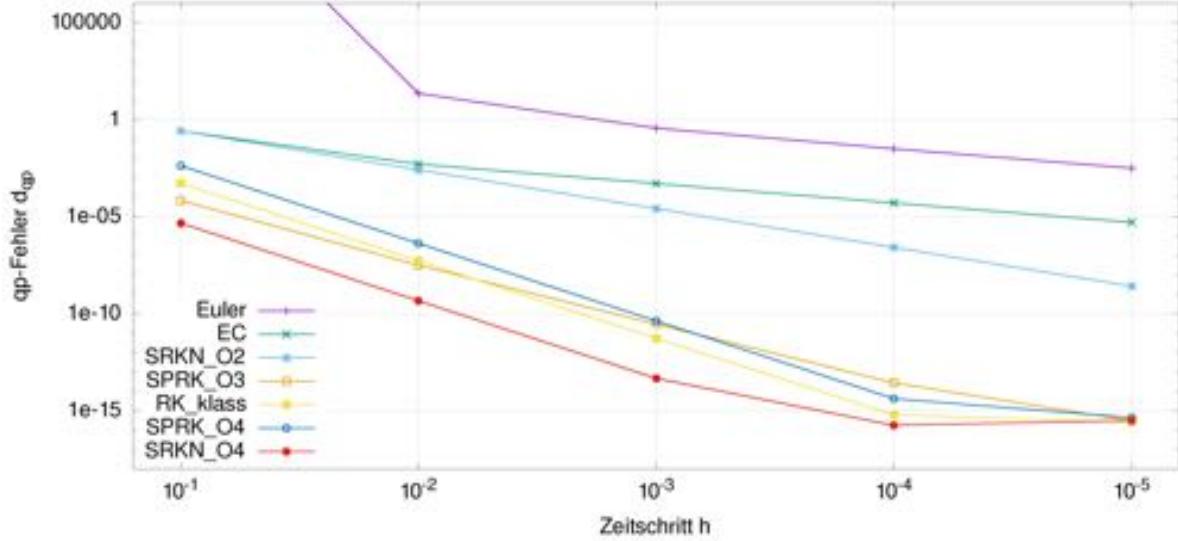


Abbildung 11: Fehler d_{qp} für die verschiedenen numerischen Verfahren, in Abhängigkeit von der Schrittweite h , für eine Zeitspanne von $t = 0$ bis $t = 200\pi$.

Ergebnisse für die Energie, die Fehler liegen im Bereich von 10^{-16} .

Zusätzlich zum Energiefehler können die Ergebnisse direkt mit der exakten Lösung verglichen werden. Hierzu wurde der Fehler der Punkte im Phasenraum $d_{qp,n}$ berechnet (im Folgenden mit qp -Fehler bezeichnet), beschrieben durch den euklidischen Abstand im Phasenraum des exakten Wertes zum numerischen Wert:

$$d_{qp,n} = |(q_n, p_n) - (q(t_n), p(t_n))|, \quad \text{wobei } t_n = n h. \quad (121)$$

Wie bei den Energiefehlern wird auch hier jeweils für die verschiedenen Methoden, bei verschiedenen Zeitschritten, das Maximum der Fehler $d_{qp} = \max_n d_{qp,n}$ bestimmt, und auf einer logarithmischen Skala graphisch dargestellt. Auch hier wird die Zeitspanne von $t = 0$ bis $t = 200\pi$, mit dem Anfangswert $q(0) = 0, p(0) = 1$ simuliert. Diese Ergebnisse sind in Abb. 11 dargestellt.

Vergleicht man Abb. 11 und 10, so ist zu erkennen, dass die qp -Fehler für alle Methoden und alle Zeitschritte größer sind als die Energiefehler. Außerdem ist zu erkennen, dass die Methoden 4. Ordnung RK_klass und $SPRK_O4$ für die Zeitschritte $h = 10^{-1}, 10^{-2}$ einen größeren qp -Fehler aufweisen als die Methode 3. Ordnung $SPRK_O3$. Erst bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ stellen sich die Methoden 4. Ordnung als genauer als die Methoden kleinerer Ordnung heraus, hier haben die Methoden 4. Ordnung einen qp -Fehler im Bereich $\leq 10^{-14}$.

Als nächstes soll untersucht werden, wie sich die Energiefehler und qp -Fehler zeitlich entwickeln. Dafür wurde der zeitliche Verlauf der Energiefehler und der qp -Fehler für die Simulation des harmonischen Oszillators mit den verschiedenen Verfahren betrachtet. Die Simulationen wurden jeweils für das Zeitintervall $t \in [0; 40\pi]$, mit den Zeitschritten $h = 10^{-3}, 10^{-4}$ und mit vier verschiedenen Anfangswerten durchgeführt:

1. $q_0 = 0$, und $p_0 = 1$
2. $q_0 = \frac{1}{2}$ und $p_0 = \frac{1}{2}$
3. $q_0 = -0,7$ und $p_0 = 1,3$

4. $q_0 = 1,8$ und $p_0 = -0,4$

Die Abbildungen der Verläufe des Energiefehlers und des qp -Fehlers sind im Anhang 1 zu finden.

Es gab drei mögliche Langzeitverhalten, die beobachtet wurden:

- Drift: Der Fehler nimmt mit der Zeit kontinuierlich zu.
- Beschränkt: Der Fehler bleibt beschränkt in einem Gebiet.
- Stochastisch: Es ist kein klarer Verlauf des Fehlers zu erkennen, sondern nur ein „Rauschen“.

Beispiele für diese Verläufe sind in Abb. 12, 13 und 14 dargestellt. Das Langzeitverhalten des Fehlers „stochastisch“ tritt nur dann auf, wenn die Fehler in der Größenordnung von 10^{-17} liegen, und dies ist nur beim Zeitschritt $h = 10^{-4}$ bei manchen der Verfahren der Fall.

Insgesamt war die zeitliche Entwicklung des Fehlers für alle Anfangswerte gleich. Die Ergebnisse sind in Tabelle 1 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass das Verhalten der Fehler in folgendem Sinn nicht vom Zeitschritt abhängen: Die einzigen Änderungen beim Übergang von $h = 10^{-3}$ nach $h = 10^{-4}$ gibt es von „stochastisch“ nach „beschränkt“ oder „Drift“. Auch weil das Verhalten „stochastisch“ nur bei kleinen Zahlenwerten ($\sim 10^{-17}$) auftritt, ist daher zu vermuten, dass in diesem Fall die Rundungsfehler in den Verlauf der Fehler der numerischen Verfahren mit hineinspielen.

Außerdem ist zu erkennen, dass der Energiefehler bei allen symplektischen Methoden beschränkt bleibt, während dieser bei den beiden nicht-symplektischen Methoden Driftet. Der qp -Fehler hingegen Driftet bei fast allen Methoden, und bleibt nur bei den Methoden EC und SPRK_O3 beschränkt.

Diskussion

Die Ergebnisse aus Abb. 10 und Abb. 11 zeigen, dass die Methoden 4. Ordnung bei einem Zeitschritt von $h = 10^{-4}$ genügend kleine Fehler aufweisen, sodass sie zur vernünftigen Simulation des Systems für kurze Zeitintervalle im Bereich von 200 Umläufen brauchbar sind.

	Zeitschritt $h = 10^{-4}$		Zeitschritt $h = 10^{-3}$	
	Energiefehler	qp -Fehler	Energiefehler	qp -Fehler
Euler	Drift	Drift	Drift	Drift
EC	beschränkt	beschränkt	beschränkt	beschränkt
SRKN_O2	beschränkt	Drift	beschränkt	Drift
SPRK_O3	beschränkt	beschränkt	beschränkt	beschränkt
RK_klass	stochastisch	Drift	Drift	Drift
SPRK_O4	stochastisch	Drift	beschränkt	Drift
SRKN_O4	stochastisch	stochastisch	beschränkt	Drift

Tabelle 1: Zeitliche Entwicklung der Fehler bei einer Messung von 20 Perioden ($0 \leq t \leq 40\pi$), mit den verschiedenen numerischen Verfahren, bei Zeitschritten $h = 10^{-3}$ und $h = 10^{-4}$.

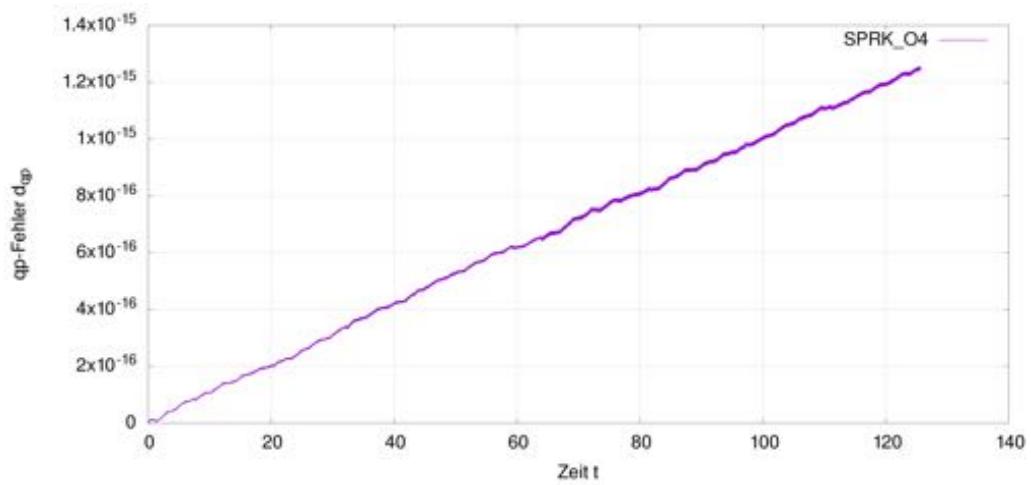


Abbildung 12: Beispiel für den Verlauf „Drift“, Methode: SPRK_O4, Anfangswerte: $q_0 = -0,7$ und $p_0 = 1,3$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, qp-Fehler.

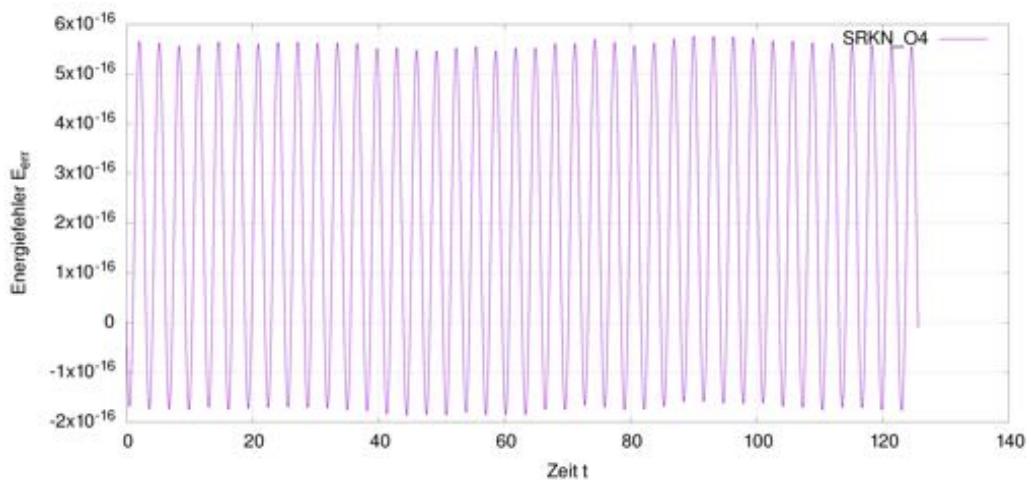


Abbildung 13: Beispiel für den Verlauf „beschränkt“, Methode: SRKN_O4, Anfangswerte: $q_0 = -0,7$ und $p_0 = 1,3$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Energiefehler.

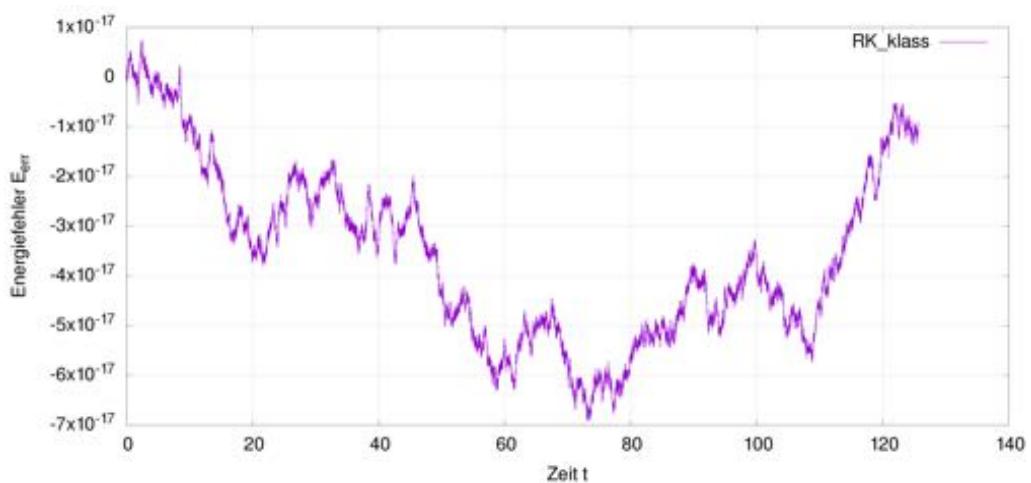


Abbildung 14: Beispiel für den Verlauf „stochastisch“, Methode: RK_klass, Anfangswerte: $q_0 = -0,7$ und $p_0 = 1,3$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Energiefehler.

Da die Energiefehler bei den symplektischen Verfahren beschränkt bleiben, kann vermutet werden, dass sich diese Verfahren eignen, um die Energiefläche akkurat darzustellen. Bevor diese Aussage gemacht wird sollten jedoch auch dieselben Simulationen und Überlegungen mit den anderen Testsystemen durchgeführt werden.

Es ist überraschend, dass die qp -Fehler zum Teil um den Faktor 100 größer sind als die Energiefehler, besonders bei diesem Beispiel, wo die Energieflächen gerade den konzentrischen Kreisen um den Ursprung entsprechen, denjenigen Kurven, auf denen die Trajektorien verlaufen. Eine gute Erklärung für den großen qp -Fehler wäre daher, dass die numerische Simulation einen Fehler in der Zeitparametrisierung hat, d.h. die Trajektorien im Phasenraum werden mit einer leicht anderen Geschwindigkeit durchlaufen als bei der exakten Lösung. Dies erklärt auch, warum die qp -Fehler bei den meisten Verfahren Driften. Interessant, ist, dass der qp -Fehler bei den Verfahren EC und SPRK_O3 beschränkt bleibt. Dass dies keine allgemeine Eigenschaft dieser Verfahren ist, sondern vermutlich nur mit diesem speziellen System zusammenhängt, zeigt sich durch die Ergebnisse bei den anderen Testsystemen.

7.2 Mathematisches Pendel

Ergebnisse

Für das mathematische Pendel (107) wurden dieselben Überlegungen durchgeführt wie für den harmonischen Oszillator. Wie schon im Abschnitt 6.2 beschrieben, lässt sich für kleine Winkel das mathematische Pendel durch den harmonischen Oszillator approximieren (vgl. auch Abb. 5). Daher sind besonders die entgegengesetzten Fälle mit besonders großem Winkel interessant. Daher wurden Anfangswerte q_0, p_0 gewählt, dessen Energie $E_0 = H(q_0, p_0)$ sehr nahe an der Energie der instabilen Fixpunkte, $E_{\text{instabil}} = H(\pi, 0) = 10$ liegt. Hierdurch ist zum einen die Periode der Trajektorie sehr groß, und das Verhalten ändert sich mit kleinen Änderungen der Anfangswerte stärker als im harmonischen Bereich, d.h. in der Umgebung des stabilen Fixpunktes. Dies bedeutet auch, dass das System anfälliger für Fehler ist.

Die exakte Lösung von (107) lässt sich mithilfe von elliptischen Integralen bestimmen, dies wurde anhand von [10] mit dem Softwarepaket Mathematica durchgeführt. Somit konnte die numerische Lösung mit der exakten Lösung verglichen werden.

Insgesamt wurden drei Anfangswerte betrachtet:

1. $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$, $E_0 = 9,999995065197840042$: Das Pendel schwingt hin und her, kommt aber bei der maximalen Auslenkung sehr nahe an den instabilen Fixpunkt heran.
2. $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$, $E_0 = 9,9999683654714238700$: Gleicher Fall wie der erste Anfangswert, mit dem Unterschied dass die Anfangsgeschwindigkeit ungleich Null ist.
3. $q_0 = 0$ und $p_0 = \sqrt{40,00002}$, $E_0 = 10,00001$: Das Pendel schwingt über, verlangsamt sich jedoch bei jedem Überschlag an der Stelle $q = \pi$ sehr stark.

Diese Anfangswerte sind in Abb. 15 ungefähr im Phasenportrait des Pendels eingezeichnet. Für diese Anfangswerte wurde jeweils das System mit den sieben vorgestellten Methoden für eine Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$ mit unterschiedlichen Zeitschritten $h = 10^{-1}, \dots, 10^{-4}$ simuliert, und für die einzelnen Simulationen wurden jeweils, wie

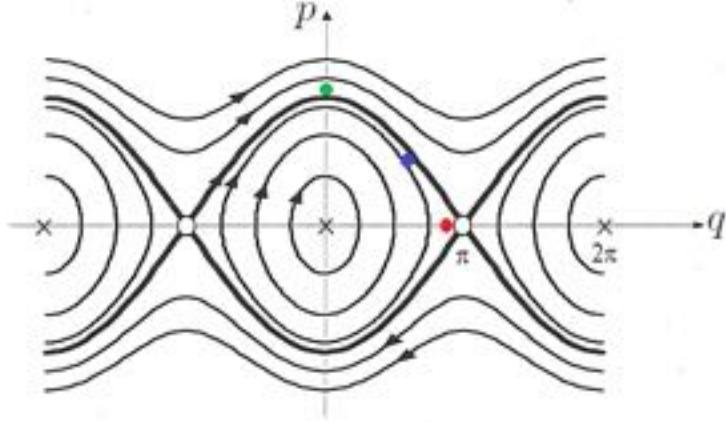


Abbildung 15: Phasenportrait der Lösungen des mathematischen Pendels, Gleichung (106). Quelle: [8]. Die Anfangswerte sind farbig markiert: $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$ (rot), $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$ (blau), und $q_0 = 0$ und $p_0 = \sqrt{40,00002}$ (grün).

im letzten Abschnitt beschrieben, der maximale Energiefehler E_{err} und der maximale qp -Fehler d_{qp} bestimmt. In Abb. 16, 20 und 25 sind, für je einen Anfangswert, der Energiefehler in Abhängigkeit vom Zeitschritt dargestellt, jeweils für die sieben Methoden im Vergleich, dasselbe wird in Abb. 17, 21 und 26 mit dem qp -Fehler getan.

Anfangswert $q_0 = 0,9999\pi$ **und** $p_0 = 0$. Eine Betrachtung von Abb. 16 und Abb. 17 zeigt, dass manche Simulationen einen Fehler größer als 1 besitzen, d.h. dass sie offensichtlich falsche Ergebnisse liefern. Betrachte zum genaueren Verständnis dieses Fehlers den Verlauf von $q(t)$ für diese Situationen: Die Methode Euler für die Zeitschritte $h = 10^{-1}, \dots, 10^{-4}$ (siehe Abb. 18), sowie die Methoden RK_klass für die Zeitschritte $h = 10^{-1}, 10^{-2}$, sowie die Methoden EC, SRKN_O2 und SPRK_O4 mit dem Zeitschritt $h = 10^{-1}$ (siehe Abb. 19).

Die Euler-Methode liefert Ergebnisse, bei der das Pendel überschlägt, somit sind diese Ergebnisse qualitativ falsch. Bei den anderen Methoden mit großem Fehler, in Abb. 19 dargestellt, liegt ein geringer oder größerer Fehler in der Periode vor, auf Grund dessen sich der Abstand von der exakten Lösung mit zunehmender Zeit vergrößert, und somit auch der qp -Fehler.

Betrachte nun die Energiefehler in Abb. 16: Es lässt sich für alle Zeitschritte unter Weglassen der Methode RK_klass eine Reihenfolge der Methoden, von ungenauester zu genauerer, angeben: Euler, EC, SRKN_O2, SPRK_O3, SPRK_O4 und SRKN_O4. Die Genauigkeit der Methode RK_klass liegt bei dem Zeitschritt $h = 10^{-1}$ zwischen SRKN_O2 und SPRK_O3, und verbessert sich mit Verkleinerung des Zeitschritts, bis bei $h = 10^{-4}$ die Methode RK_klass nach SRKN_O4 die zweit-genaueste Methode darstellt. Die kleinsten Fehler, erreicht von den Methoden 4. Ordnung bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$, liegen in der Größenordnung von 10^{-14} .

Bei den qp -Fehlern in Abb. 17 ist fast die gleiche Reihenfolge zu erkennen wie bei den Energiefehlern, wobei die Fehler teilweise sehr dicht beieinander liegen, sodass es an der graphischen Darstellung nicht immer erkennbar ist, welcher Fehler kleiner ist. Überraschend ist, dass bei den Zeitschritten $h = 10^{-1}, 10^{-2}$ die Methode SPRK_O3 3. Ordnung einen

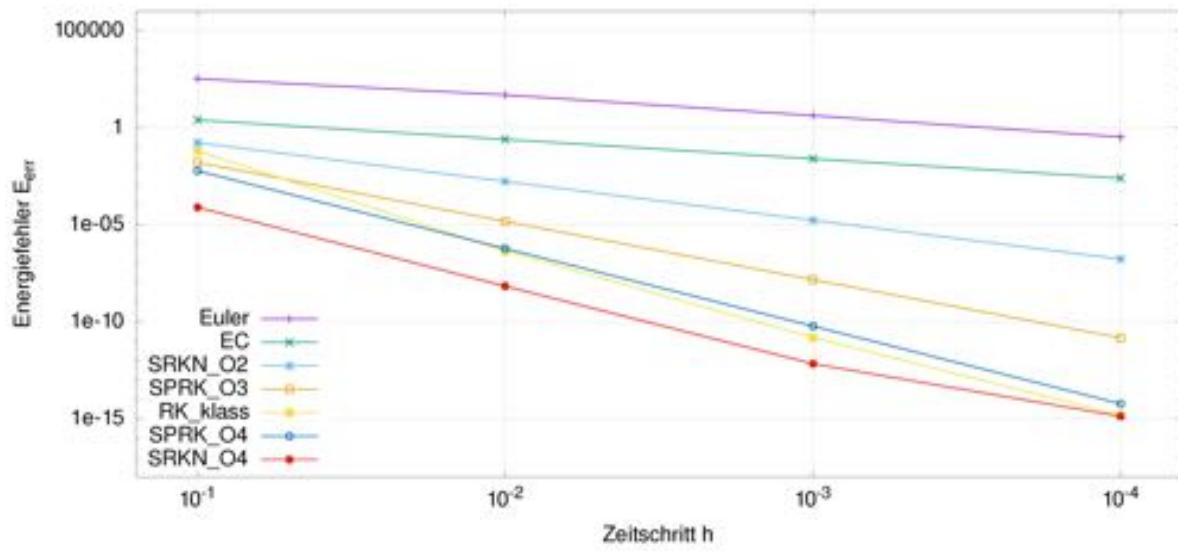


Abbildung 16: Energiefehler des mathematischen Pendels in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

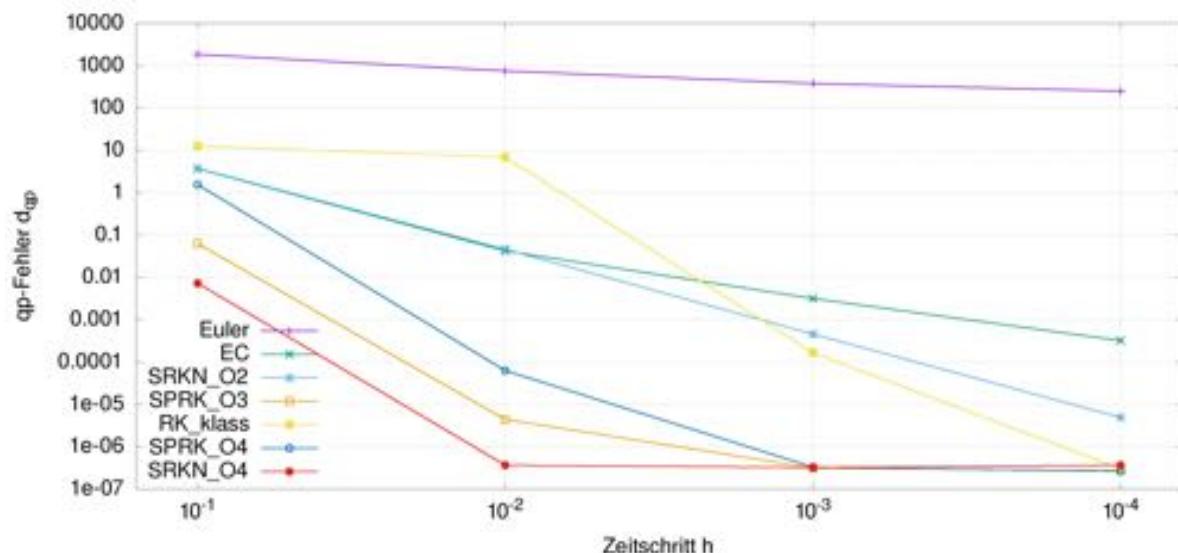


Abbildung 17: qp -Fehler des mathematischen Pendels in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

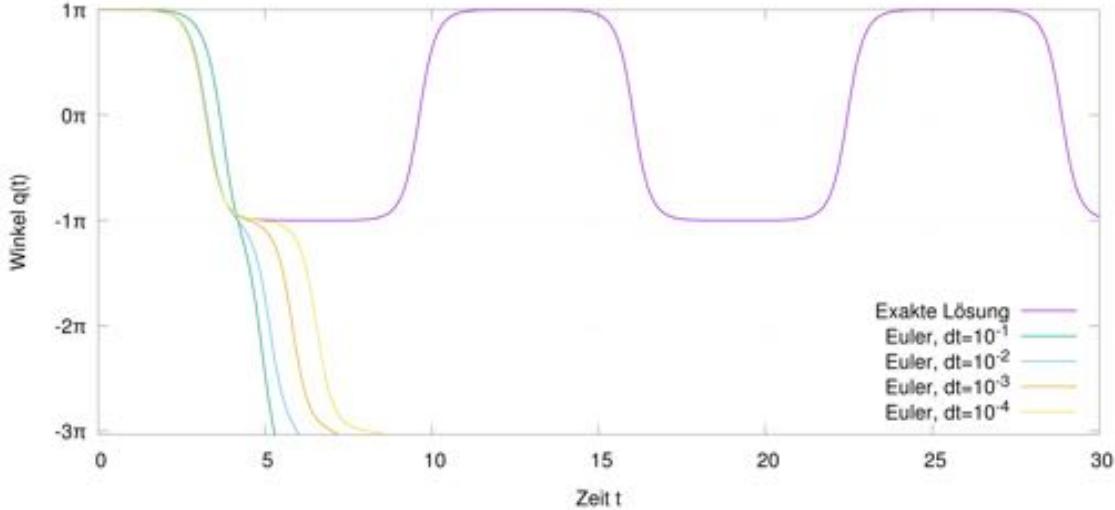


Abbildung 18: Positionskoordinate (Winkel) $q(t)$ in Abhängigkeit von t bei der Simulation des mathematischen Pendels mit der Euler-Methode, im Vergleich zur exakten Lösung, Anfangswert $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$.

kleineren qp -Fehler hat als die Methode 4. Ordnung SPRK_O4.

Besonders anzumerken ist, dass die kleinsten erreichten Fehler in der Größenordnung von 10^{-6} liegen, diese werden von den Methoden SPRK_O3, SPRK_O4 und SRKN_O4 bei Zeitschritten $h = 10^{-3}$ und 10^{-4} erreicht. Die Methode SRKN_O4 erreicht diese Genauigkeit sogar schon bei dem Zeitschritt 10^{-2} , und die Methode RK_klass liegt bei dem Zeitschritt $h = 10^{-3}$ noch weit über dieser Genauigkeit, erreicht sie aber bei dem Zeitschritt 10^{-4} .

Anfangswert $q_0 = 2$ **und** $p_0 = \sqrt{11,677}$. Betrachtet man hier die Energiefehler in Abb. 20 und vergleicht mit dem vorherigen Anfangswert (Abb. 16), so ist eine sehr große Ähnlichkeit zu erkennen, so groß, dass die Beschreibung von letzterem auch auf diesen Verlauf passt. Außerdem sind die Größenordnungen der Energiefehler für gleiche Methode und Schrittweite bei beiden Methoden fast gleich. Sehr genaues Hinsehen oder eine Betrachtung der Werte zeigt, dass die meisten Fehler bei dem zweiten Anfangswert etwas größer sind als bei dem ersten.

Auffällig ist, dass im Gegensatz dazu die qp -Fehler von diesem Anfangswert (siehe Abb. 21) und dem ersten Anfangswert (siehe Abb. 17) große Unterschiede aufweisen. Ein großer Unterschied besteht darin, dass nicht nur die Euler-Methode, sondern auch die Methoden EC und SRKN_O2 bei allen Zeitschritten schlechte Ergebnisse liefern: Bei der Methode EC steigt der qp -Fehler sogar mit kleinerem Zeitschritt, und bei der Methode SRKN_O2 sinkt zwar der Fehler mit kleinerem Zeitschritt, doch erreicht er bei $h = 10^{-4}$ nur einen Fehler zwischen 0,1 und 1. Vergleiche daher für diese beiden Verfahren den Verlauf von $q(t)$ mit der exakten Lösung.

Für die EC-Methode (siehe Abb. 22) stellt sich heraus, dass sich die Periode von unten an die Periode der exakten Lösung annähert, aber bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ noch weit von der richtigen Periode entfernt ist. Dass der Wert des qp -Fehlers bei $h = 10^{-1}$ am kleinsten ist, liegt wohl daran, dass die Periode der numerischen Lösung ungefähr bei der Hälfte der exakten Periode liegt.

Bei der Methode SRKN_O2 (siehe Abb. 23) ist zu erkennen, dass die Zeitschritte $h =$

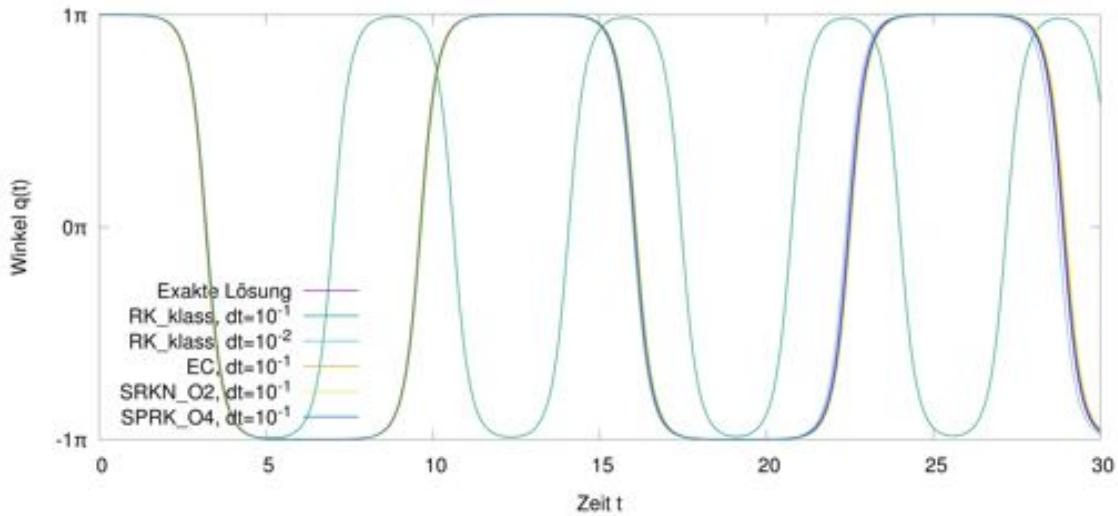


Abbildung 19: Positionskoordinate (Winkel) $q(t)$ in Abhängigkeit von t bei der Simulation des mathematischen Pendels mit Methoden mit Energiefehler oder qp -Fehler $d_{qp} > 1$, im Vergleich zur exakten Lösung, Anfangswert $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$.

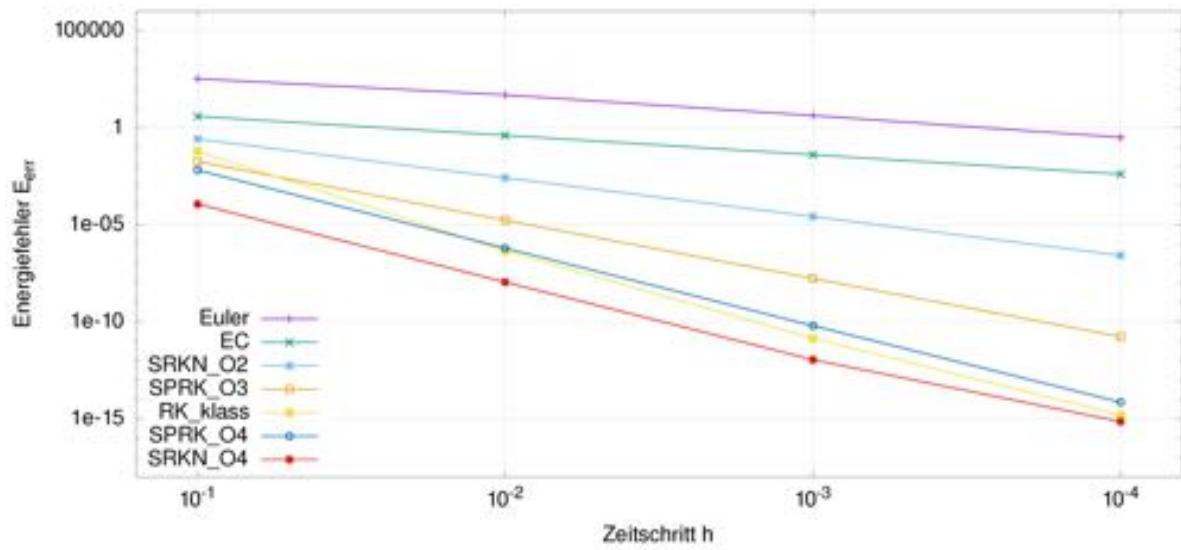


Abbildung 20: Energiefehler des mathematischen Pendels in Abhängigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

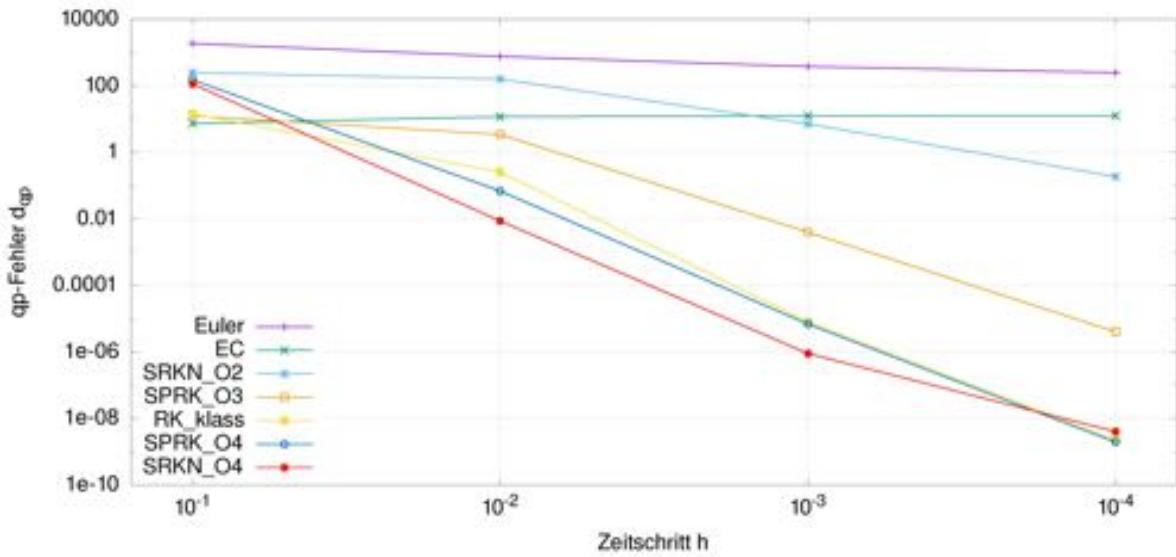


Abbildung 21: qp -Fehler des mathematischen Pendels in Abhängigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

$10^{-1}, 10^{-2}$ qualitativ falsche Ergebnisse liefern, bei denen das Pendel überschlägt. Bei dem Zeitschritt $h = 10^{-3}$ ist eine etwas zu große Periode zu sehen. Die exakte Lösung ist in der Abbildung nicht zu erkennen, weil sie sich genau mit der Kurve des Zeitschrittes $h = 10^{-4}$ überlappt. Bei diesem Zeitschritt liegt wahrscheinlich ein genügend großer Fehler in der Periode vor, sodass mit steigendem t bis $t = 100$ sich die Werte so sehr von der exakten Lösung entfernt haben, dass ein Fehler größer als 0,1 vorliegt.

Ein weiterer Unterschied zwischen dem Verlauf des qp -Fehlers des ersten und zweiten Anfangswertes (Abb. 17 und 21) liegt darin, dass alle Methoden bei einem Zeitschritt von $h = 0,1$ falsche Ergebnisse liefern. In Abb. 24 ist der Verlauf von $q(t)$ für die exakte Lösung, sowie für alle numerischen Methoden für den Zeitschritt $h = 0,1$ dargestellt. Hier ist für jede Methode deutlich zu erkennen an welcher Stelle es schief läuft: Die Methoden Euler, SRKN_O2, SPRK_O4 und SRKN_O4 zeigen im Gegensatz zur exakten Lösung einen Verlauf, bei dem das Pendel überschlägt. Die Methode RK_klass zeigt einen Verlauf, bei dem das Pendel einmal überschlägt, danach aber hin und her schwingt. Die übrigen Methoden EC und SPRK_O3 zeigen qualitativ das richtige Ergebnis, dass das Pendel hin und her schwingt, doch diese numerischen Werte besitzen eine viel zu geringe Periode.

Zum Unterschied der qp -Fehler zwischen dem ersten und zweiten Anfangswert (Abb. 17 und 21) lässt sich noch sagen, dass die Methode SPRK_O3 deutlich größere Fehler bei dem zweiten Anfangswert hat als bei dem ersten. Die Methoden 4. Ordnung haben im Gegensatz dazu bei dem zweiten Anfangswert bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ einen um den Faktor 100 kleineren Fehler als bei dem ersten Anfangswert, nämlich in der Größenordnung von 10^{-8} .

Anfangswert $q_0 = 0$ **und** $p_0 = \sqrt{40,00002}$. Betrachte auch hier den Verlauf des Energiefehlers, siehe Abb. 25. Dieser Verlauf ist wieder sehr ähnlich zum Verlauf des Energiefehlers bei den anderen Anfangswerten, was die Verhältnisse der Fehler zwischen den unterschiedlichen Methoden betrifft. Ansonsten lässt sich sagen, dass der Fehler vom Betrag her eher größer ist als bei den anderen Anfangswerten.

Bei den qp -Fehlern (Abb. 26) lässt sich eine sehr klare Trennung zwischen „erfolgreichen“

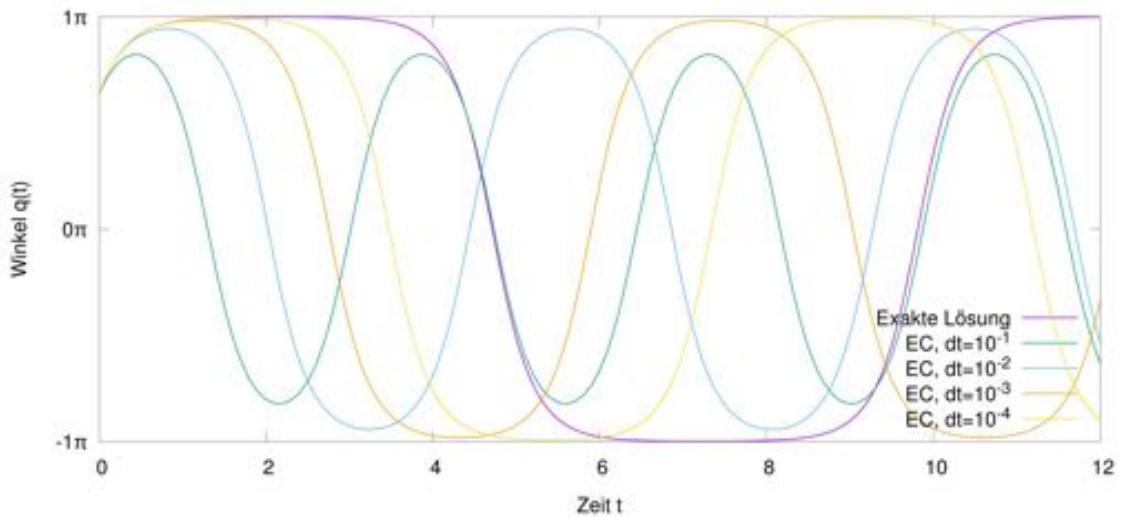


Abbildung 22: Positionskoordinate (Winkel) $q(t)$ in Abhangigkeit von t bei der Simulation des mathematischen Pendels mit der EC-Methode, im Vergleich zur exakten Losung, Anfangswert $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$.

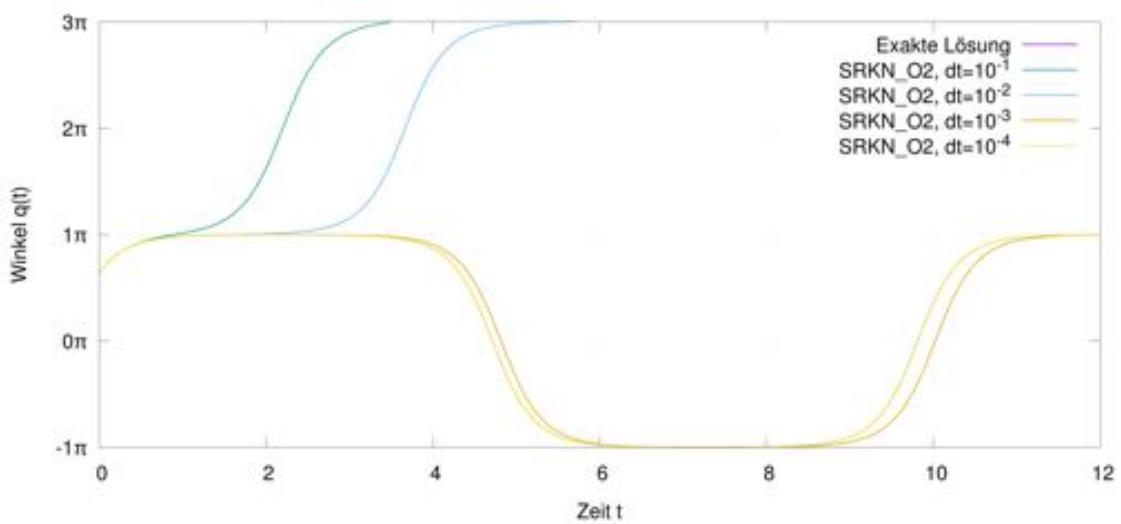


Abbildung 23: Positionskoordinate (Winkel) $q(t)$ in Abhangigkeit von t bei der Simulation des mathematischen Pendels mit der SRKN_O2-Methode, im Vergleich zur exakten Losung, Anfangswert $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$.

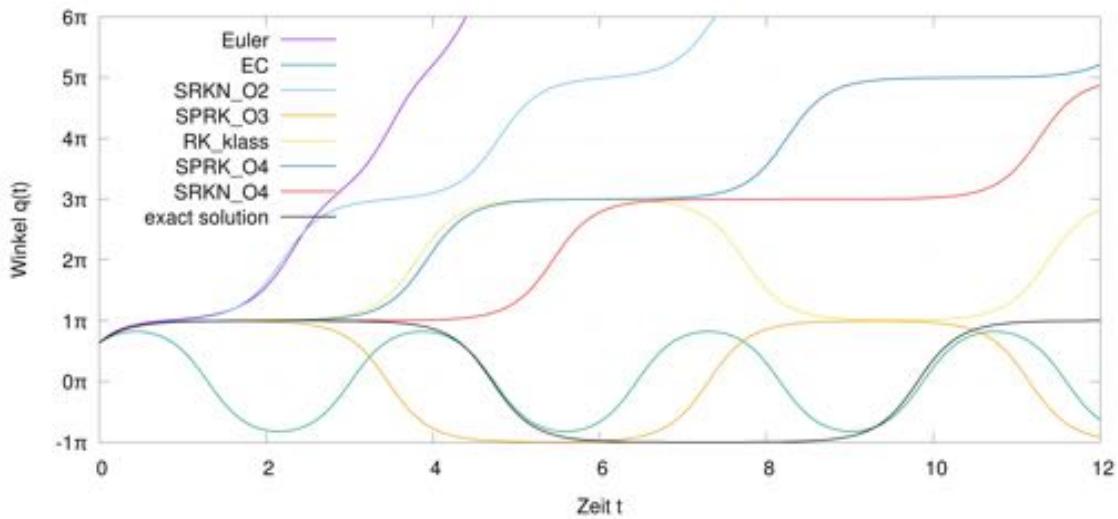


Abbildung 24: Positionskoordinate (Winkel) $q(t)$ in Abhängigkeit von t bei der Simulation des mathematischen Pendels mit der SRKN_O2-Methode, im Vergleich zur exakten Lösung, Anfangswert $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$.

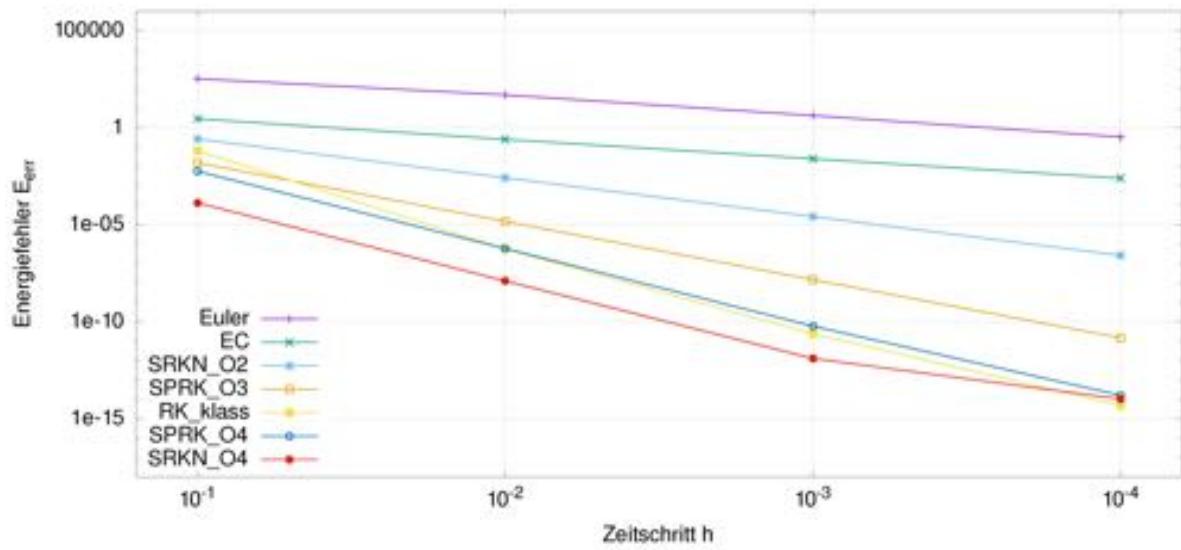


Abbildung 25: Energiefehler des mathematischen Pendels in Abhängigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $p_0 = \sqrt{40,00002}$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

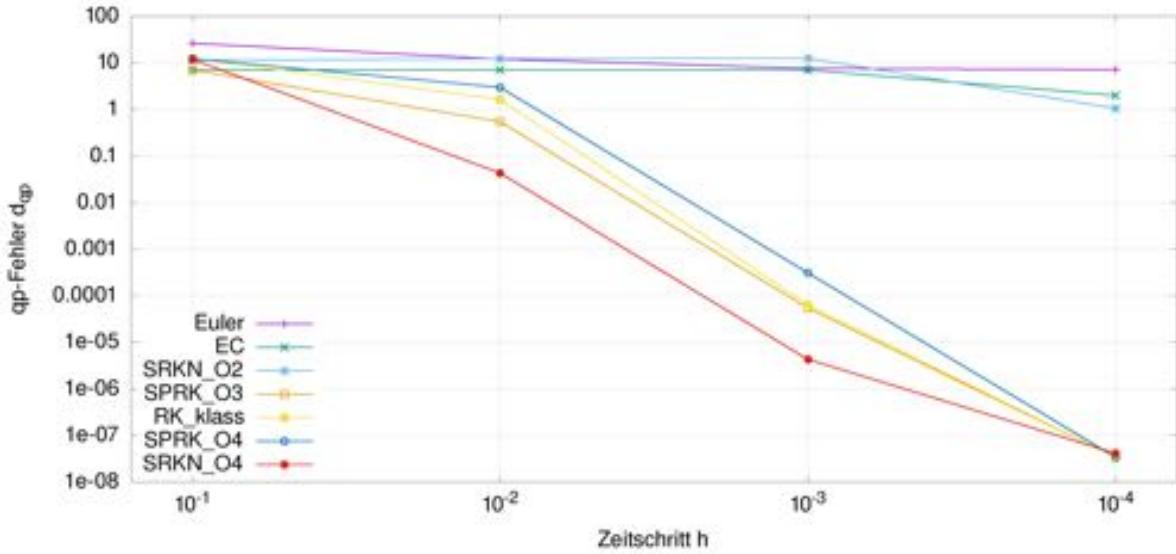


Abbildung 26: qp -Fehler des mathematischen Pendels in Abhängigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $p_0 = \sqrt{40,00002}$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

und „nicht erfolgreichen“ Methoden machen: Die Methoden Euler, EC und SRKN_O2 liefern für alle Zeitschritte qp -Fehler größer als 1, während die anderen Methoden für den Zeitschritt $h = 10^{-3}$ schon qp -Fehler unterhalb von 10^{-3} liefern, und bei dem Zeitschritt 10^{-4} alle diese Verfahren einen qp -Fehler in der Größenordnung von 10^{-7} besitzen. Interessant ist, dass zu den „erfolgreichen“ Methoden auch die Methode SPRK_O3 zählt: Sie ist bei den Zeitschritten $h = 10^{-2}, 10^{-3}$ die zweit-besten, nach der Methode SRKN_O4.

Zeitlicher Verlauf der Fehler Betrachte nun für die unterschiedlichen Verfahren und die drei Anfangswerte den zeitlichen Verlauf der Energiefehler und qp -Fehler. Die bisherigen Betrachtungen haben gezeigt, dass manche Verfahren deutlich falsche Ergebnisse liefern. Um nur die Verfahren auszuwählen, welche das System gut approximieren, werden nur diejenigen Verfahren betrachtet, bei denen sowohl der Energiefehler als auch der qp -Fehler für den Zeitschritt $h = 10^{-4}$ bei allen drei Anfangswerten unterhalb von 10^{-3} liegen. Dies sind die Verfahren SPRK_O3, RK_klass, SPRK_O4 und SRKN_O4.

Für jedes dieser vier Verfahren und für jeden Anfangswert wurde jeweils der zeitliche Verlauf des Energiefehlers und des qp -Fehlers dargestellt. Bei dem qp -Fehler war eine klare Tendenz schon für den Zeitraum $t \in [0; 100]$ erkennbar, für den Energiefehler war dies nicht der Fall. Daher wurde für den Verlauf des Energiefehlers ein Zeitintervall von $t \in [0; 2000]$ gewählt. Alle Berechnungen wurden mit dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$ durchgeführt. Diese Abbildungen des Verlaufs der Energiefehler und der qp -Fehler sind im Anhang 2 zu finden.

Die Beobachtungen sind in Tabelle 2, 3 und 4 zusammengefasst. Es sind 4 Typen von Verläufen zu erkennen, diese sind hier mit „Drift“, „beschränkt“, „stochastisch“ und „beschränkt + stochastisch“ bezeichnet. Die ersten drei Bezeichnungen stimmen mit der Beschreibung im vorherigen Abschnitt 7.1 überein. Mit „beschränkt + stochastisch“ ist eine Überlagerung der beiden Verhalten gemeint, siehe als Beispiel Abb. 27.

	<i>qp</i> -Fehler	Energiefehler
SPRK_O3	Drift	beschränkt
RK_klass	Drift	beschränkt + stochastisch
SPRK_O4	Drift	beschränkt + stochastisch
SRKN_O4	Drift	stochastisch

Tabelle 2: Zeitliche Entwicklung der Fehler mit den numerischen Verfahren SPRK_O3, RK_klass, SPRK_O4 und SRKN_O4 bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$, mit dem Anfangswert $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$.

	<i>qp</i> -Fehler	Energiefehler
SPRK_O3	Drift	beschränkt
RK_klass	Drift	beschränkt + stochastisch
SPRK_O4	Drift	beschränkt + stochastisch
SRKN_O4	Drift	stochastisch

Tabelle 3: Zeitliche Entwicklung der Fehler mit den numerischen Verfahren SPRK_O3, RK_klass, SPRK_O4 und SRKN_O4 bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$, mit dem Anfangswert $q_0 = 2$ und $p_0 = \sqrt{11,677}$.

	<i>qp</i> -Fehler	Energiefehler
SPRK_O3	Drift	beschränkt
RK_klass	Drift	stochastisch
SPRK_O4	Drift	stochastisch
SRKN_O4	Drift	stochastisch

Tabelle 4: Zeitliche Entwicklung der Fehler mit den numerischen Verfahren SPRK_O3, RK_klass, SPRK_O4 und SRKN_O4 bei dem Zeitschritt $h = 10^{-4}$, mit dem Anfangswert $q_0 = 0$ und $p_0 = \sqrt{40,00002}$.

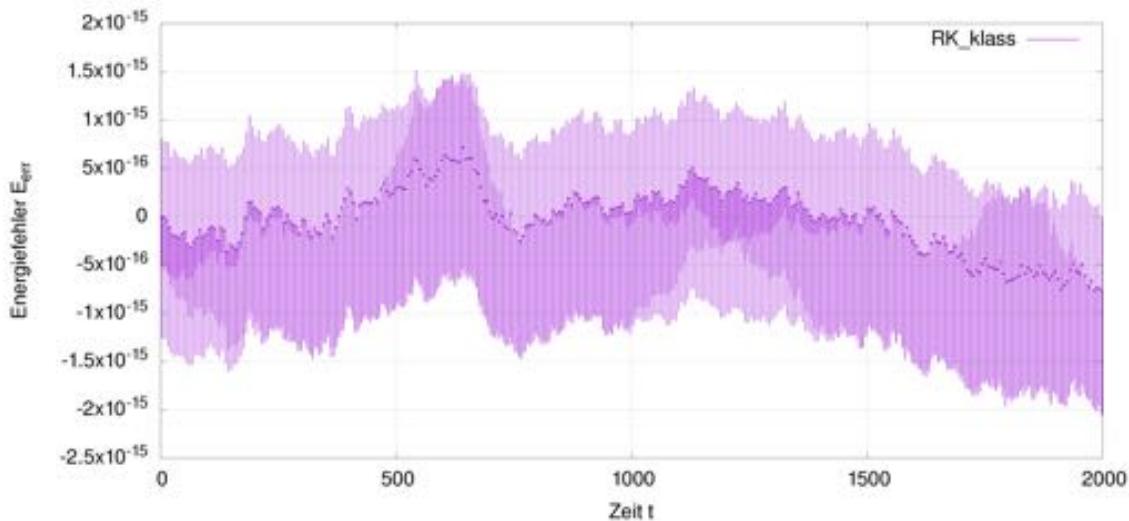


Abbildung 27: Beispiel für den Verlauf „beschränkt + stochastisch“, Verlauf des Energiefehlers E_{err} bei der Simulation des Pendels mit Anfangswert $q_0 = 0,9999\pi$ und $p_0 = 0$ mit der Methode RK_klass.

Diskussion

Vergleicht man insgesamt die Fehler, die sich bei dem mathematischen Pendel ergeben haben, mit den Ergebnissen der Simulation des harmonischen Oszillators, so ist sofort klar, dass das mathematische Pendel viel anfälliger für Fehler ist: Für eine gute Simulation des Pendels wird ein Zeitschritt von $h = 10^{-4}$ und eine Methode mit Ordnung ≥ 3 benötigt. Mit den anderen Verfahren sind die qp -Fehler, vor allem bei dem dritten gewählten Anfangswert, sehr groß. Dies liegt daran, dass die gewählten Anfangswerte sehr nahe an der Energiefläche $E = E_{\text{instabil}} = 10$ liegen, wie schon am Anfang dieses Abschnittes bei der Auflistung der Anfangswerte angemerkt wurde.

Außerdem ist interessant, dass für dieses spezielle System die Energiefehler klein, aber die qp -Fehler im Vergleich dazu sehr groß sind. Dies liegt daran, dass in der Nähe von E_{instabil} ein kleiner Fehler in der Energie zu einem verhältnismäßig großen Fehler in der Periode der Trajektorien von q und p führt. Es lässt sich also festhalten: Auch wenn für eine Methode der Energiefehler beschränkt bleibt, nimmt der maximale qp -Fehler mit der Zeit zu, was durch den Fehler der Periode bewirkt wird.

Ähnlich wie bei dem harmonischen Oszillator lässt sich also sagen: Durch die numerische Simulation lässt sich eine Energiefläche im Phasenraum zeichnen, die sehr nahe an der exakten Energiefläche liegt. (Wegen der Dimension $d = 1$ entspricht die Trajektorie der Energiefläche.) Der minimale, nicht sichtbare Fehler der Energie führt aber zu größeren, sichtbaren Fehlern in der Zeitparametrisierung, welche im Fall dieses Systems sogar mit Größe des Zeitintervalls zunehmen.

Dies ist auch an den Ergebnissen des zeitlichen Verlaufs der Fehler zu sehen, vgl. Tabelle 2, 3 und 4: Für alle Verfahren und Anfangswerte nimmt der maximale qp -Fehler mit der Zeit zu. Keines der Verfahren scheint daher über lange Zeitskalen akkurate Ergebnisse liefern zu können, welche hinsichtlich der Zeitparametrisierung stimmen.

Zum zeitlichen Verlauf der Energiefehler lässt sich mit diesen Ergebnissen leider nicht viel sagen, wegen der hier als „stochastisch“ bezeichneten Einflüsse. Lediglich bei dem Verfahren SPRK_O3 lässt sich klar sagen, dass der Energiefehler beschränkt bleibt. Insbesondere lässt sich nicht klar sagen, ob bei allen symplektischen Methoden der Energiefehler beschränkt bleibt, wie bei dem harmonischen Oszillator. Es lässt sich jedoch auch nicht das Gegenteil behaupten.

Die Größenordnung der Energiefehler des Verfahrens SPRK_O3 liegen bei 10^{-11} (siehe Abb. 16, 20 und 25, oder Anhang 2), während die Energiefehler der Verfahren, bei denen stochastische Fehler auftreten, in der Größenordnung von 10^{-14} liegen. Im Gegensatz dazu wurden stochastische Effekte bei dem harmonischen Oszillator erst bei einer Größenordnung von 10^{-17} beobachtet. Im Fall des harmonischen Oszillators konnte ein größerer Zeitschritt gewählt werden, sodass sich auch der Fehler vergrößerte, und die stochastischen Effekte nicht mehr auftraten. Hier ist dies nicht möglich, denn bei dem Zeitschritt $h = 10^{-3}$ sind die Fehler teilweise so groß, dass die exakte Lösung nicht mehr vernünftig approximiert wird; eine Betrachtung dieser Simulationen ist daher nicht mehr sinnvoll. Die Lösung würde darin liegen, die Rechnungen nochmal mit einer größeren Rechengenauigkeit zu wiederholen. Da es in C++ keinen eingebauten Datentyp gibt, der genauer als `long double` ist, wäre dies ohne größeren Aufwand nicht möglich gewesen, und das war aus Zeitgründen nicht möglich.

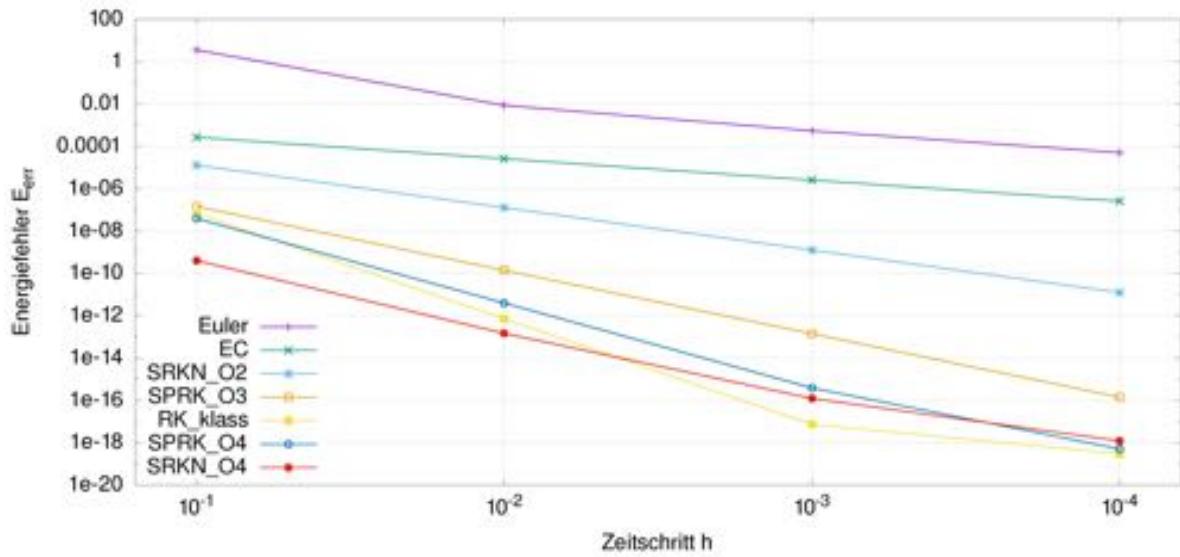


Abbildung 28: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0, 1$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

7.3 Relativistischer (an)harmonischer Oszillator

Ergebnisse

Bei diesem System (115) des relativistischen anharmonischen Oszillators lassen sich, wie schon im Abschnitt 6.3 erwahnt, die numerischen Losungen nicht mit der exakten Losung direkt vergleichen, da die exakte Losung nur in der Form $t(q)$ vorliegt.

Betrachte daher nur den Energiefehler. Die Simulation wurde mit den sieben numerischen Methoden, jeweils mit den Zeitschritten $h = 10^{-1}, \dots, 10^{-4}$ mit dem Zeitintervall $t \in [0; 100]$ und den Anfangswerten $q_0 = 0, \beta_0 = 0, 1, 0, 5, 0, 8, 0, 9, 0, 99$ und $0, 999$ durchgefuhrt, wobei $p_0 = p_0(\beta_0)$ nach Gleichung (117) bestimmt werden konnte. Der maximale Energiefehler wurde fur jeden Anfangswert in Abhangigkeit vom Zeitschritt graphisch dargestellt. Außerdem wurde auch fur jede der Simulationen der zeitliche Verlauf des Energiefehlers betrachtet. Eine Auswahl dieser Darstellungen ist im Anhang 3 zu finden. Betrachte hier den Energiefehler in Abhangigkeit vom Zeitschritt, fur die Anfangswerte $\beta_0 = 0, 1; 0, 8; 0, 999$, siehe Abb. 28, 29 und 30.

Wie im Abschnitt 5 beschrieben, ist die SRKN_O4-Methode fur dieses System als PRK-Methode 3. Ordnung zu verstehen, und die Methode SRKN_O2 als PRK-Methode 2. Ordnung.

Es lasst sich zunachst anmerken, dass die Methoden 4. Ordnung bei einem Zeitschritt von $h = 10^{-4}$ eine hohe Genauigkeit erzielen: Der Energiefehler liegt fur $\beta = 0, 1$ in der Groenordnung von 10^{-18} , bei $\beta = 0, 8$ in der Groenordnung von 10^{-16} , und bei $\beta = 0, 999$ in der Groenordnung von 10^{-15} .

Auerdem ist klar zu erkennen, dass mit Annerung von β_0 an 1 die Fehler bei allen Methoden und Zeitschritten insgesamt groer werden. Von $\beta_0 = 0, 1$ zu $\beta_0 = 0, 999$ ist der Unterschied ungefahr durch einen Faktor von 1000 gegeben.

Interessant ist auch die Entwicklung der Methode SRKN_O4 mit steigendem Wert von β_0 : Fur die restlichen Methoden lasst sich eine Reihenfolge der Genauigkeit, von der ungenauesten zur genauesten, eindeutig angeben: Euler, EC, SRKN_O2, SPRK_O3, SPRK_O4,

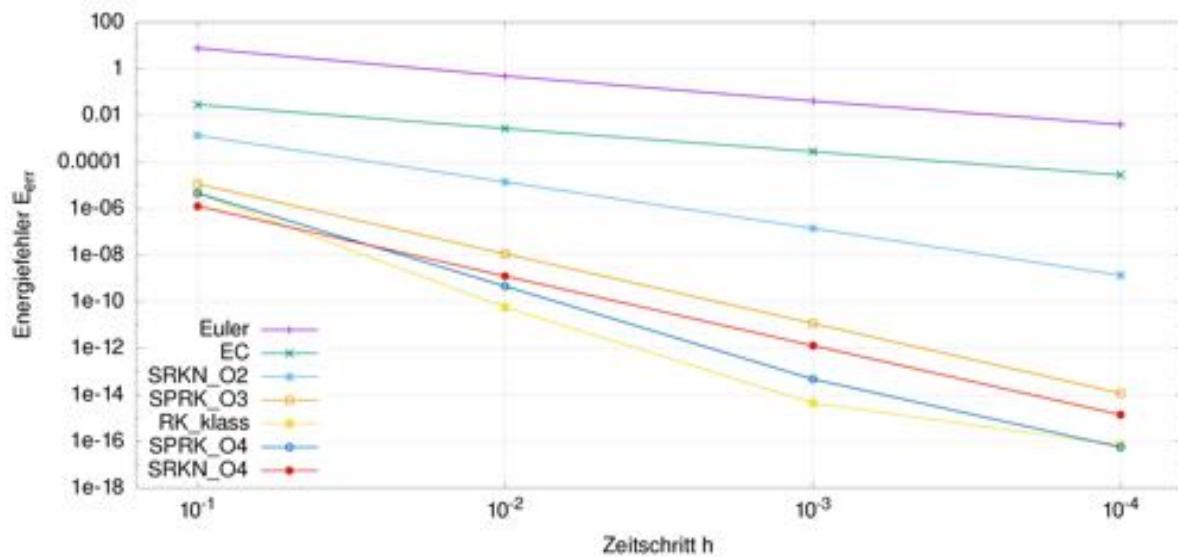


Abbildung 29: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,8$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

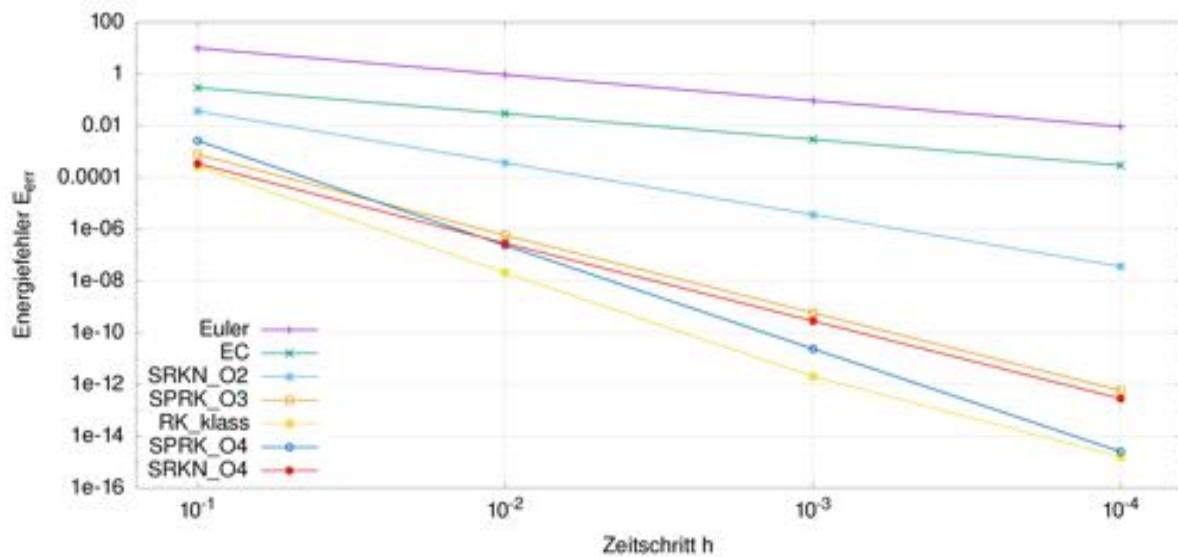


Abbildung 30: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,999$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

	Verhalten des Energiefehlers
EC	beschränkt
SRKN_O2	beschränkt
SPRK_O3	beschränkt
SRKN_O4	beschränkt
RK_klass	Drift
SPRK_O4	beschränkt

Tabelle 5: Zeitliches Verhalten der Energiefehler E_{err} bei der Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators.

und `RK_klass`. Die Energiefehler der Methode `SRKN_O4` befinden sich jedoch im Fall $\beta_0 = 0$ im Bereich der Methoden 4. Ordnung, bei $\beta_0 = 0,8$ und noch deutlicher bei $\beta_0 = 0,999$ liegen die Fehler näher an denen von `SPRK_O3`, die andere Methode 3. Ordnung.

In Tabelle 5 wird das zeitliche Verhalten der Energiefehler für alle Methoden bis auf die Euler-Methode beschrieben. (vgl. Anhang 3. Die Euler-Methode wurde deshalb weggelassen, weil sie zu große Fehler aufweist.) Mit dem Verhalten „beschränkt“ und „Drift“ ist dasselbe gemeint wie im Abschnitt 7.1 bei dem klassischen harmonischen Oszillator beschrieben. Bei den Simulationen, wo der Fehler sich im Bereich der Größenordnung 10^{-16} bewegt, waren auch stochastische Effekte zu sehen. Diese wurden ignoriert, und es wurden nur die Simulationen der gleichen Methode mit höherem Zeitschritt beachtet, wo die Effekte der Rundungsfehler keine Rolle mehr spielen.

Bei fast allen Verfahren wurde bei jedem Wert von β_0 dasselbe zeitliche Verhalten des Energiefehlers beobachtet, wie in Tabelle 5 angegeben. Einzige Ausnahme ist die Methode `RK_klass`: Hier wurde für alle Simulationen bis auf bei $\beta_0 = 0,999$ ein Drift beobachtet. Bei $\beta_0 = 0,999$ wurde kein Drift beobachtet, daher wurde die Messung mit einem größerem Zeitintervall von $t \in [0; 10^4]$ wiederholt. Dort war der Drift deutlich zu erkennen. (Die zugehörigen Abbildungen sind am Ende vom Anhang 3 zu finden.)

Diskussion

Die Energiefehler sind bei dieser Simulation sehr gering, die numerischen Methoden funktionieren gut. Die Methode `RK_klass` liefert hier meistens die besten Ergebnisse.

Der theoretische Sachverhalt, dass die Methode `SRKN_O4` wegen der Form der Hamiltonfunktion (siehe (60) und (115)) eine Methode 3. Ordnung ist, lässt sich auch in der Numerik beobachten: Bei kleinen Geschwindigkeiten, wo die nicht-relativistische Näherung des harmonischen Oszillators verwendet werden kann, hat diese Methode Energiefehler wie die anderen Methoden 4. Ordnung, bei den größeren Geschwindigkeiten sind die Energiefehler in der Nähe der Energiefehler von `SPRK_O3`, der anderen Methode 3. Ordnung, angesiedelt.

Die beobachteten zeitlichen Verläufe des Energiefehlers bestätigen die Hypothese, dass die symplektischen Methoden einen beschränkten Energiefehler besitzen, bei den nicht-symplektischen Methoden jedoch der Energiefehler mit der Zeit zunimmt. Diese Aussage bedarf jedoch weiterer Überprüfung an anderen hamiltonschen Systemen.

Es kann vermutet werden, dass die *qp*-Fehler dieser Simulation klein sind, oder zumindest, dass der *qp*-Fehler nicht aufgrund eines Fehlers in der Periode steigt, wie bei dem mathematischen Pendel: Denn obwohl die Periode mit der Energie steigt, führen kleine Energiefehler nur zu einer kleinen, kaum merklichen Änderung der Periode. An Gleichung

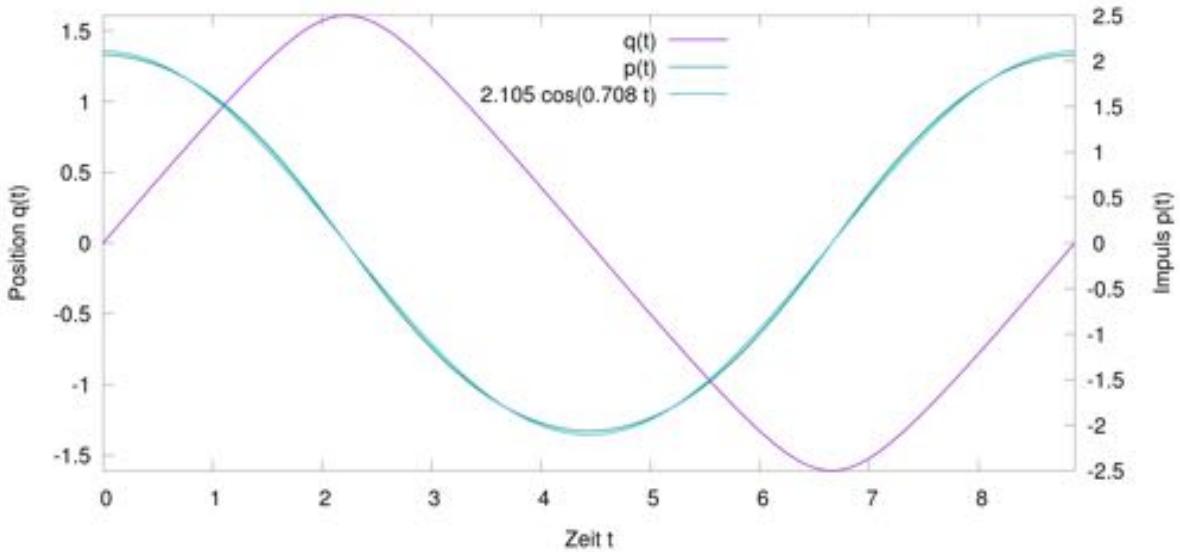


Abbildung 31: Position und Impuls des relativistischen Oszillators für eine Schwingungsperiode, $q_0 = 0, \beta_0 = 0,9$.

(115) und (117) ist nämlich zu erkennen, dass für $\beta_0 \rightarrow 1$ die Energie $H(q_0 = 0, p_0(\beta_0)) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta_0^2}} \rightarrow \infty$ geht, und die Periode ändert sich erst deutlich bei Werten von β_0 nahe an 1, d.h. bei sehr großen Energien.

Da die Simulation für kurze Zeitspannen nur kleine Fehler hat und genau ist, kann die gleichzeitige Betrachtung von $q(t)$ und $p(t)$ für große Geschwindigkeiten interessant sein, um das Verhalten des relativistischen Oszillators besser zu verstehen. Für die Anfangswerte $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,9; 0,99$ und $0,999$ wurde jeweils die Position und der Impuls in einer Abbildung dargestellt (siehe Abb. 31, 32 und 33). Für die Darstellung der Position wurde das exakte, mit Mathematica ermittelte Resultat verwendet, für den Impuls wurden die Werte der Simulation mit SPRK_O4 mit Zeitschritt $h = 10^{-4}$ genommen. Der Verlauf von $q(t)$ ist bei diesen hohen Geschwindigkeiten sehr weit von einem Sinus-förmigen Verlauf entfernt, wie auch schon im Abschnitt 6.3 festgestellt. Der Verlauf des Impulses hingegen sieht einer Kosinusfunktion sehr ähnlich, ein Fit mit einer solchen Funktion (mit gnuplot) zeigt, dass doch eine Abweichung von der Kosinusfunktion vorliegt.

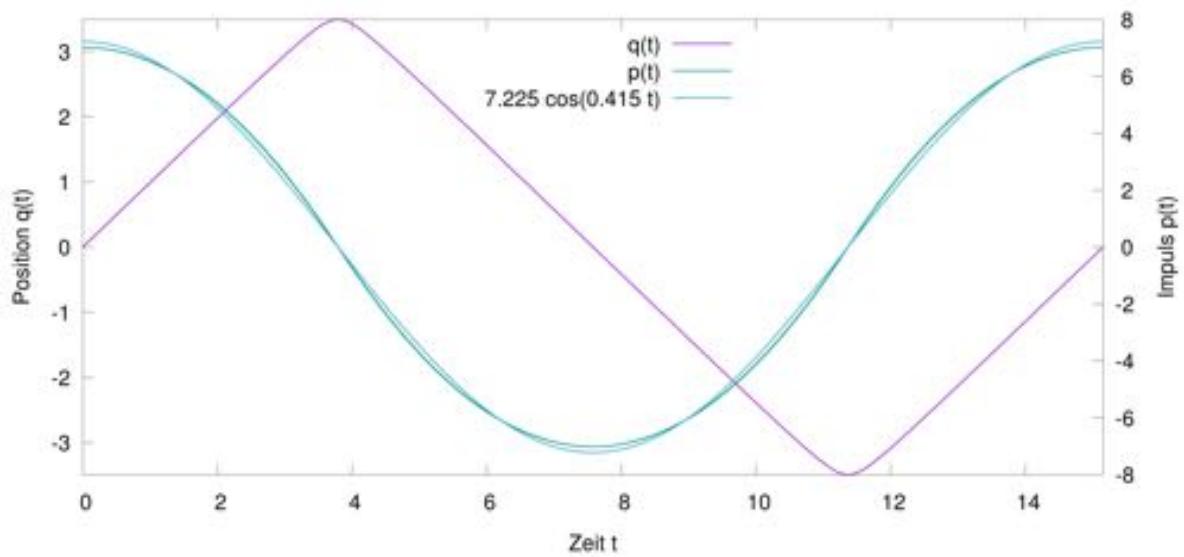


Abbildung 32: Position und Impuls des relativistischen Oszillators für eine Schwingungsperiode, $q_0 = 0, \beta_0 = 0, 99$.

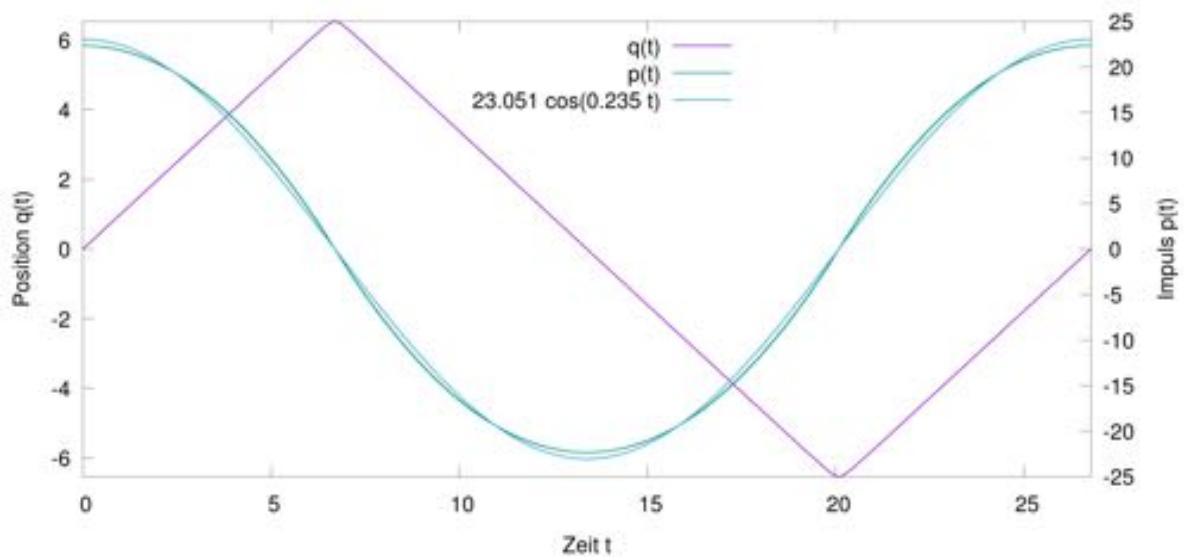


Abbildung 33: Position und Impuls des relativistischen Oszillators für eine Schwingungsperiode, $q_0 = 0, \beta_0 = 0, 999$.

8 Zusammenfassung und Diskussion

Es wurden insgesamt sieben Verfahren anhand von drei Systemen getestet, diese sieben Verfahren besitzen Ordnungen von 1 bis 4, und es gab insgesamt zwei nicht-symplektische und fünf symplektische Verfahren.

Wie zu erwarten war lieferten die Verfahren höherer Ordnung in den allermeisten Fällen genauere Ergebnisse. Im Allgemeinen führte ein kleinerer Zeitschritt zu genaueren Ergebnissen, in der Praxis gibt es jedoch einen maximalen sinnvollen Zeitschritt, der durch die Maschinen-Rechengenauigkeit bedingt wird. Auch andere Rahmenbedingungen wie Rechenzeit und Speicherplatz spielen hier eine Rolle.

Die Methoden 1. Ordnung waren im Grunde zu ungenau, interessanterweise war aber die symplektische Methode EC durchweg besser als die nicht-symplektische Euler-Methode. Die nicht-symplektische klassische Runge-Kutta-Methode RK_klass hat sich gegenüber den symplektischen Methoden 4. Ordnung bewährt, sie lieferte ungefähr ebenso genaue Ergebnisse wie die symplektischen Methoden.

Die Stärke der symplektischen Methoden wird am zeitlichen Verlauf des Energiefeliers bei der Simulation des nicht-relativistischen und relativistischen (an)harmonischen Oszillators deutlich: Hier bleibt der Energiefehler beschränkt. Ob diese Eigenschaft auch allgemeiner für andere Systeme gilt, bleibt noch zu überprüfen, oder theoretisch zu untersuchen. Bei dem mathematischen Pendel konnte dies aufgrund von Effekten durch Rundungsfehler nicht definitiv festgestellt werden. Hier wäre eine Wiederholung der Simulationen mit einer höheren Rechengenauigkeit notwendig.

Besonders die Simulationen mit dem mathematischen Pendel und die Betrachtung der Fehler des Ortes und Impulses haben gezeigt, dass ein sehr kleiner Fehler in der Energie nicht automatisch eine genaue Simulation des Systems bedeutet. Hier, und auch bei dem harmonischen Oszillator, wurde ein mit der Zeit zunehmender Fehler im Ort und Impuls festgestellt. Diese sind vermutlich hauptsächlich, wenn nicht ausschließlich, auf den Fehler in der Zeitparametrisierung der numerischen Lösung im Vergleich zur exakten Lösung zurückzuführen, d.h. die Trajektorie im Phasenraum wird zu langsam oder zu schnell durchlaufen. Eine Simulation mit einem sehr kleinen Energiefehler eignet sich daher vermutlich nur zur Darstellung der Energiefläche im Phasenraum, aber die berechneten Zeiten sind nicht sehr aussagekräftig.

Die Simulation mit dem mathematischen Pendel hat zudem gezeigt, dass die Numerik in der Nähe von kritischen Bereichen besonders schwierig ist, gerade hier sind zuverlässige Verfahren, von höherer Ordnung und mit einer höheren Rechengenauigkeit als die hier behandelten, wichtig.

In dieser Arbeit wurden nur eindimensionale Systeme betrachtet, dessen Lösungen periodisch sind. Um allgemeingültige Aussagen über symplektische Integrationsverfahren machen zu können, wäre es sinnvoll auch nicht-periodische Systeme zu betrachten, sowie Systeme höherer Dimension. Es wäre auch interessant, die exakte Lösung des relativistischen Oszillators mit der numerischen zu vergleichen. Diese ist zwar nur in der Form der Umkehrfunktion $t(q)$ bekannt, mit etwas gedanklichem und numerischem Aufwand sollte es jedoch auch möglich sein, Algorithmen zur Berechnung von $q(t)$ und $p(t)$ mit beliebiger Genauigkeit zu entwickeln.

Auch interessant wäre die Betrachtung von Methoden höherer Ordnung. Hierzu müsste aber ein Datentyp mit höherer Rechengenauigkeit und mehr Speicherplatz sichergestellt werden.

Erst nach einer solchen, umfangreicheren Untersuchung kann besser eingeschätzt werden,

wie zuverlässig die Simulation mit symplektischen Methoden von Systemen ist, bei denen die exakte Lösung nicht bekannt ist.

Literatur

- [1] ARNOLD, V.I.: *Mathematical Methods of Classical Mechanics.* Springer-Verlag, 1978.
- [2] BJÖRCK, A. und G. DAHLQUIST: *Numerische Methoden.* Oldenburg Verlag, München, 1972.
- [3] BUTCHER, J.C.: *A history of Runge-Kutta methods.* Applied Numerical Mathematics, 20(3):247 – 260, 1996.
- [4] CANDY, J. und W. ROZMUS: *A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions.* Journal of Computational Physics, 92(1):230 – 256, 1991.
- [5] CROMER, A.: *Stable solutions using the Euler approximation.* American Journal of Physics, 49(5):455–459, 1981.
- [6] FLIESSBACH, T.: *Mechanik.* Spektrum Akademischer Verlag, 6. Auflage, 2009.
- [7] FOREST, E. und R.D. RUTH: *Fourth-order symplectic integration.* Physica D: Non-linear Phenomena, 43(1):105 – 117, 1990.
- [8] INSTITUT FÜR TECHNISCHE UND NUMERISCHE MATHEMATIK, UNIVERSITÄT STUTTGART. Available at http://www.itm.uni-stuttgart.de/courses/nichtlineare_schwingungen/bilder/phase_portrait.png, Accessed July 08, 2017.
- [9] MOREAU, W., R. EASTHER und R. NEUTZE: *Relativistic (an)harmonic oscillator.* American Journal of Physics, 62(6):531–535, 1994.
- [10] OCHS, K.: *A comprehensive analytical solution of the nonlinear pendulum.* European Journal of Physics, 32(2):479, 2011.
- [11] OTT, E.: *Chaos in Dynamical Systems.* Cambridge University Press, 2. Auflage, 2002.
- [12] REBHAN, E.: *Theoretische Physik: Relativitätstheorie und Kosmologie.* Springer-Verlag, 2012.
- [13] RUTH, R.D.: *A Canonical Integration Technique.* IEEE Transactions on Nuclear Science, 30(4):2669–2671, Aug 1983.
- [14] SANZ-SERNA, J.M. und M.P. CALVO: *Numerical Hamiltonian Problems.* Chapman & Hall, 1. Auflage, 1994.
- [15] TIMBERLAKE, T. und J.E. HASBUN: *Computation in classical mechanics.* American Journal of Physics, 76(4):334–339, 2008.
- [16] TOXVAERD, S., O.J. HEILMANN und J.C. DYRE: *Energy conservation in molecular dynamics simulations of classical systems.* The Journal of Chemical Physics, 136(22):224106, 2012.

Anhang 1

Abbildungen zur Tabelle 1 (Klassischer harmonischer Oszillator)

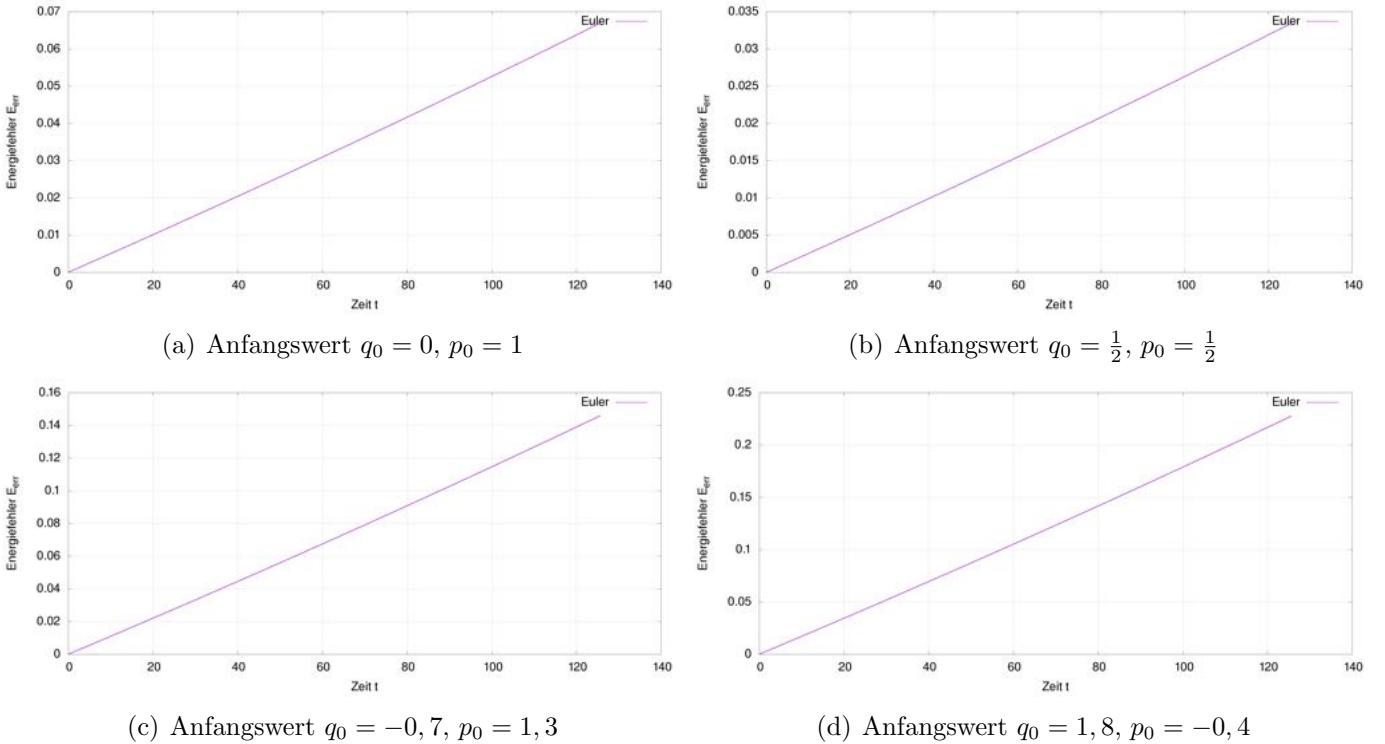


Abbildung 1: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: Euler.

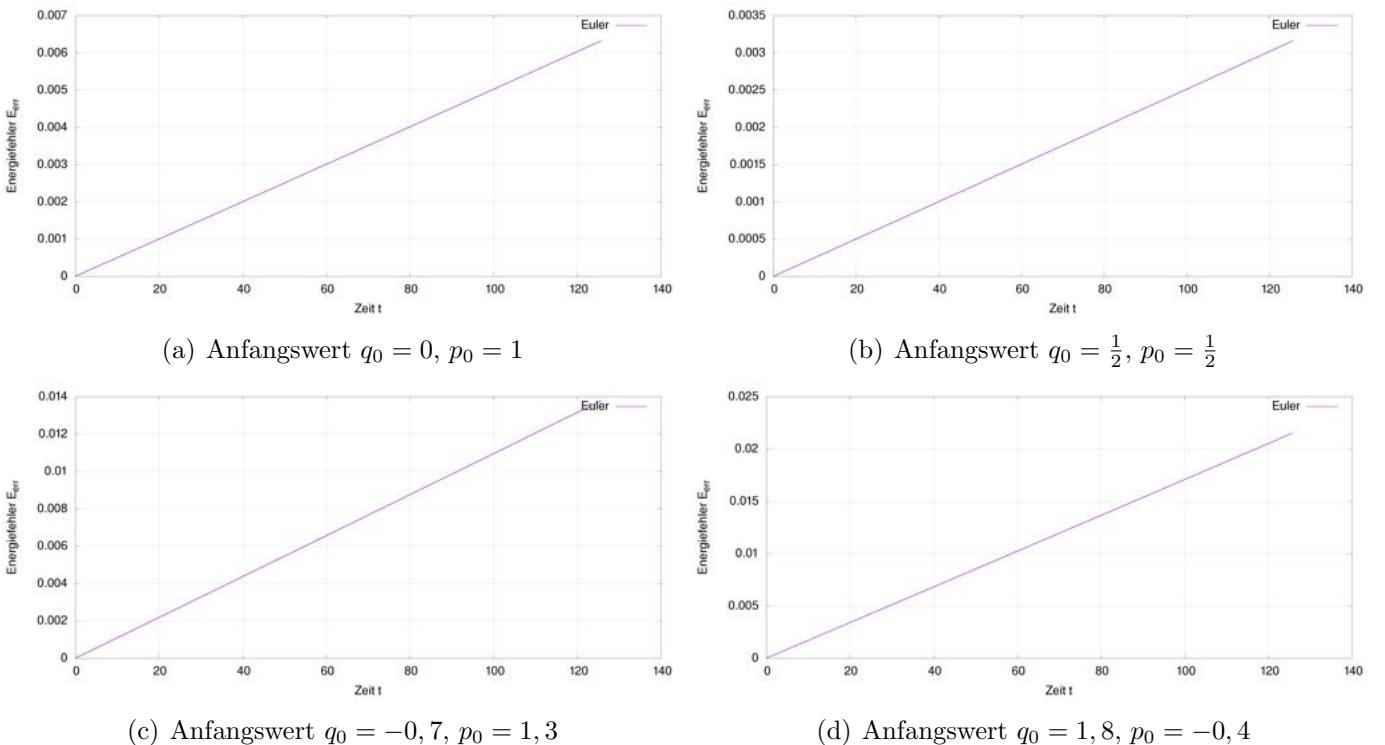


Abbildung 2: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: Euler.

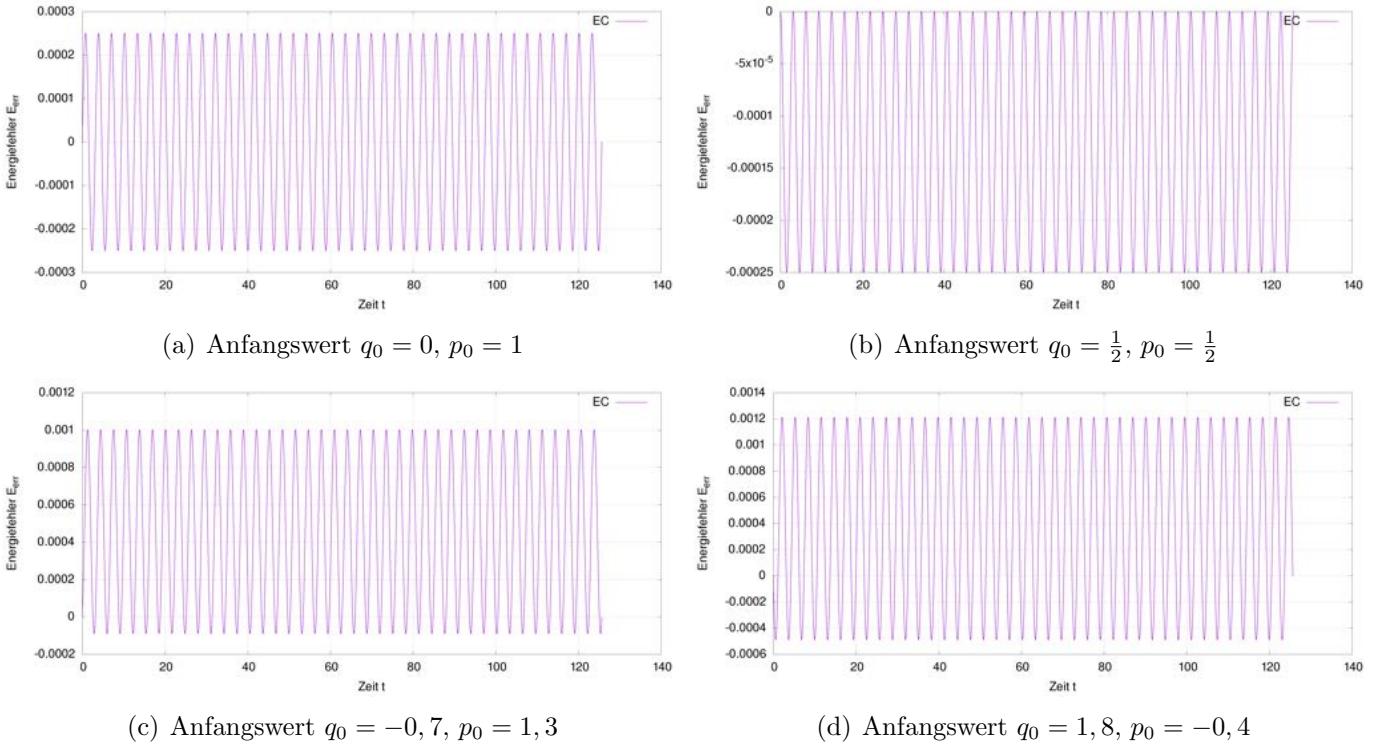


Abbildung 3: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: EC.

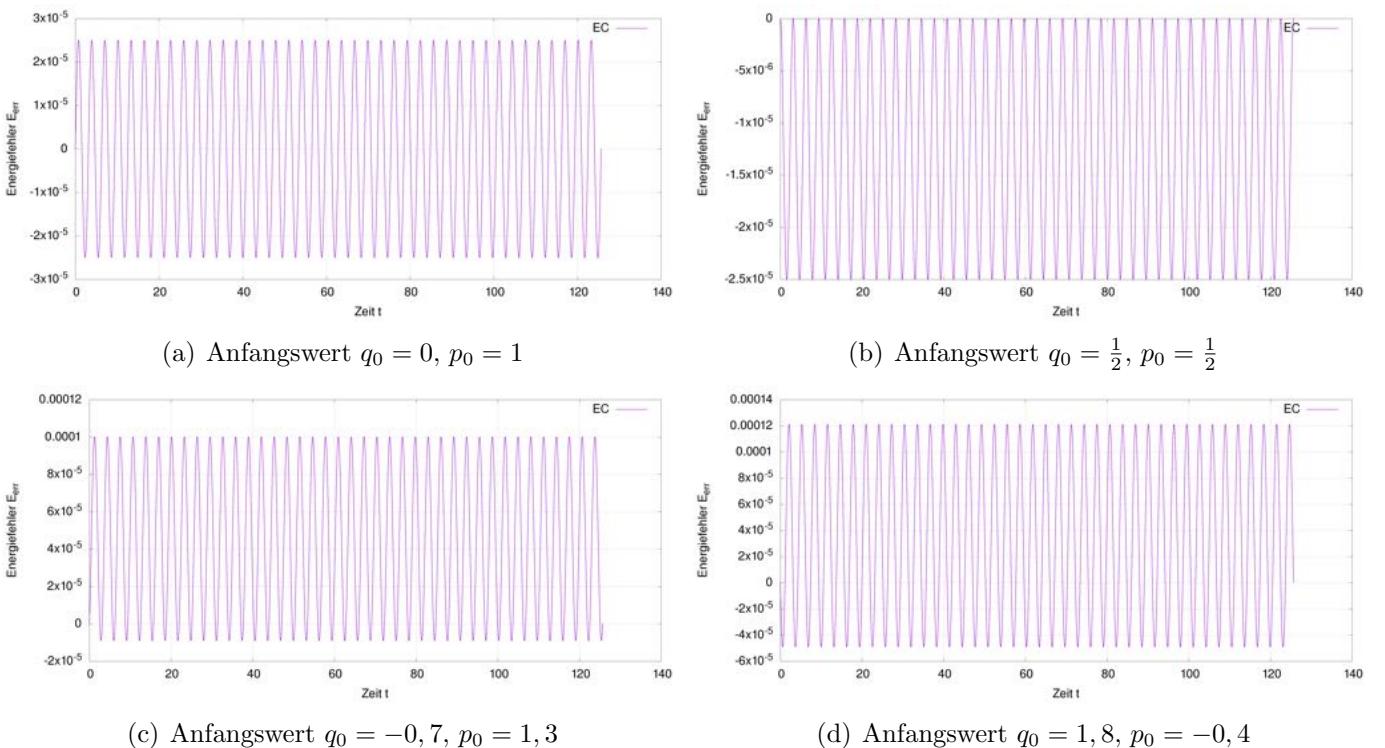


Abbildung 4: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: EC.

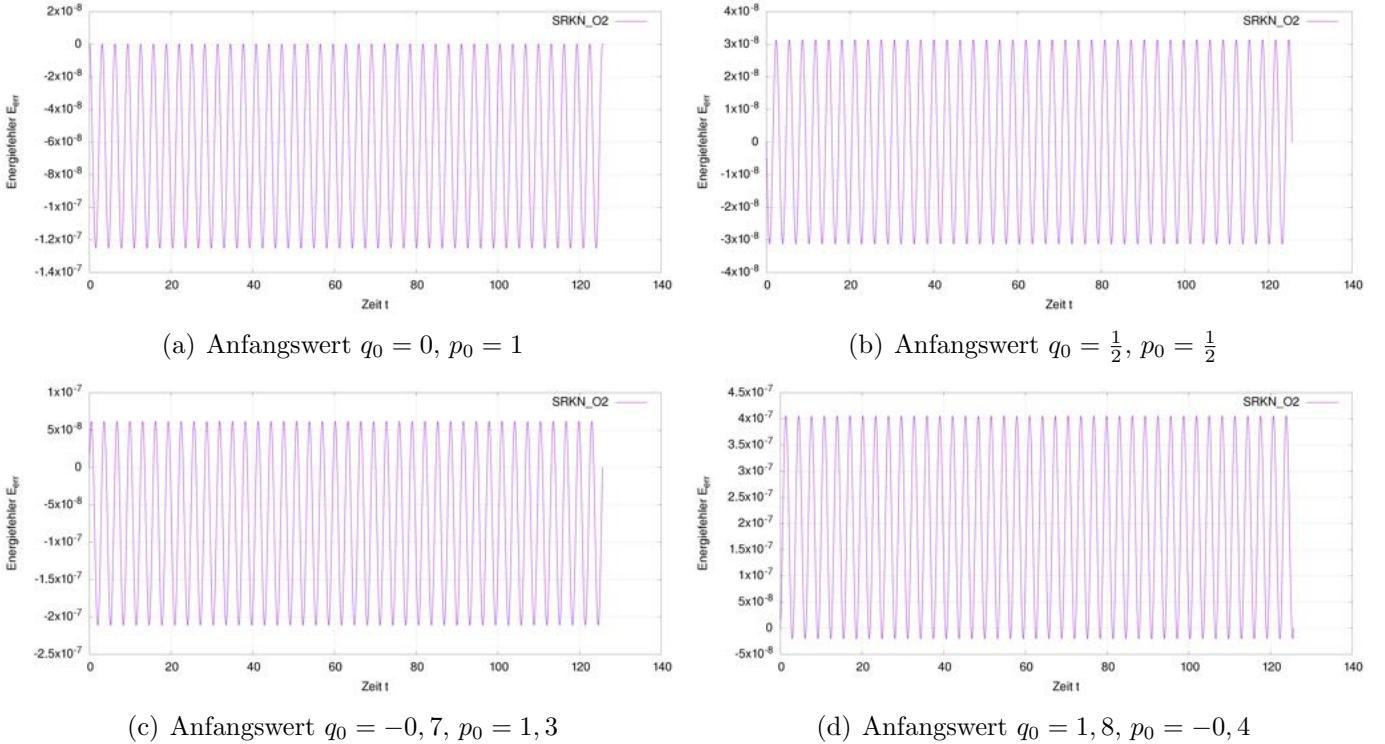


Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SRKN_O2.

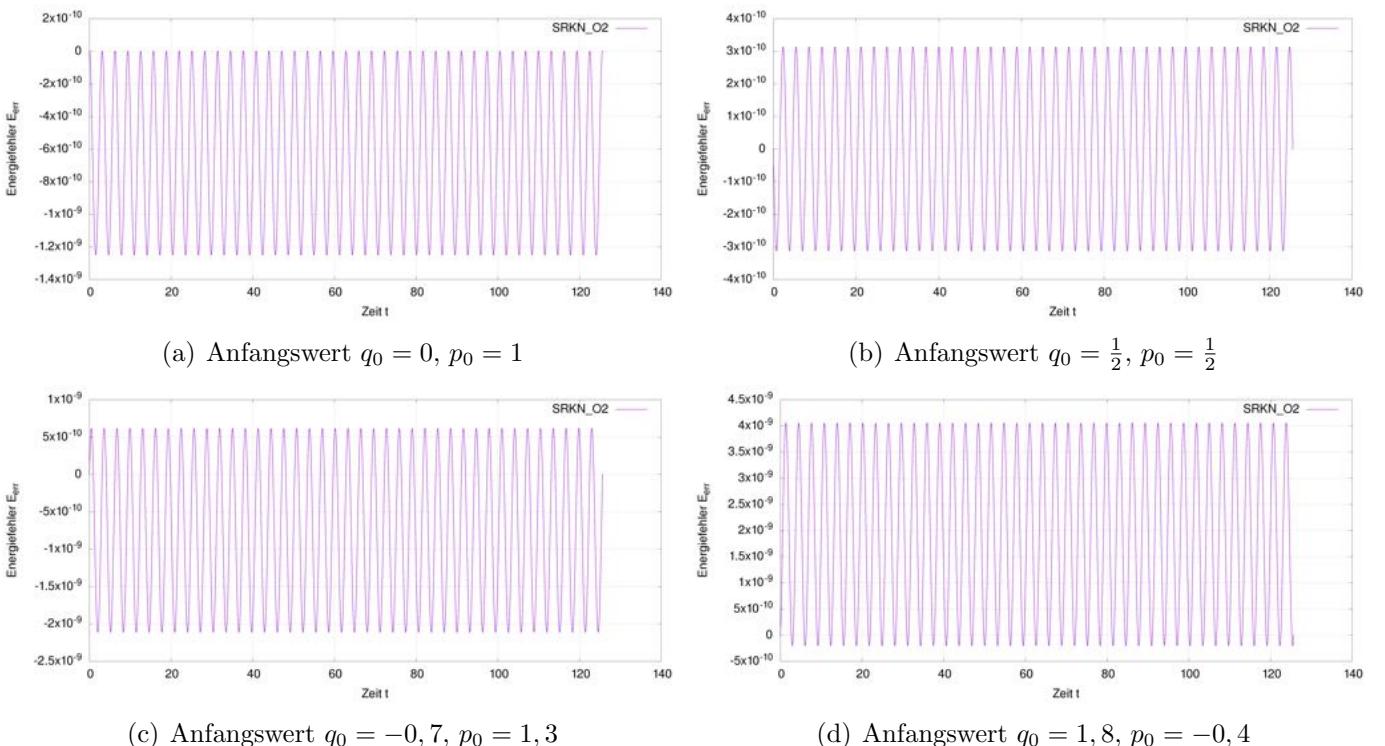


Abbildung 6: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O2.

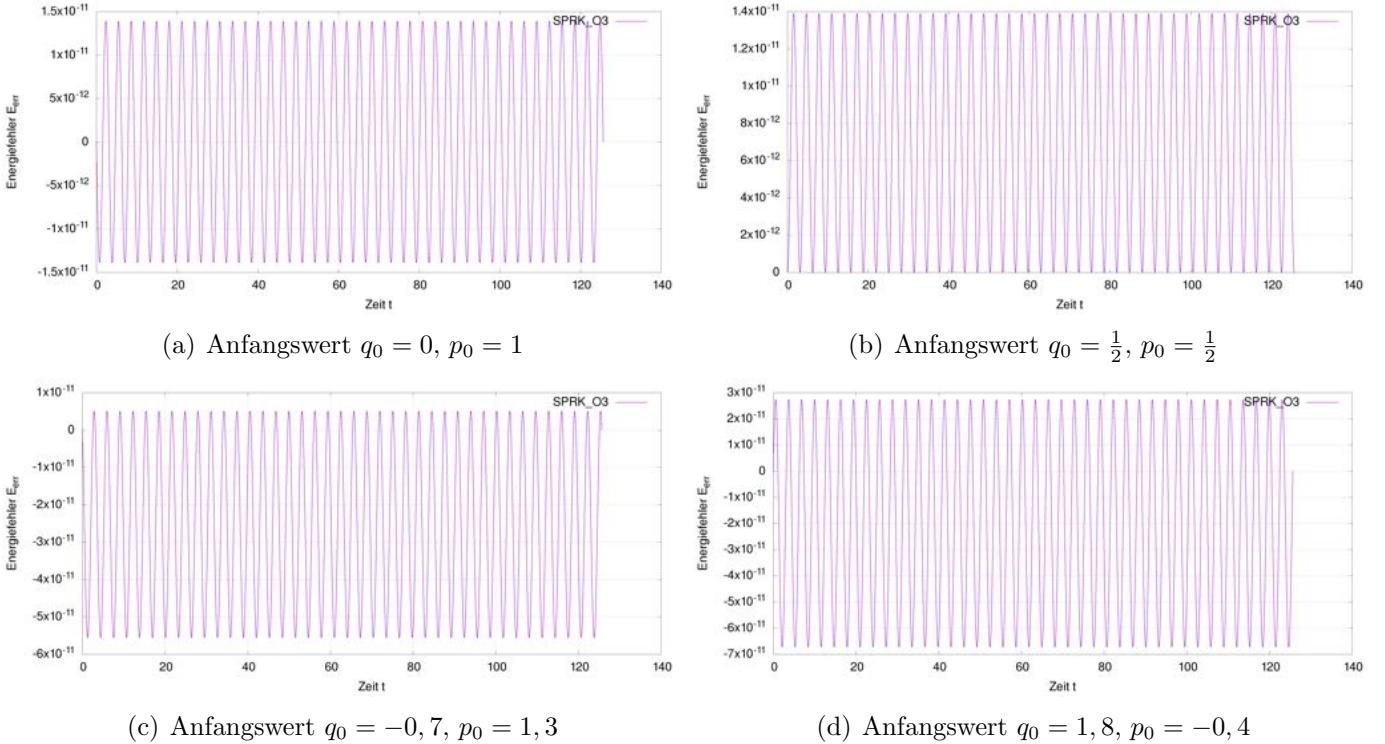


Abbildung 7: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SPRK_O3.

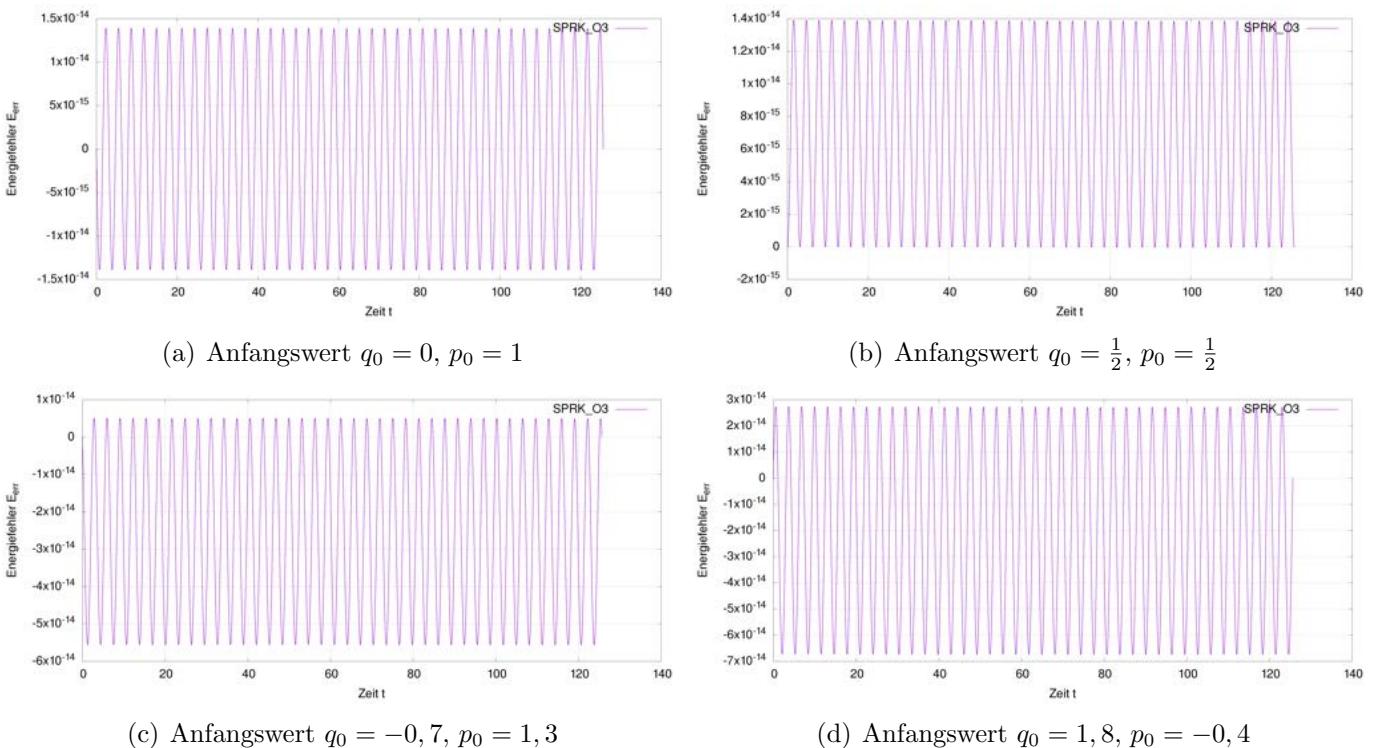


Abbildung 8: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O3.

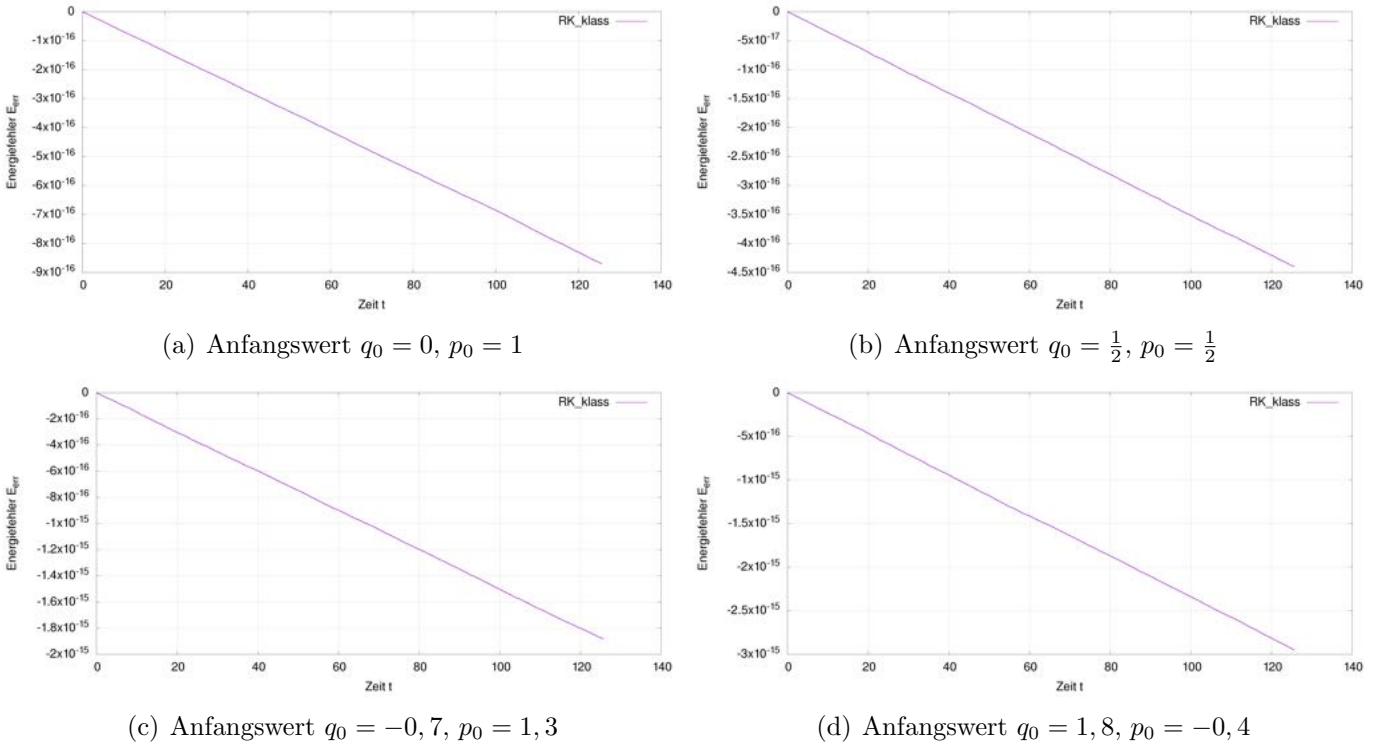


Abbildung 9: Zeitlicher Verlauf des Energiefchers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: RK_klass.

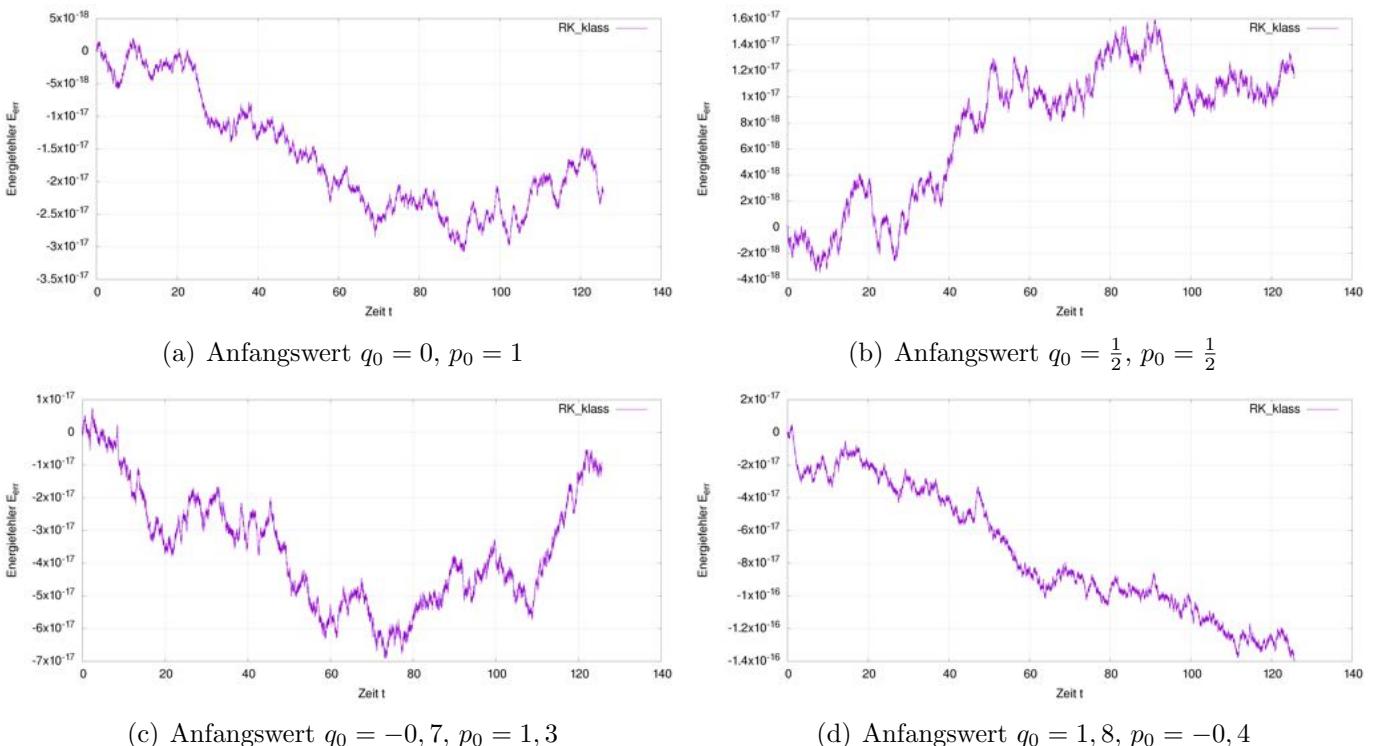


Abbildung 10: Zeitlicher Verlauf des Energiefchers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: RK_klass.

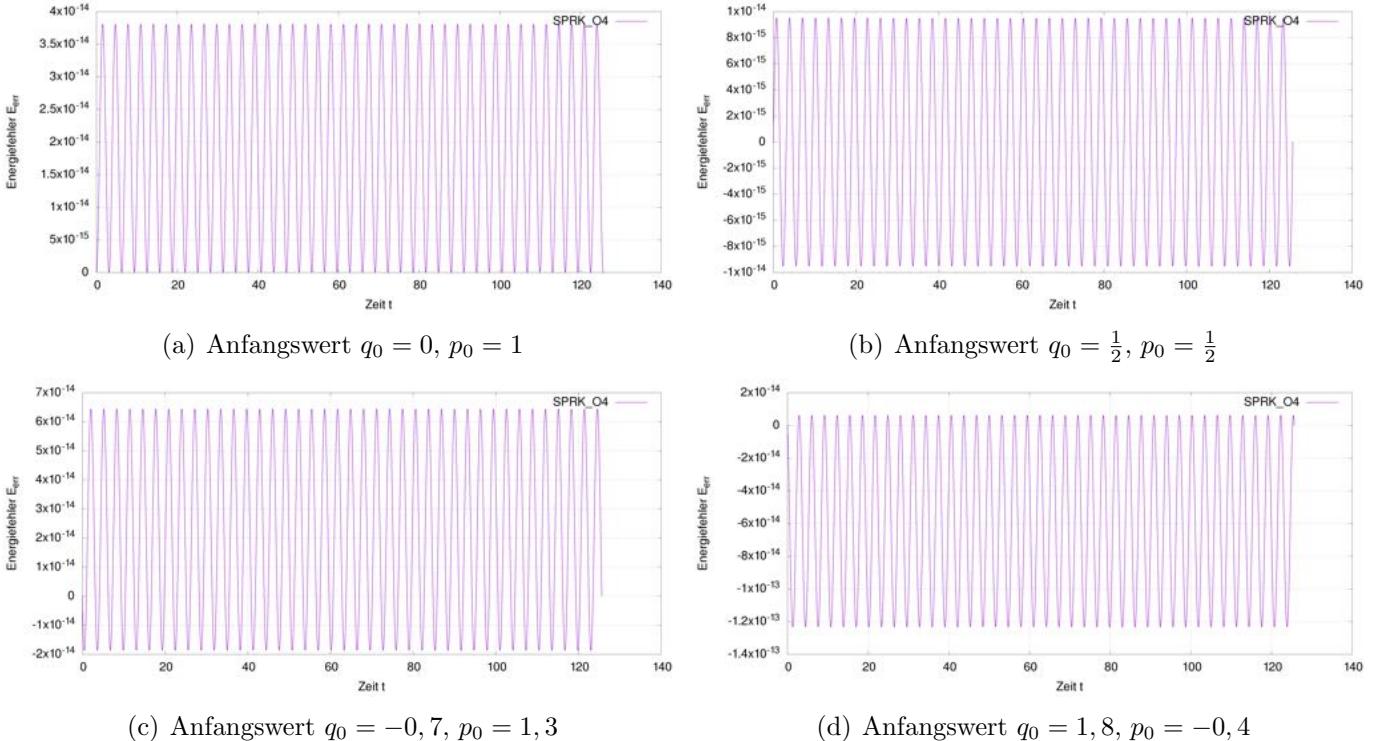


Abbildung 11: Zeitlicher Verlauf des Energiefilters für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SPRK_O4.

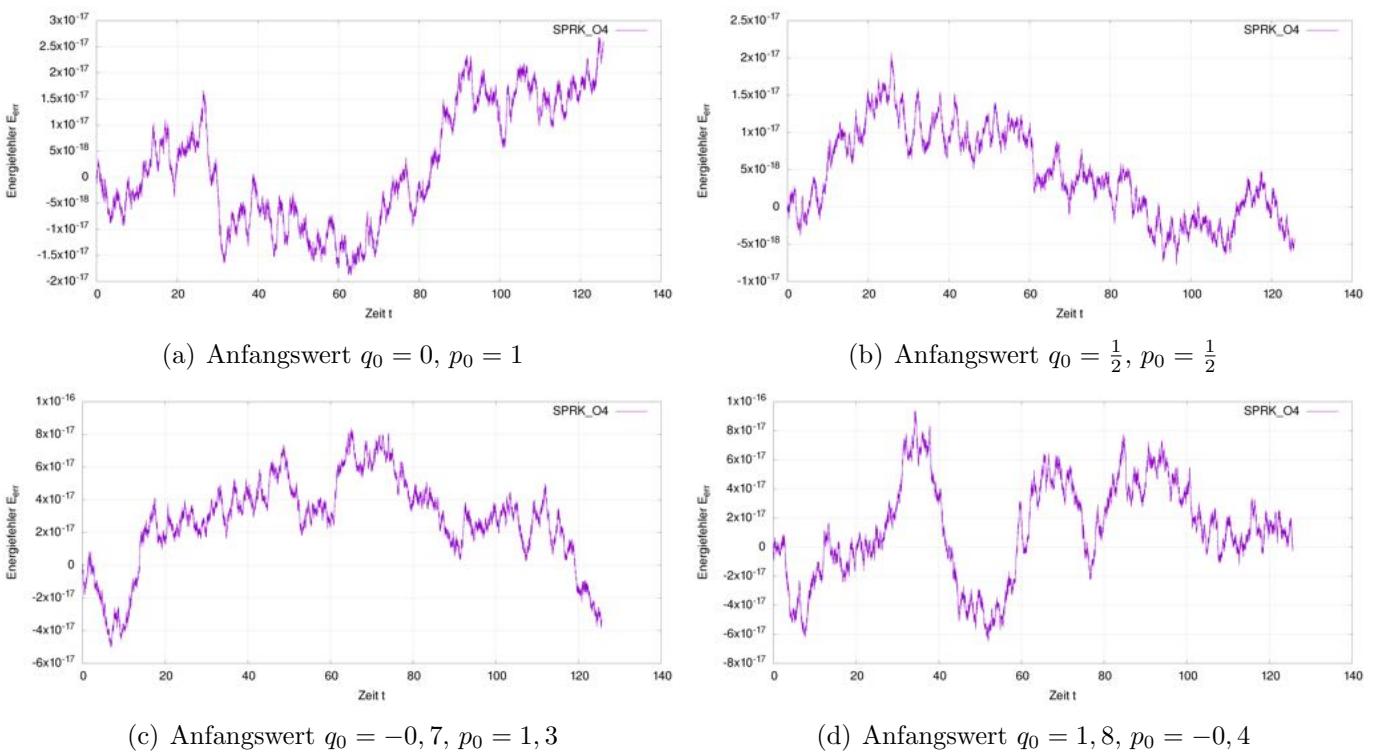


Abbildung 12: Zeitlicher Verlauf des Energiefilters für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O4.

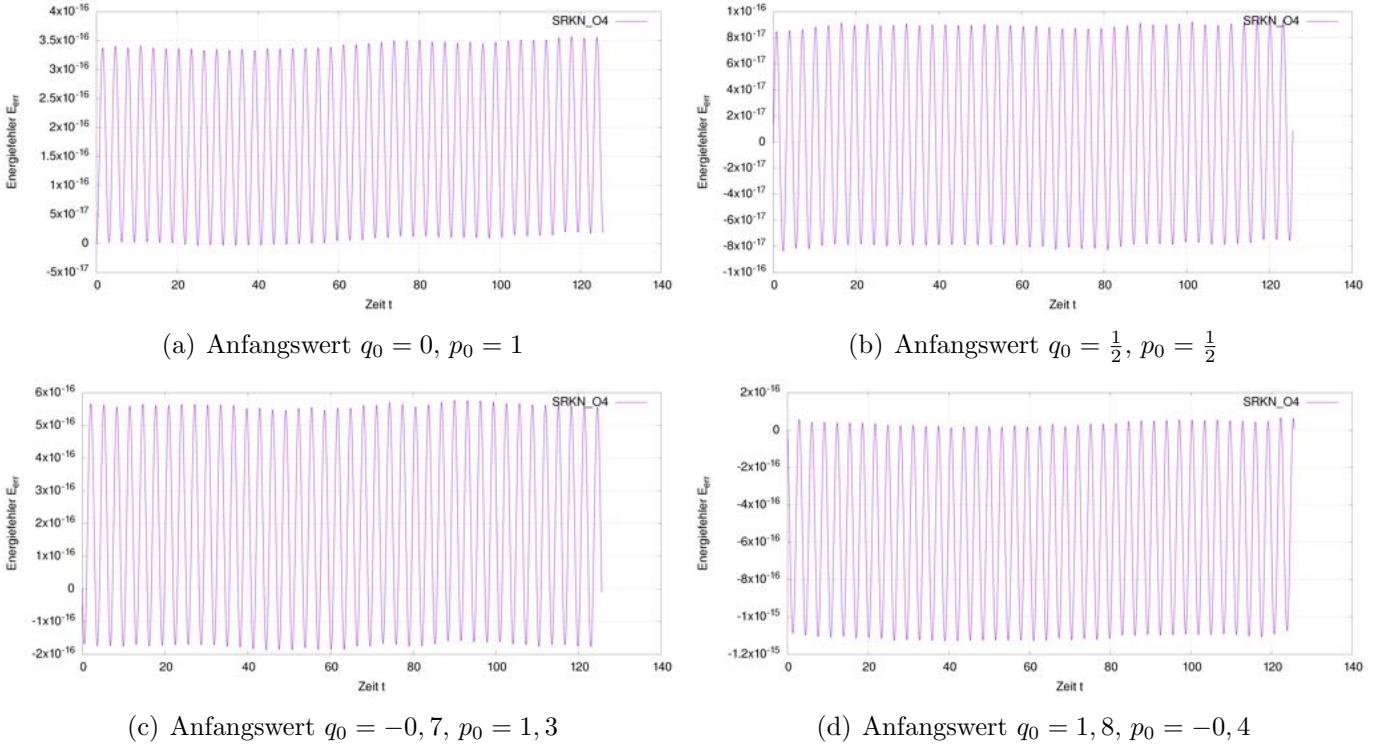


Abbildung 13: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SRKN_O4.

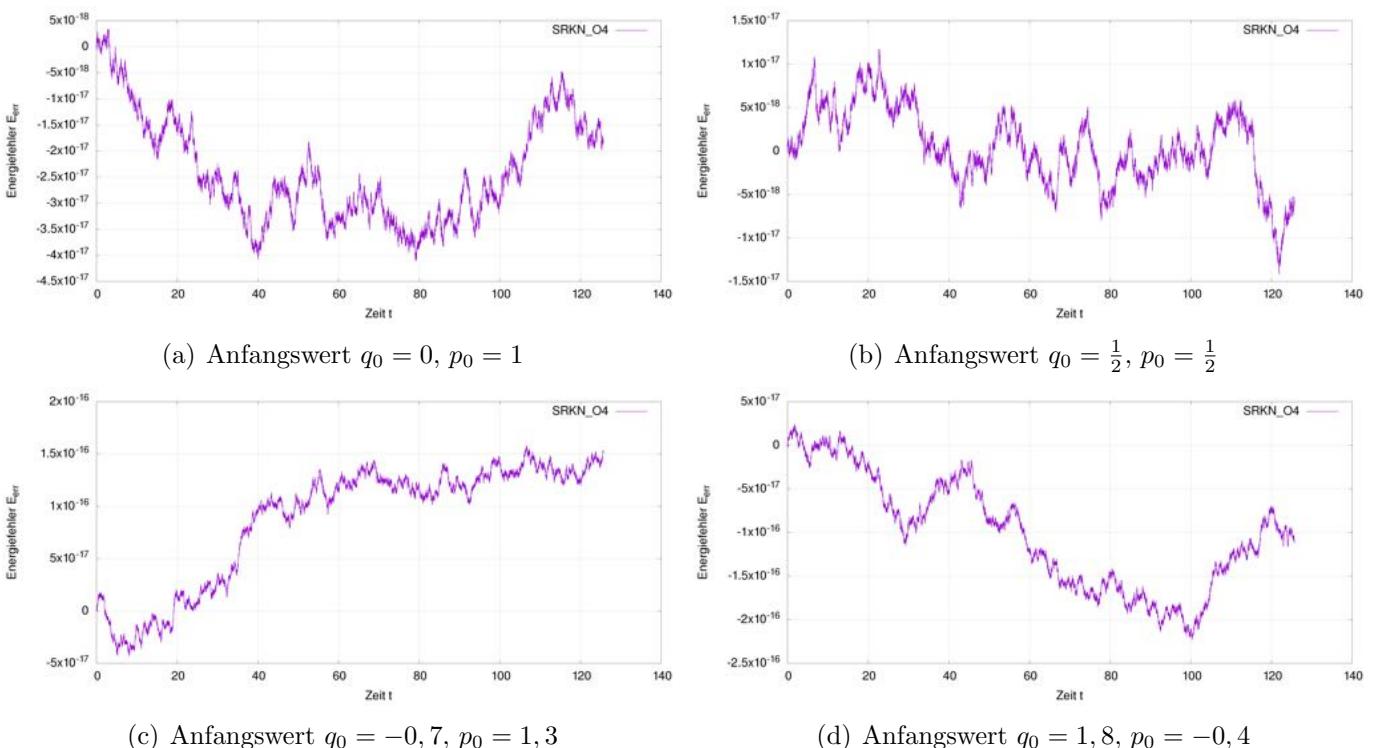


Abbildung 14: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O4.

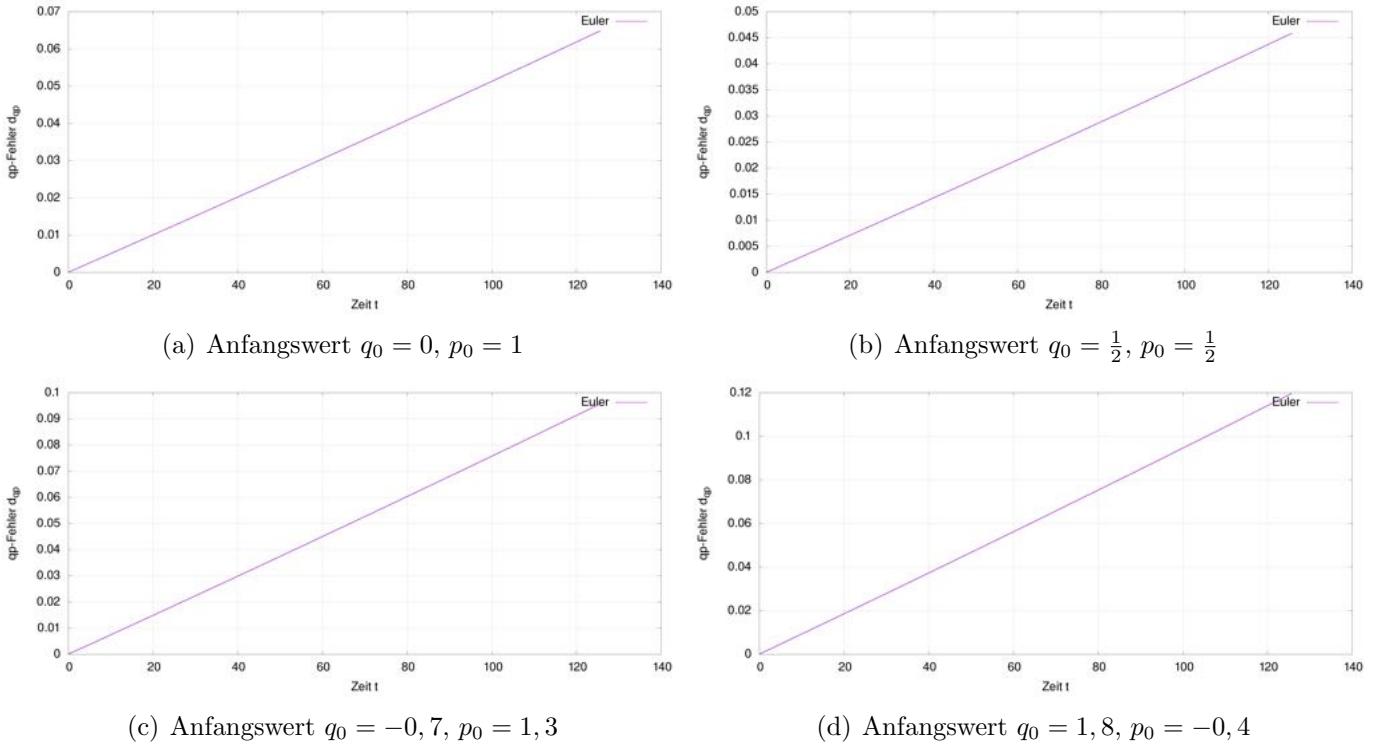


Abbildung 15: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: Euler.

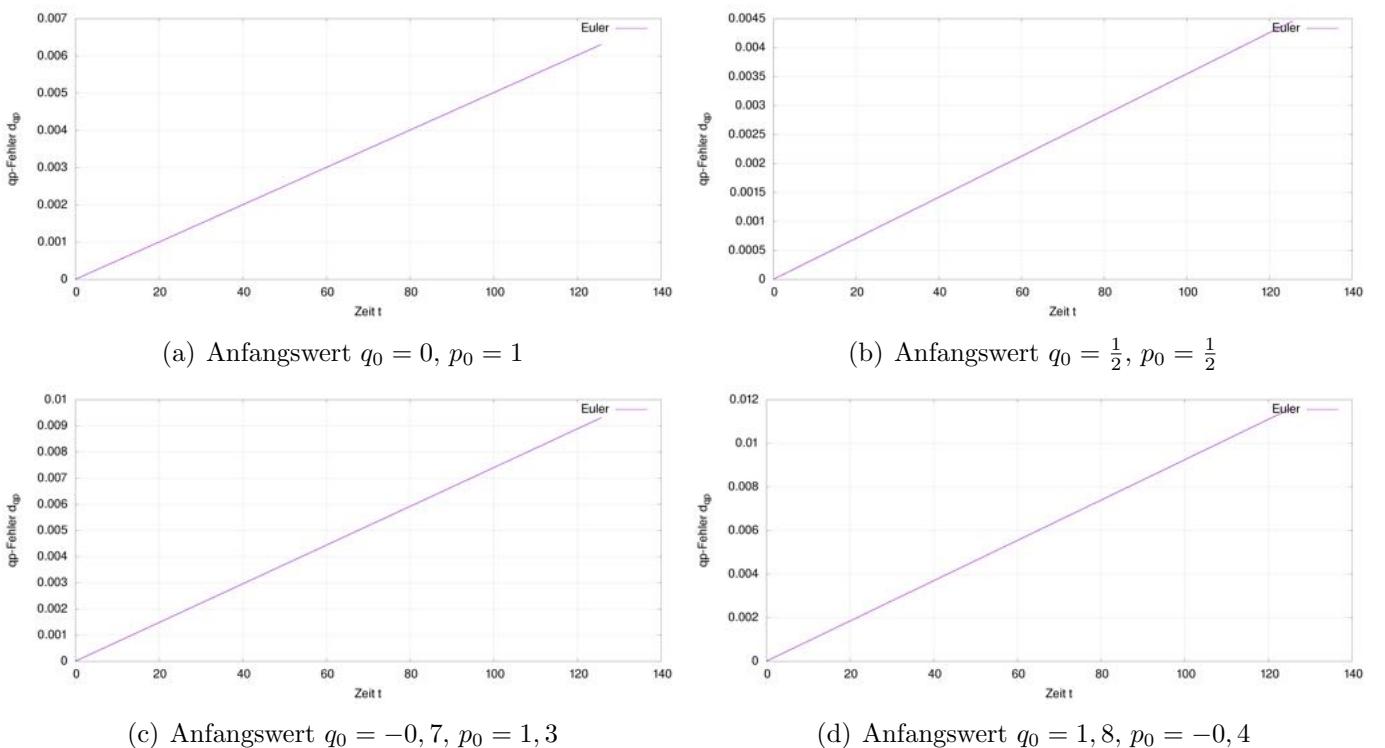


Abbildung 16: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: Euler.

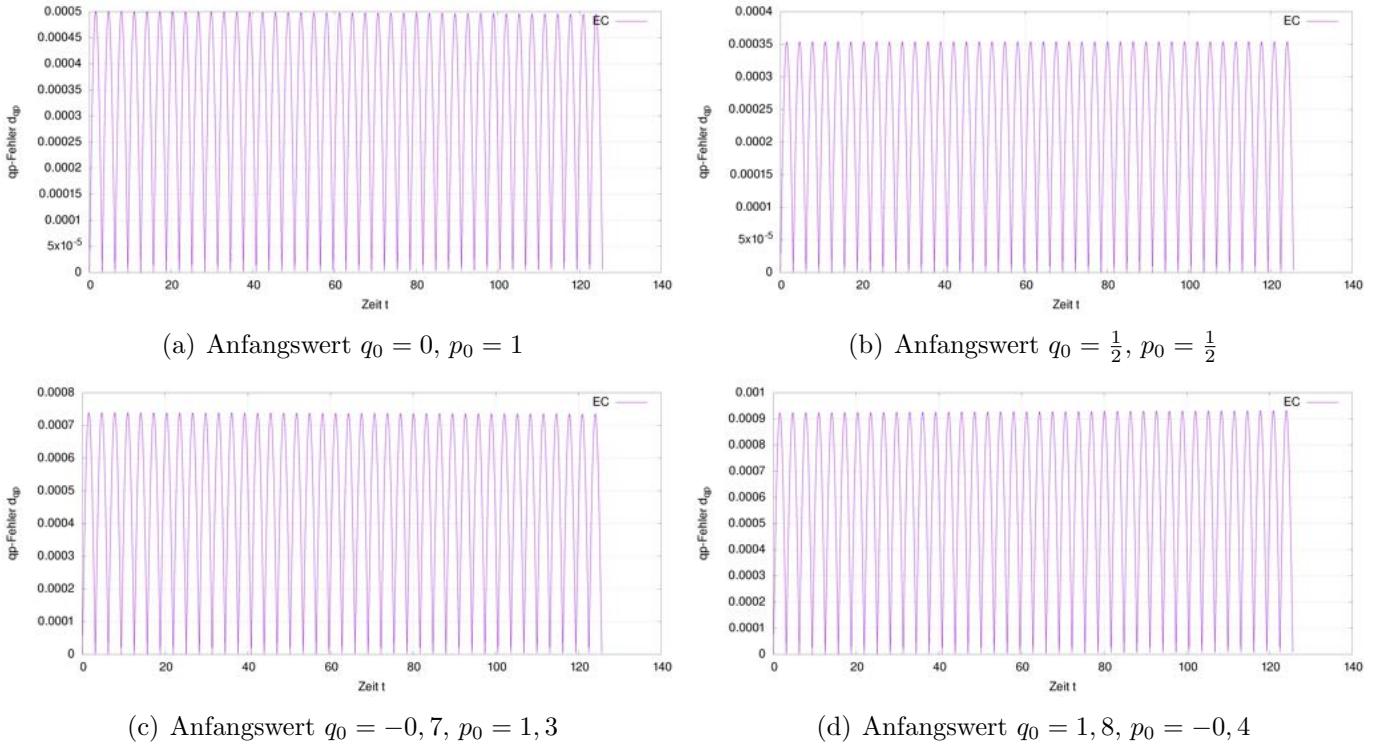


Abbildung 17: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: EC.

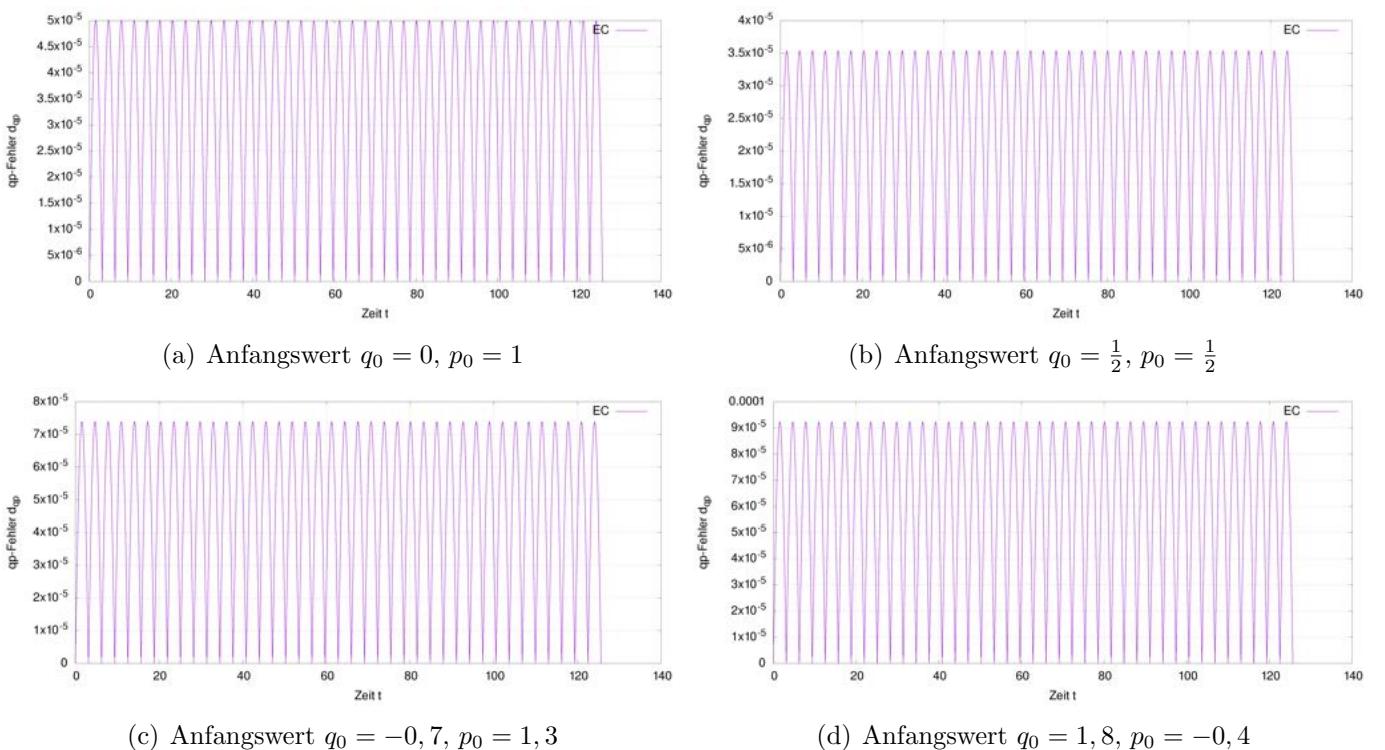


Abbildung 18: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: EC.

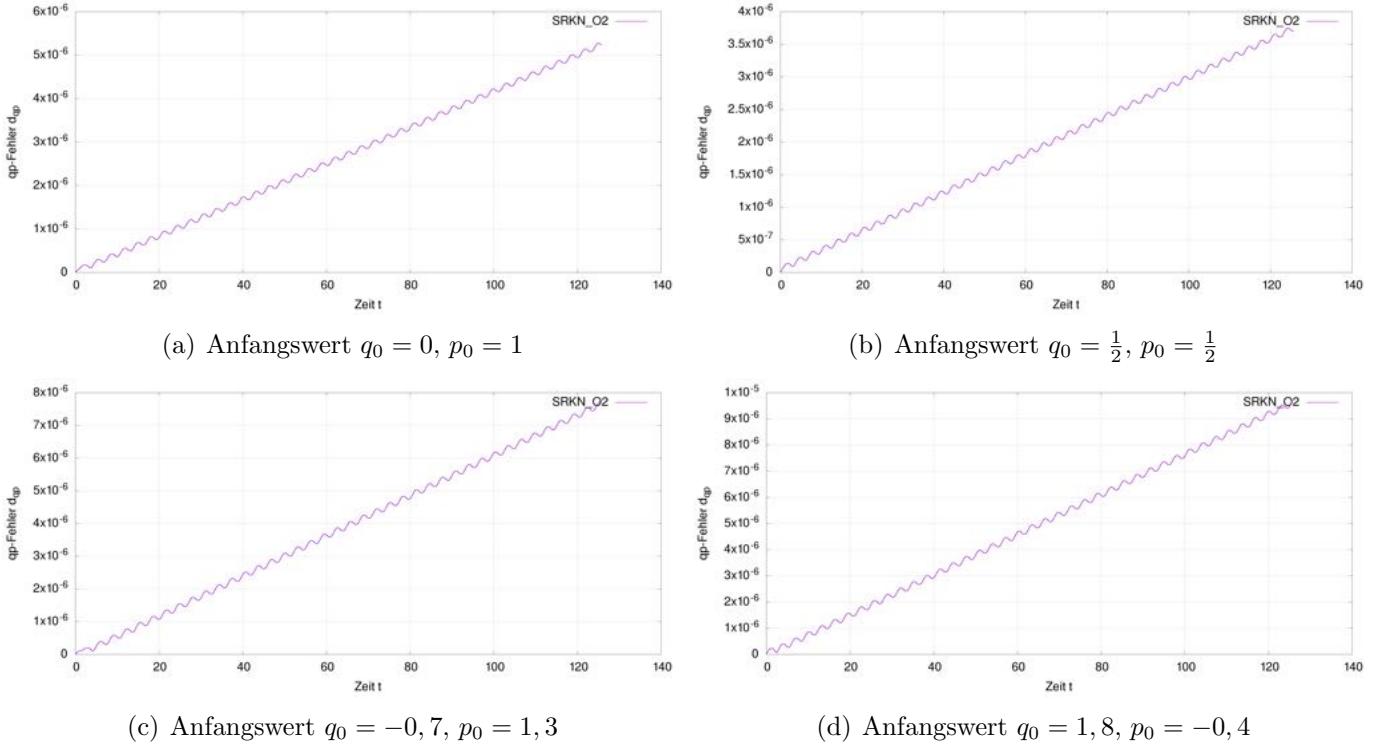


Abbildung 19: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SRKN_O2.

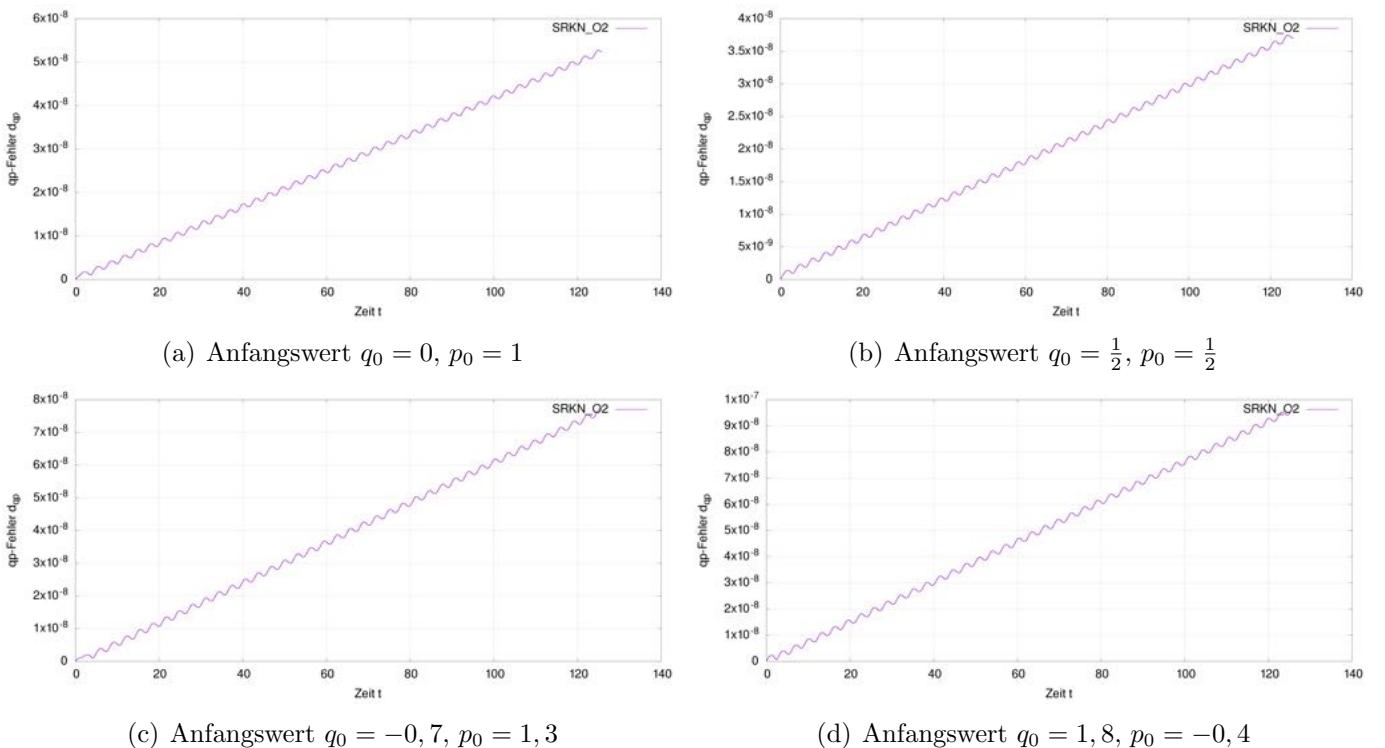


Abbildung 20: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O2.

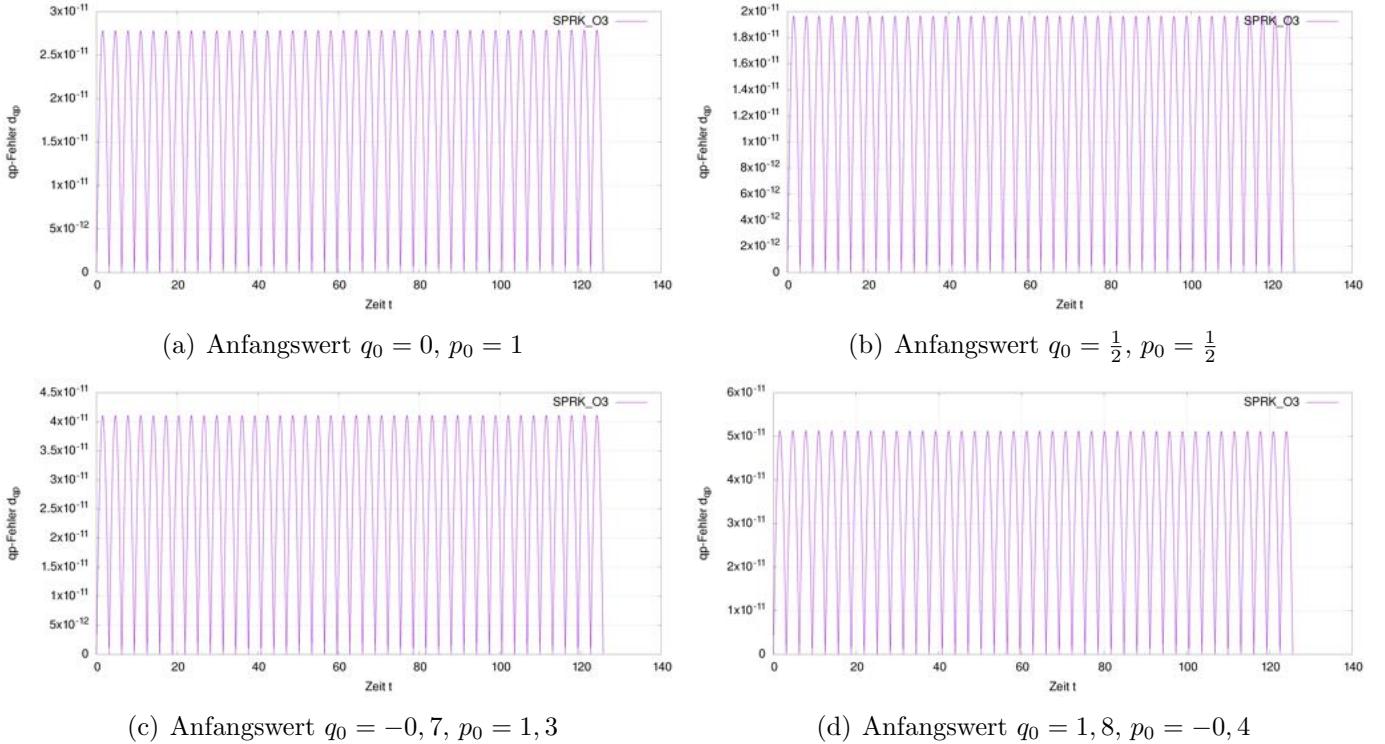


Abbildung 21: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SPRK_O3.

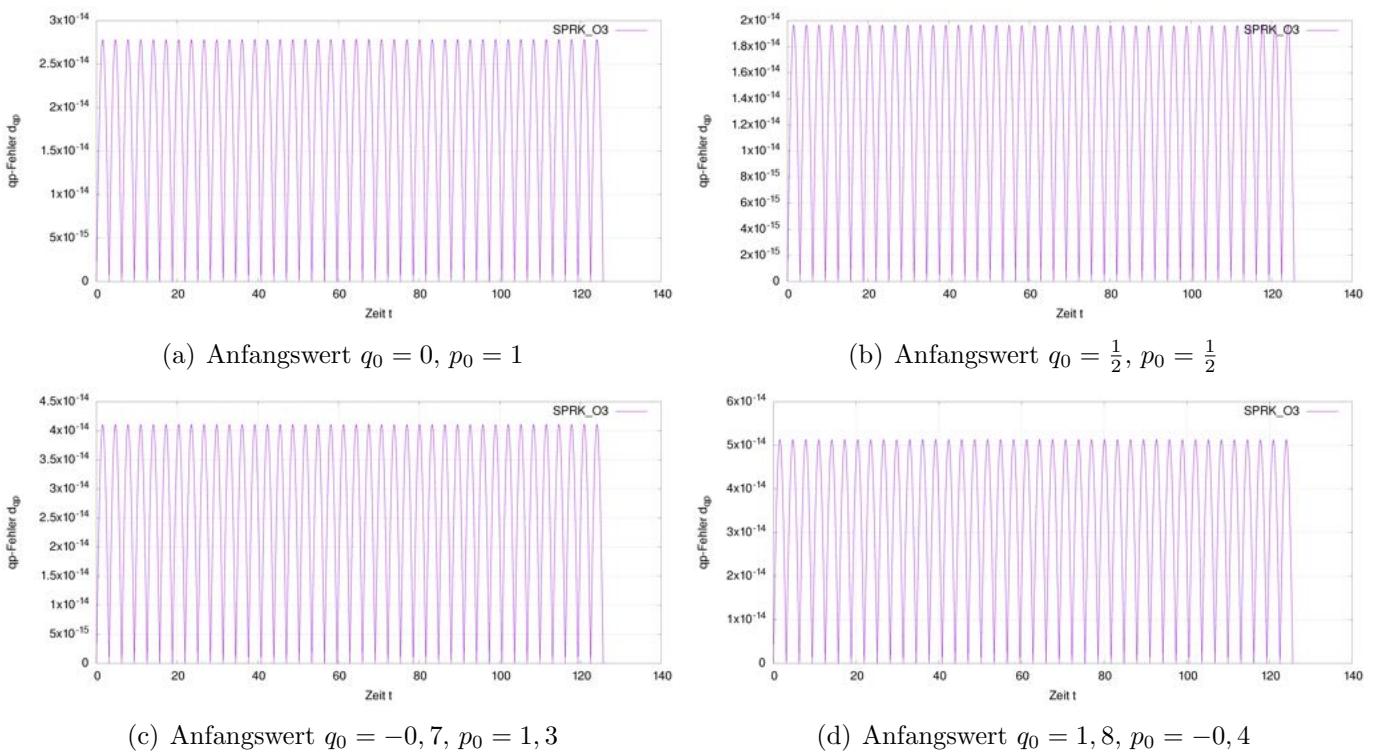


Abbildung 22: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O3.

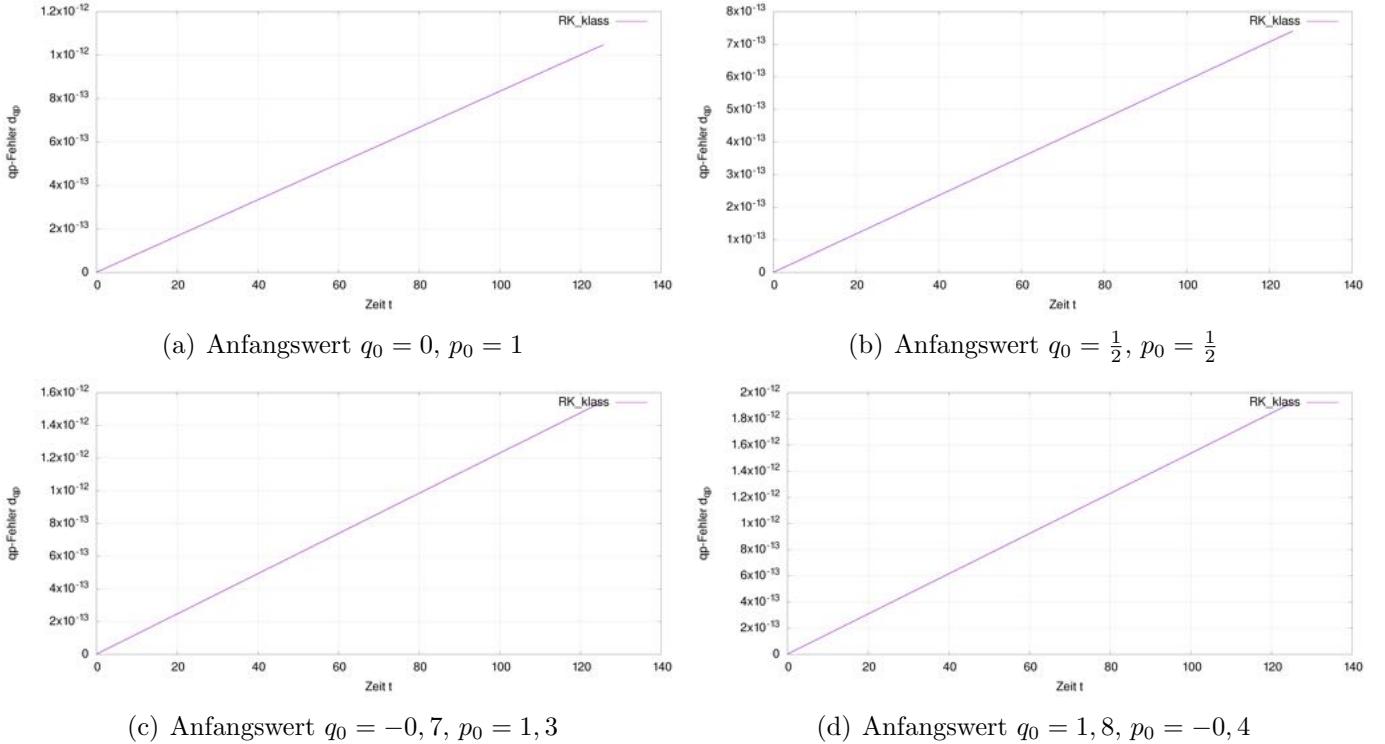


Abbildung 23: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: RK_klass.

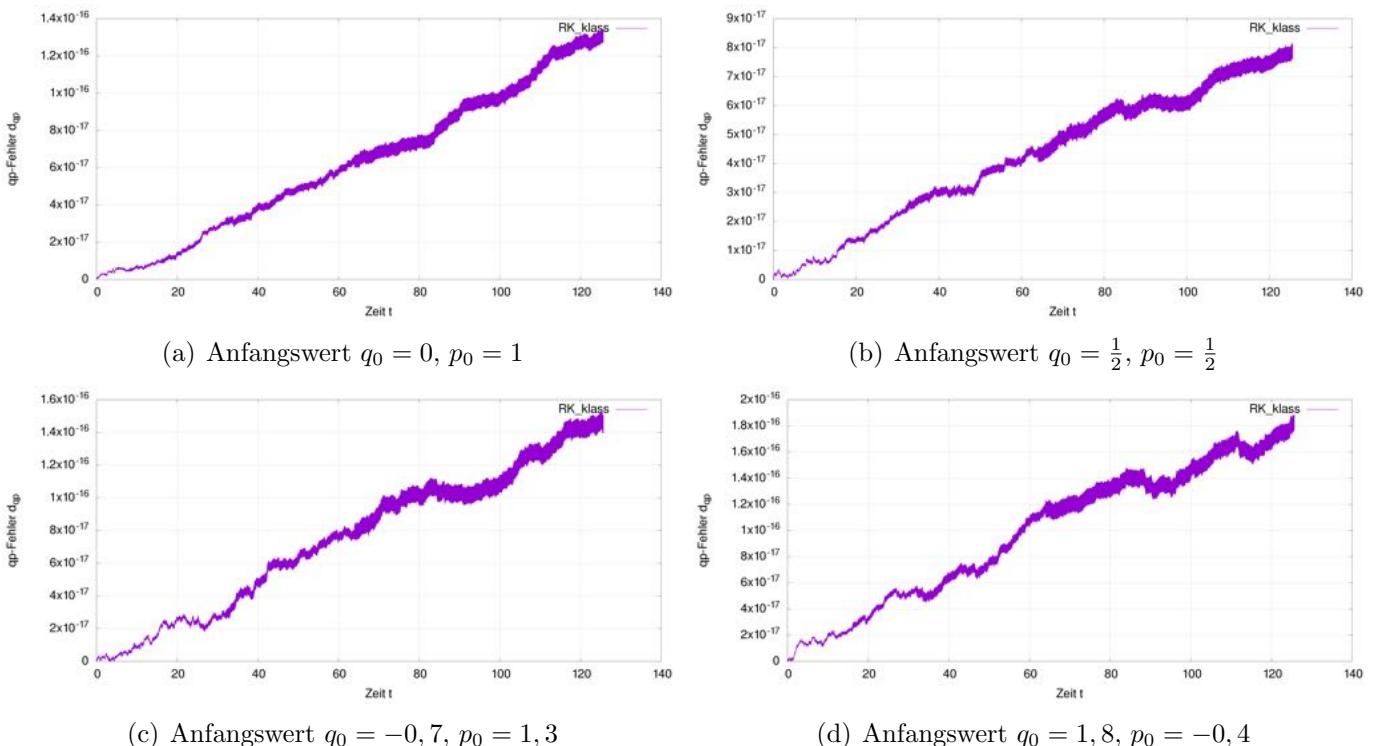


Abbildung 24: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: RK_klass.

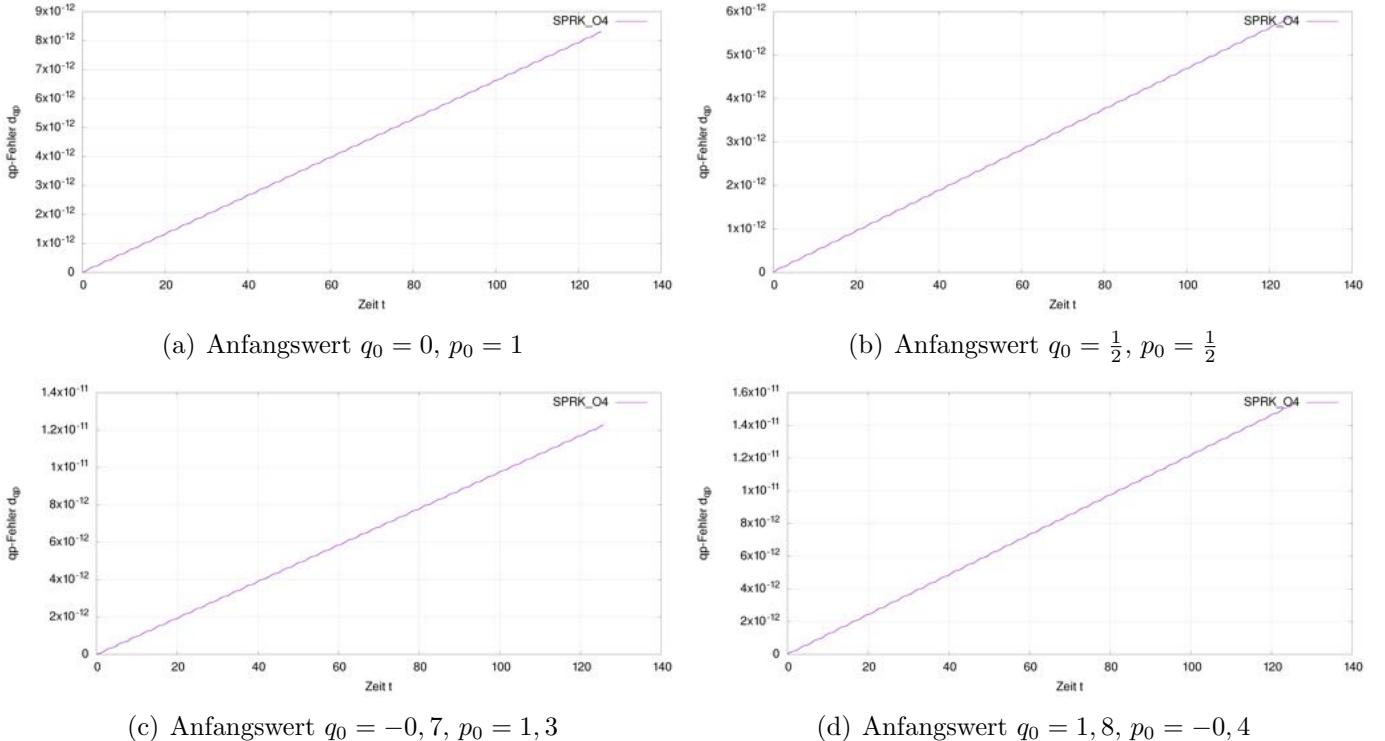


Abbildung 25: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SPRK_O4.

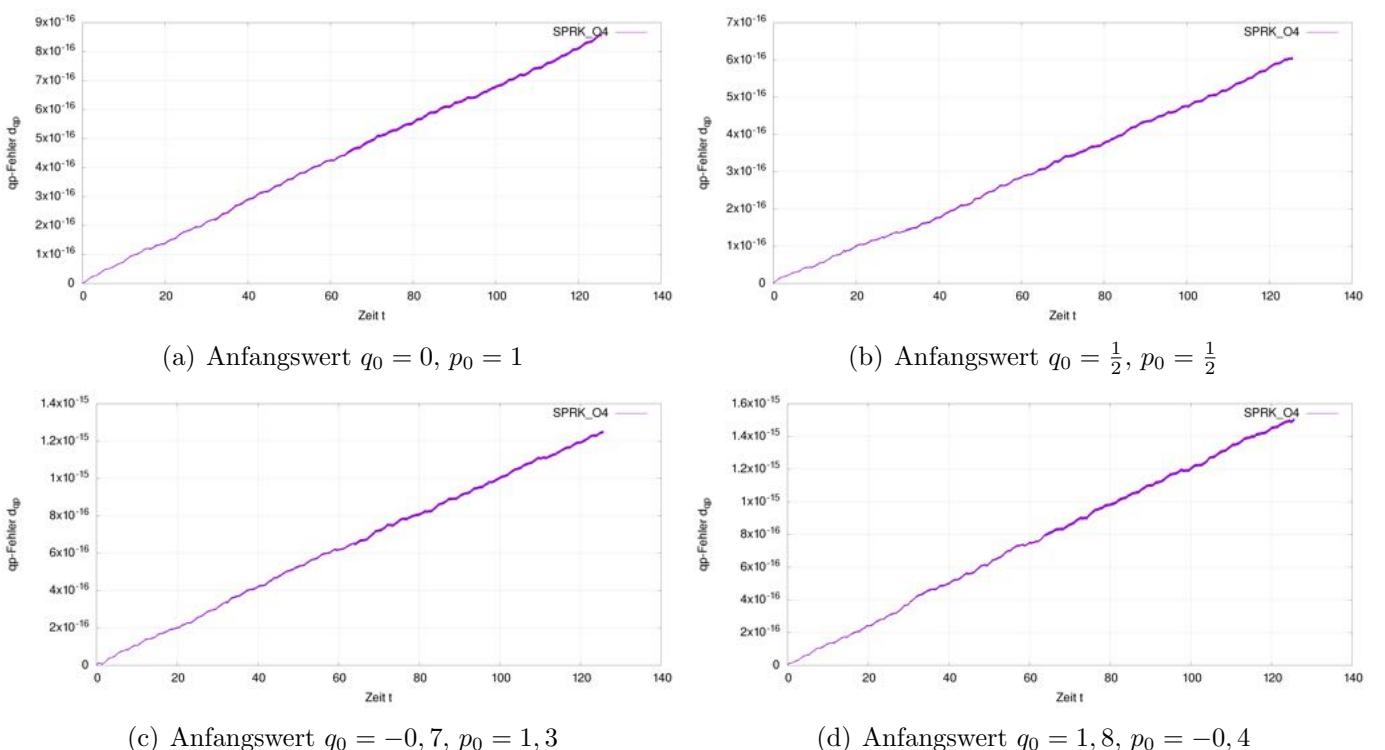


Abbildung 26: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O4.

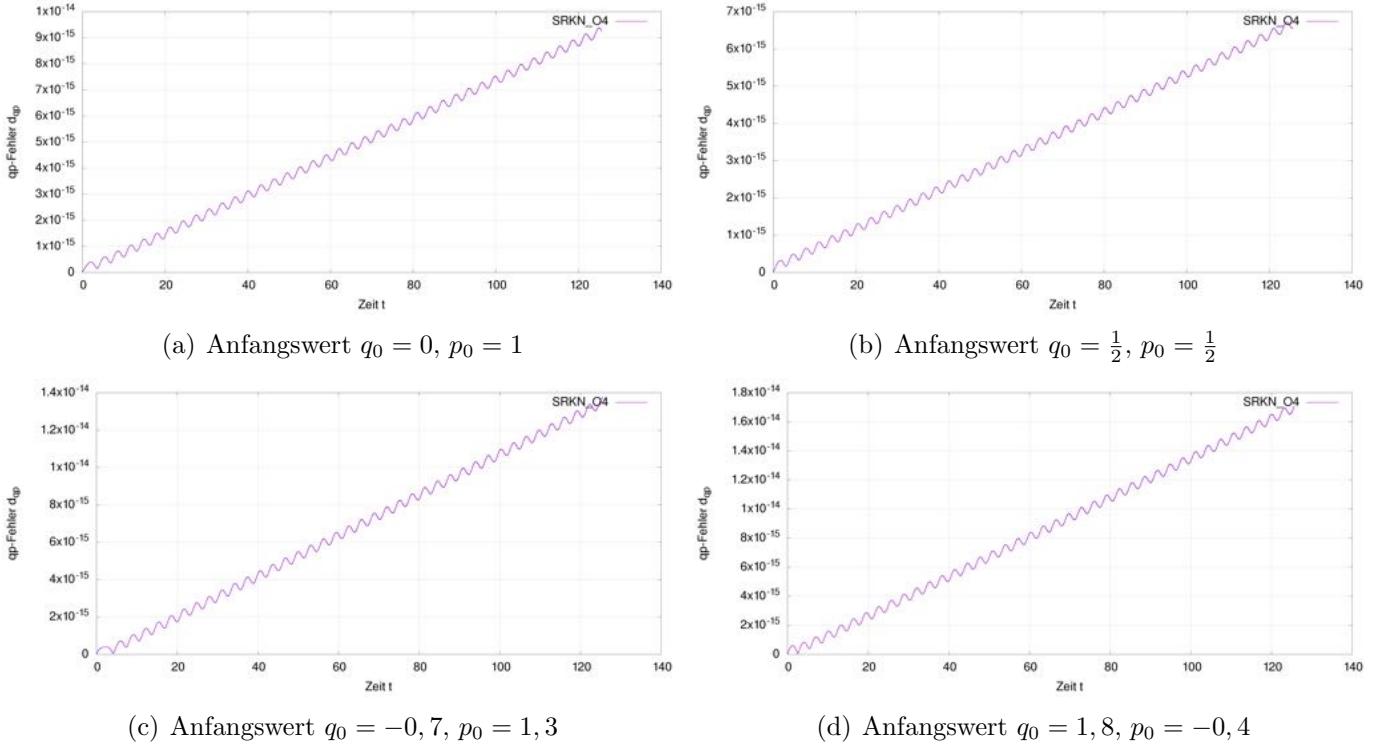


Abbildung 27: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-3}$, Verfahren: SRKN_O4.

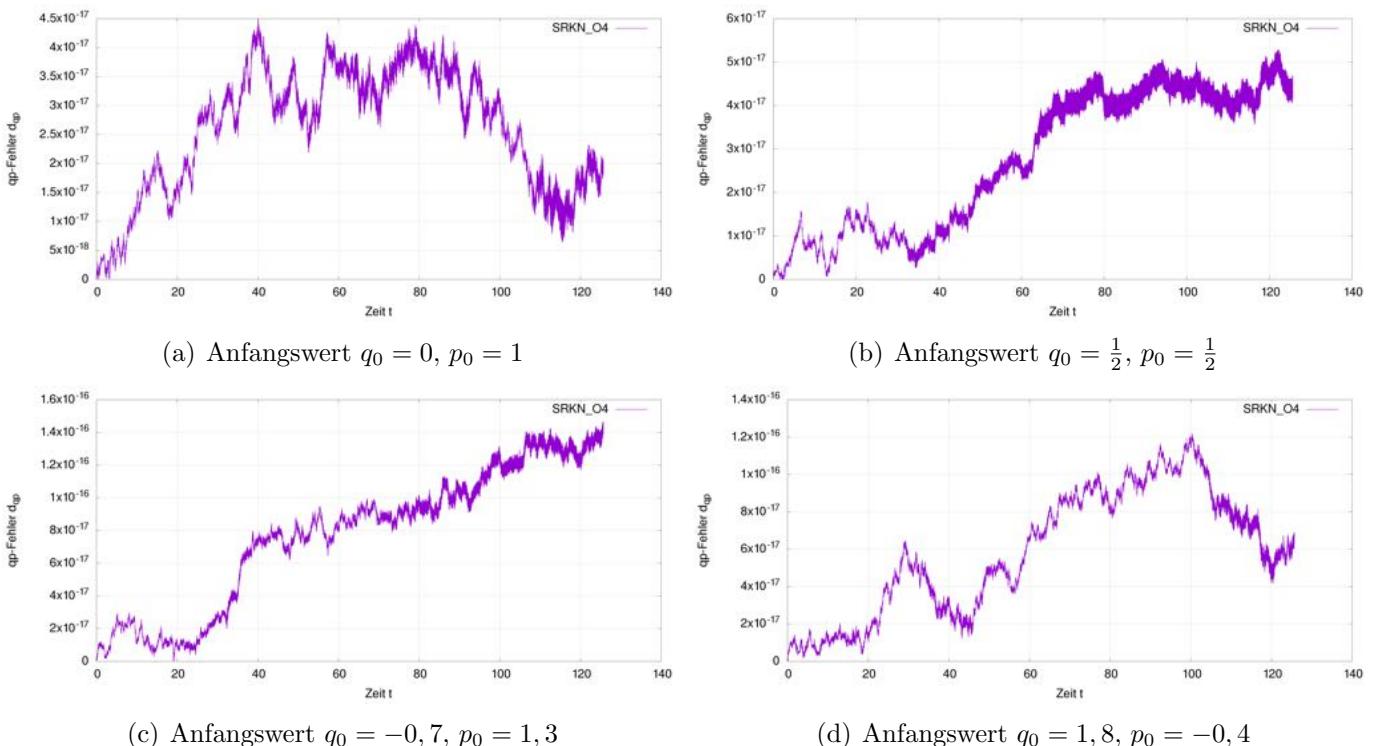


Abbildung 28: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des klassischen harmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 40\pi$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O4.

Anhang 2

Abbildungen zur Tabelle 2 bis 4 (Mathematisches Pendel)

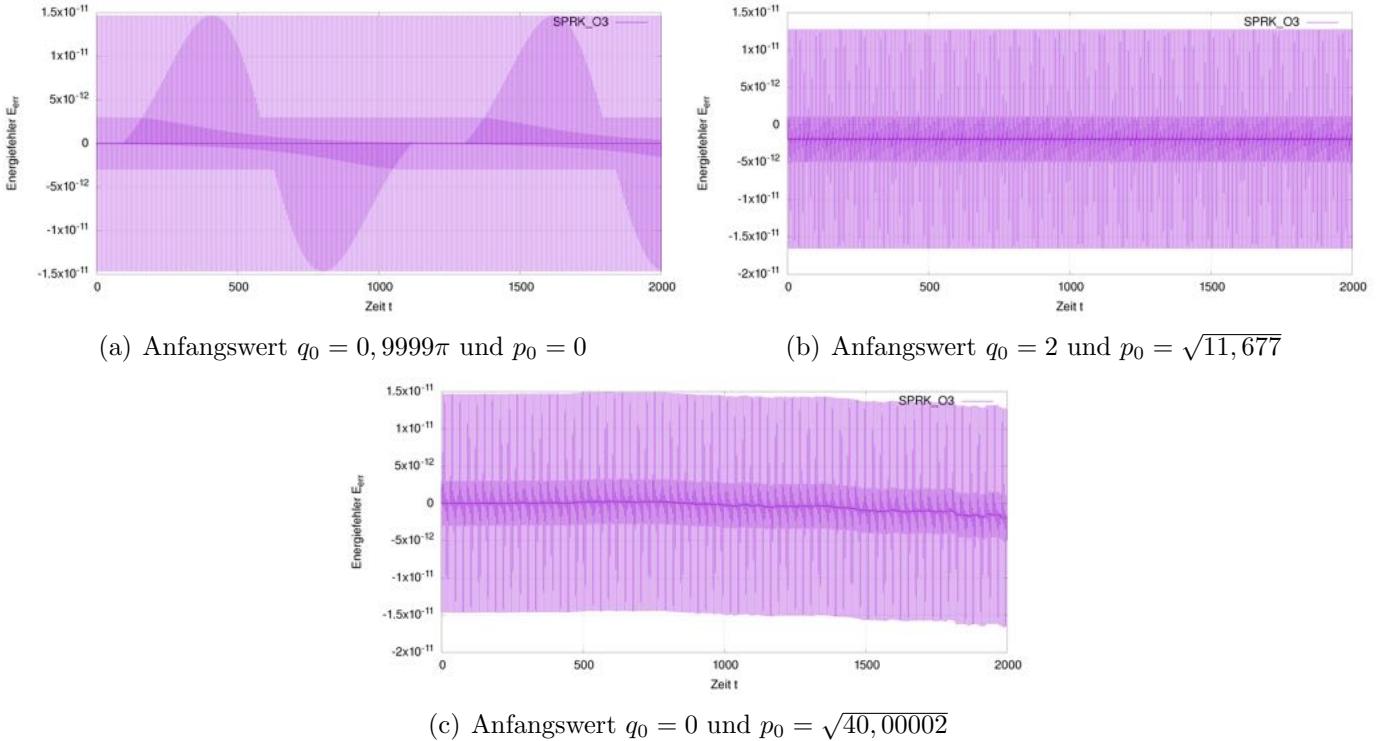


Abbildung 1: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 2000$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O3.

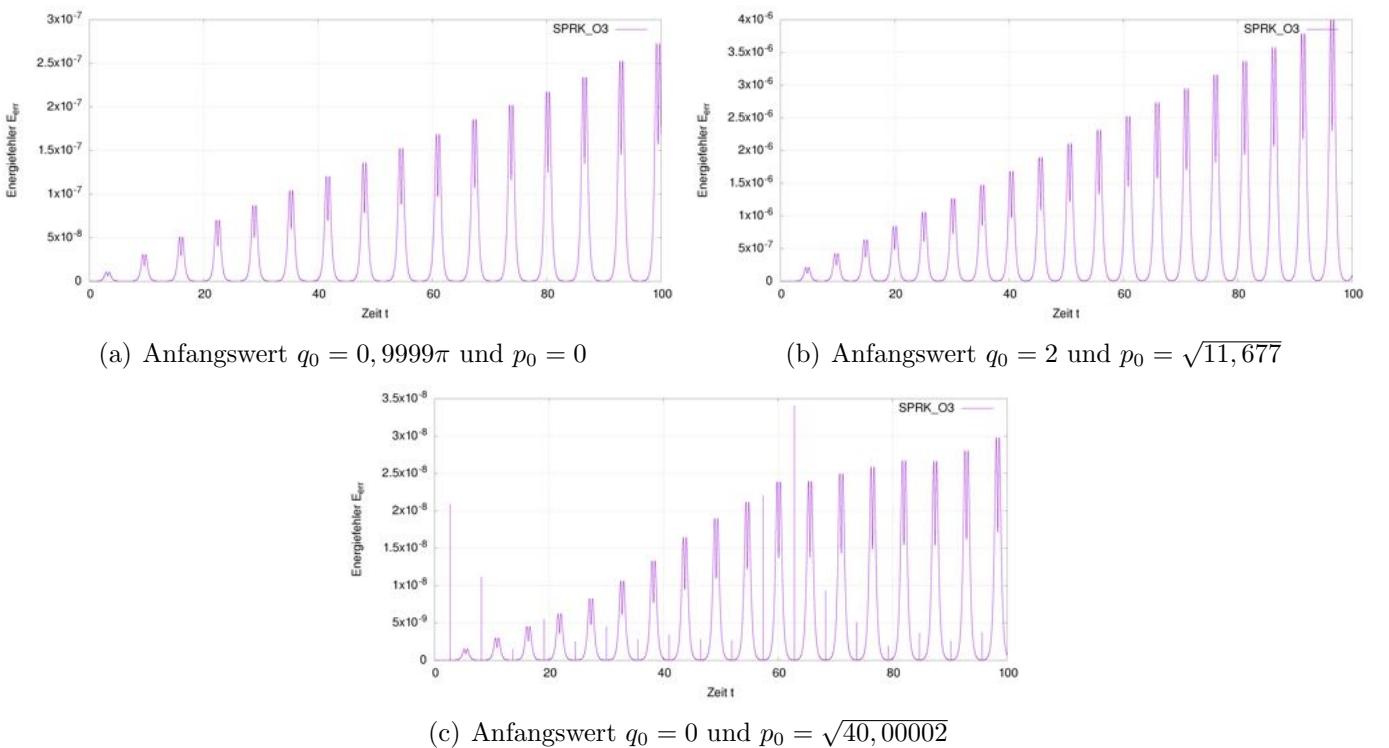


Abbildung 2: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O3.

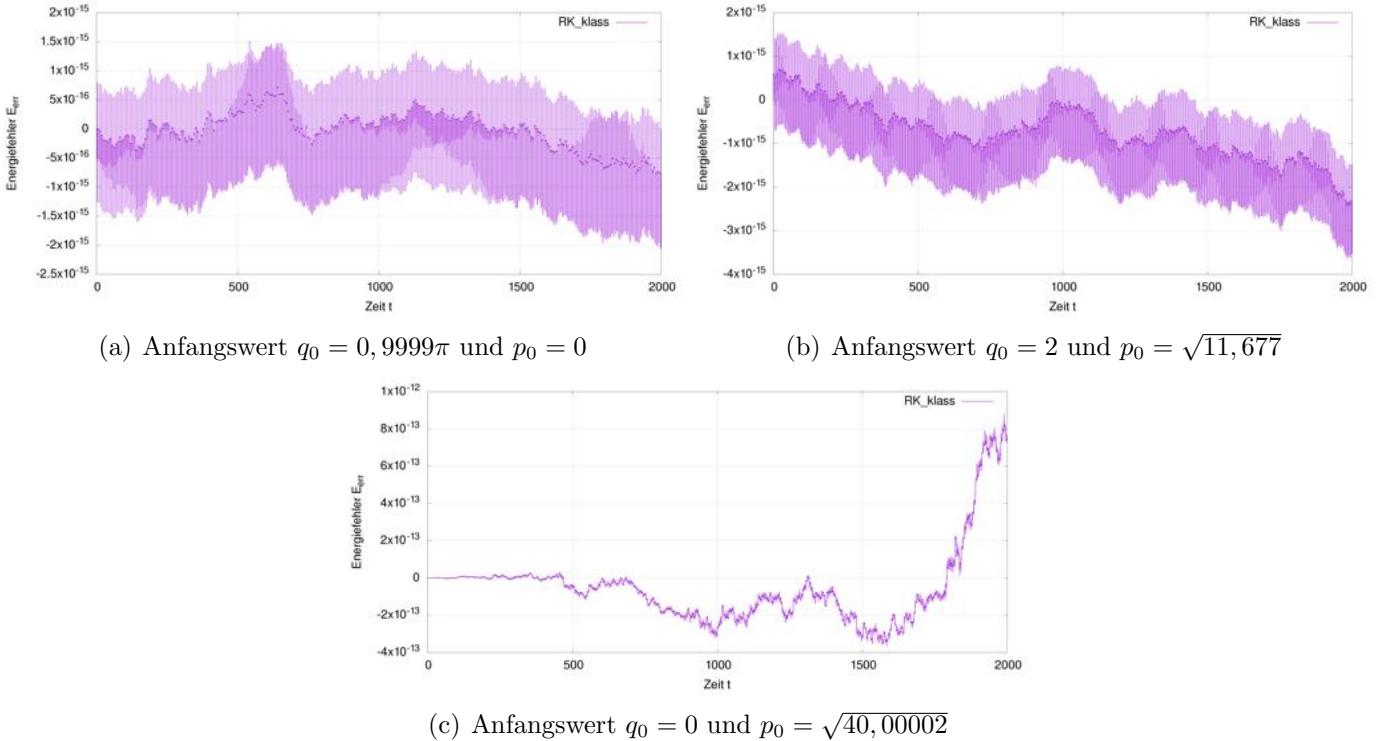


Abbildung 3: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 2000$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: RK_klass.

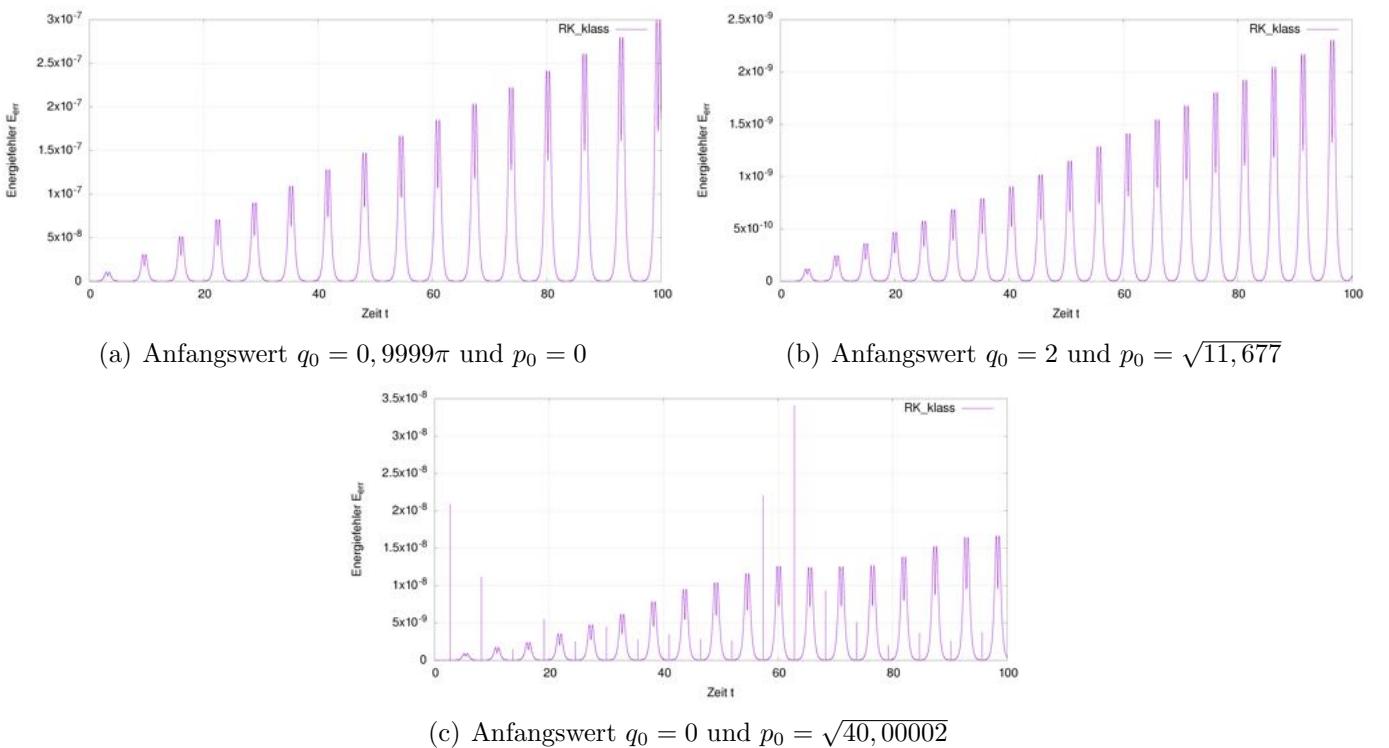


Abbildung 4: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: RK_klass.

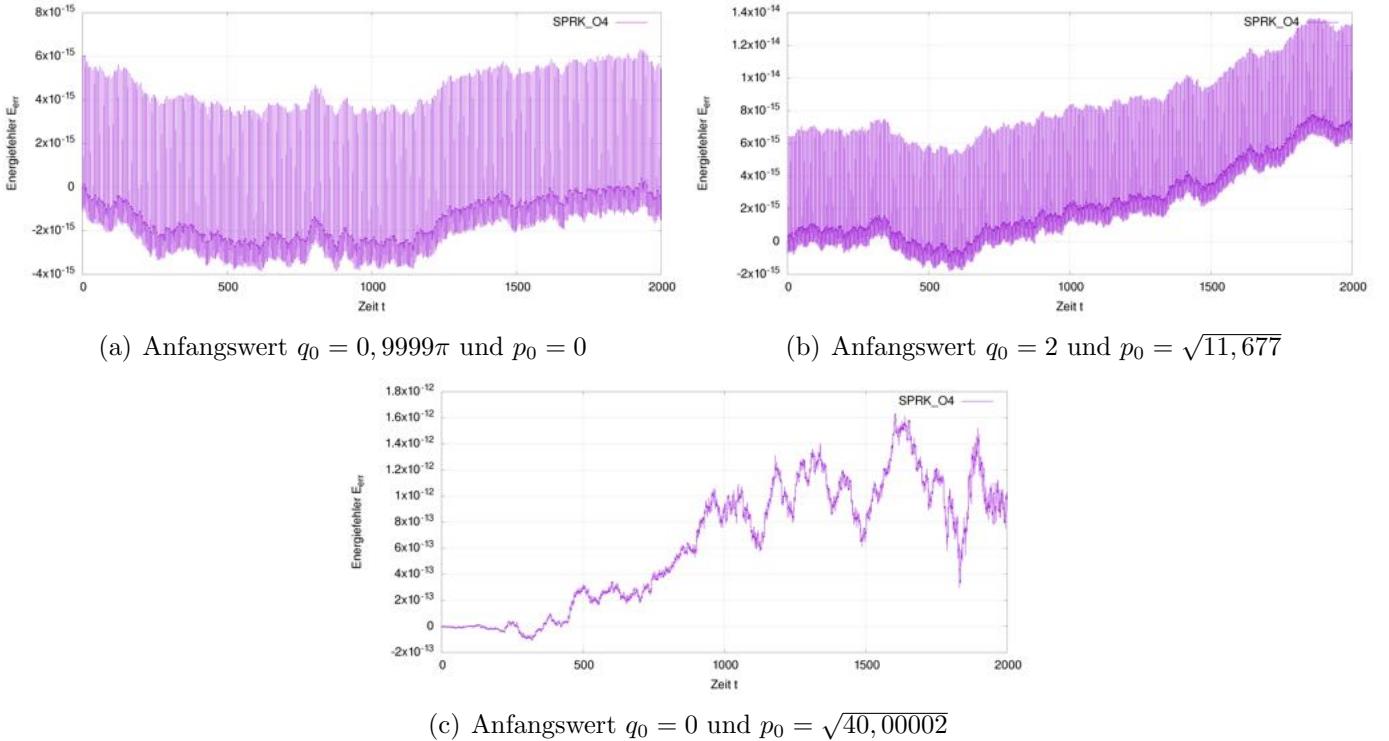


Abbildung 5: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 2000$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O4.

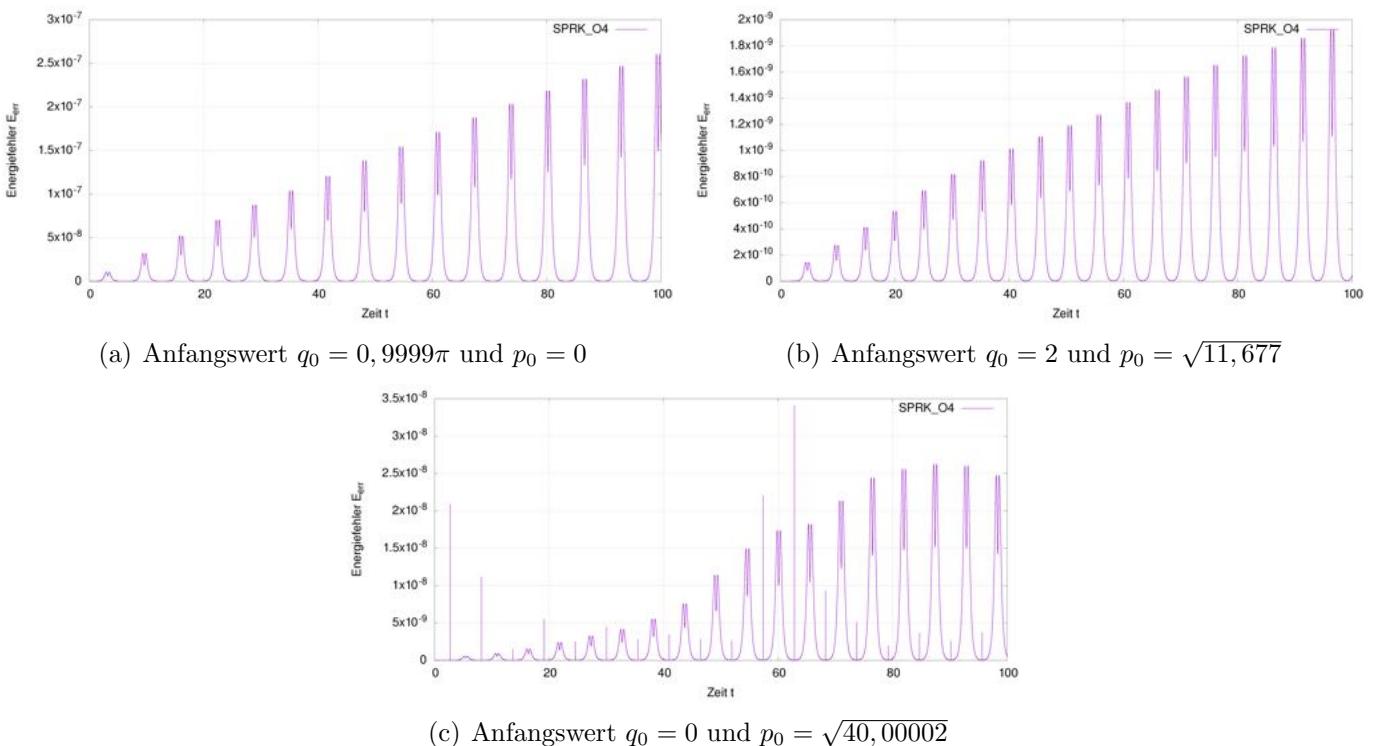


Abbildung 6: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SPRK_O4.

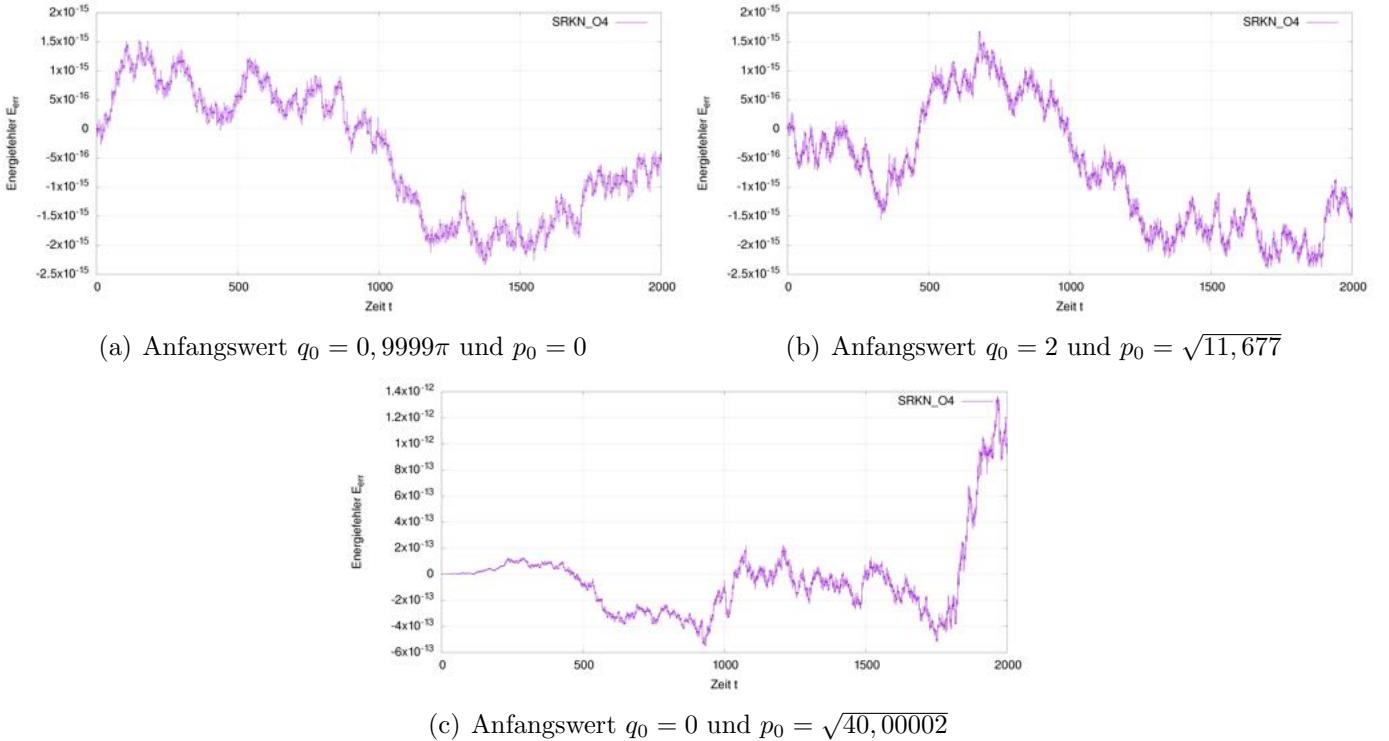


Abbildung 7: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 2000$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O4.

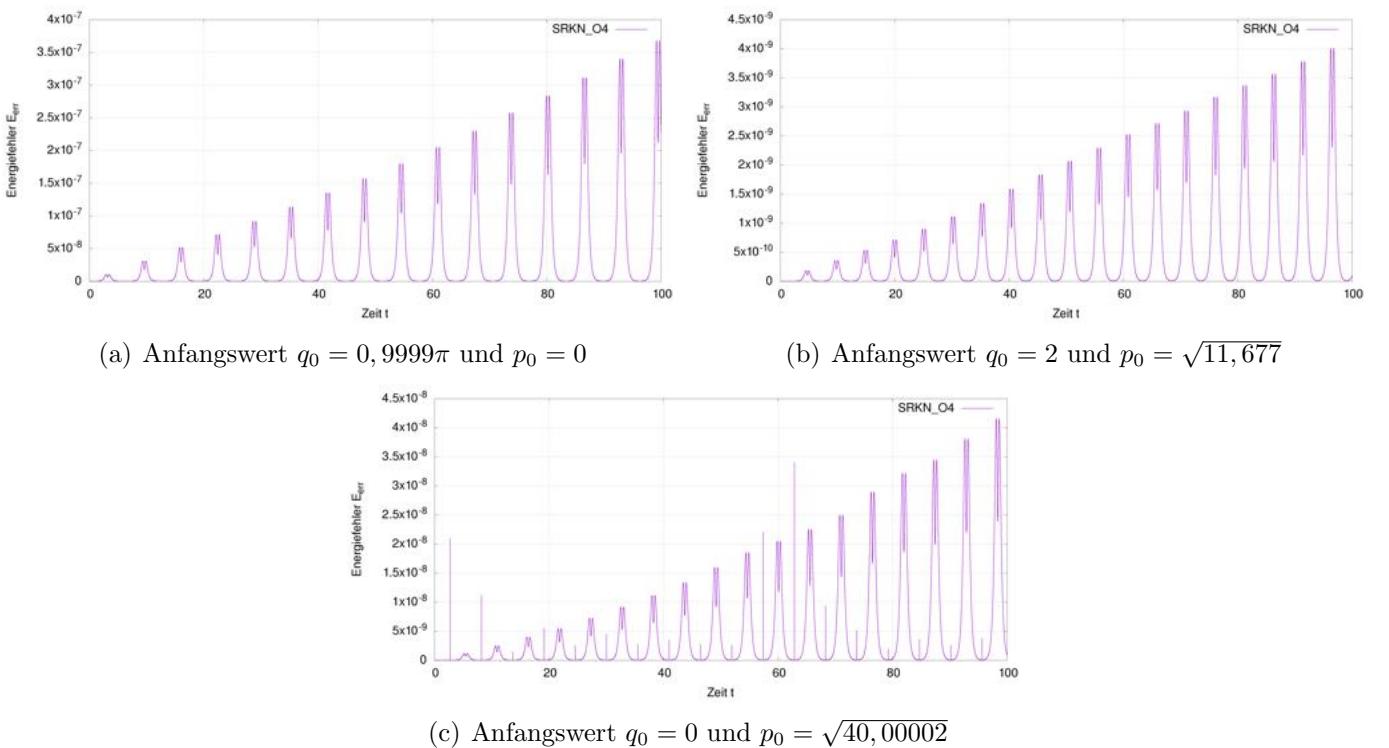


Abbildung 8: Zeitlicher Verlauf des qp -Fehlers für die Simulation des mathematischen Pendels, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Zeitschritt: $h = 10^{-4}$, Verfahren: SRKN_O4.

Anhang 3

Abbildungen zum relativistischen anharmonischen Oszillator

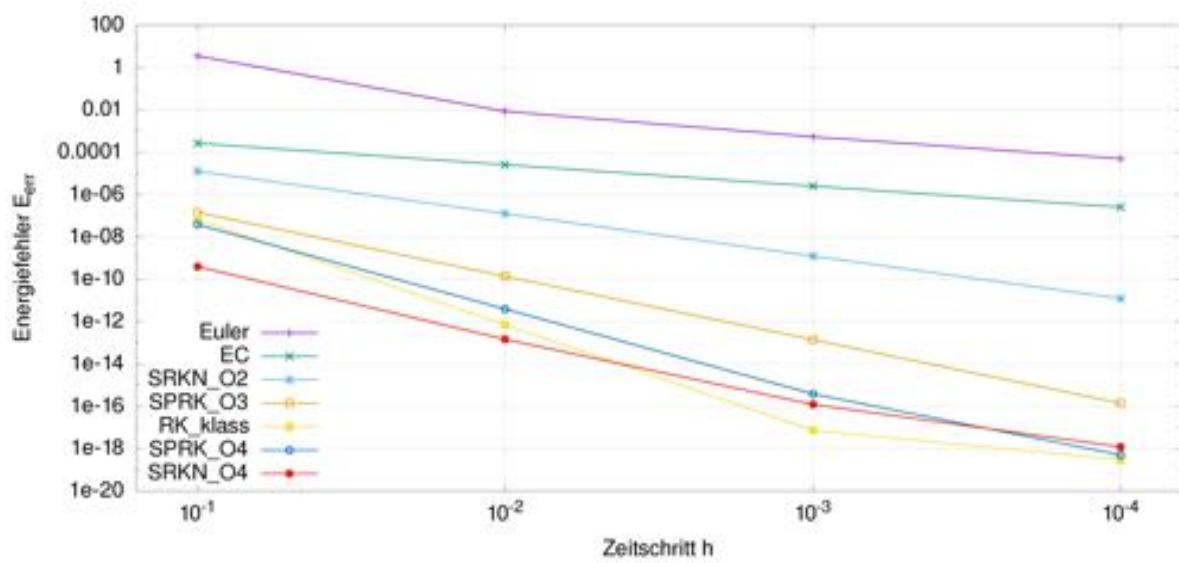


Abbildung 1: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0, 1$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

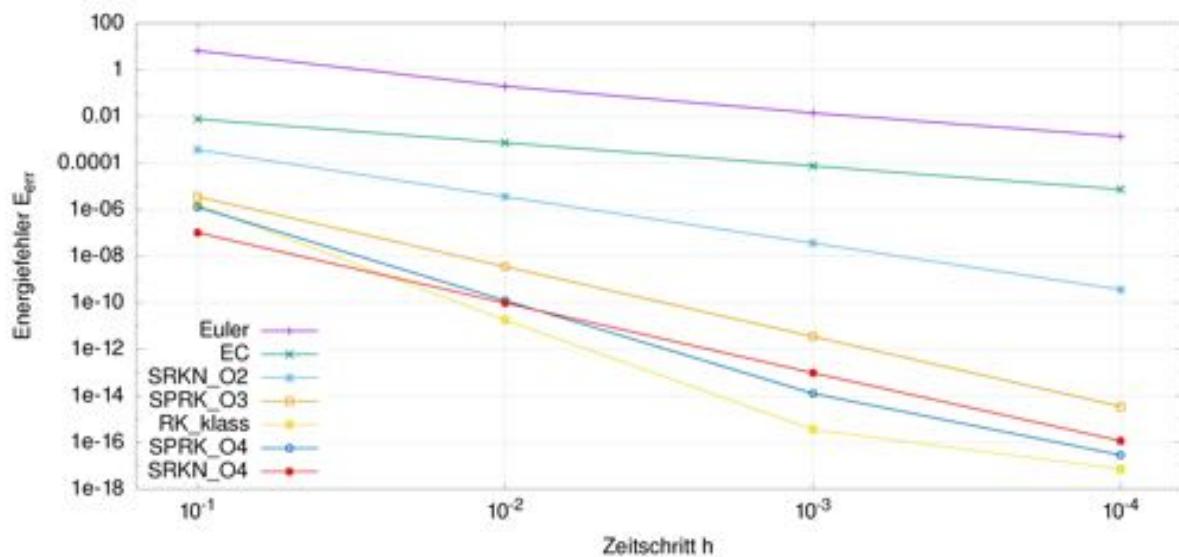


Abbildung 2: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0, 5$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

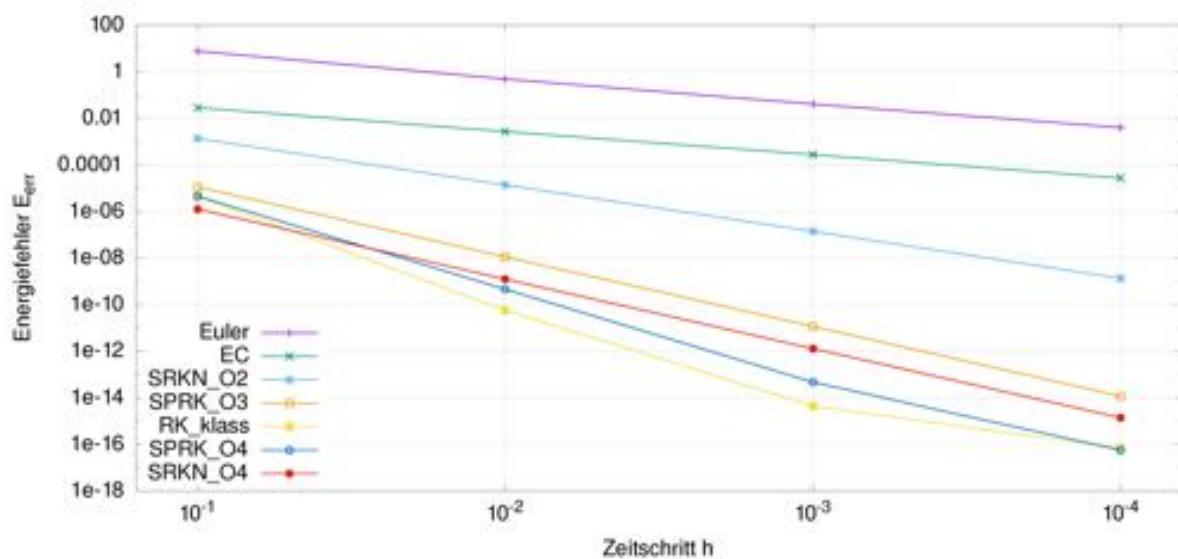


Abbildung 3: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,8$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

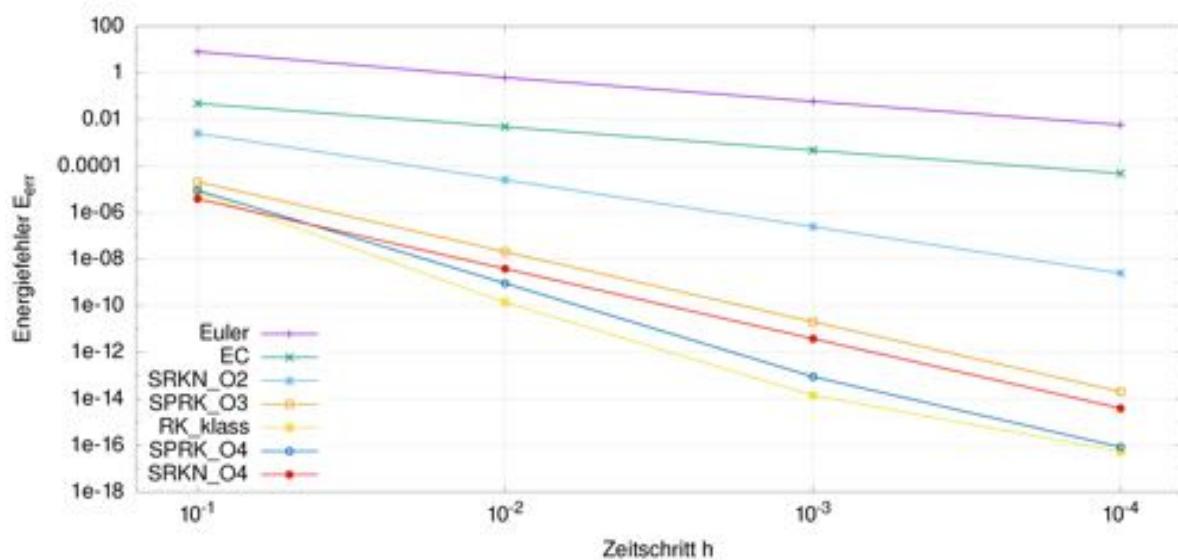


Abbildung 4: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,9$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

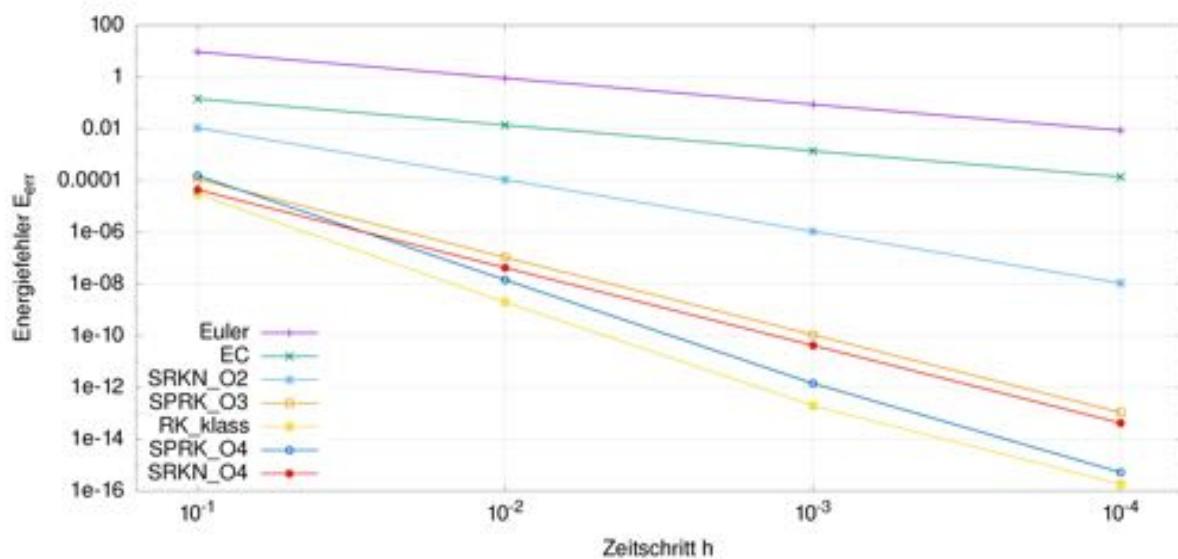


Abbildung 5: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,99$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

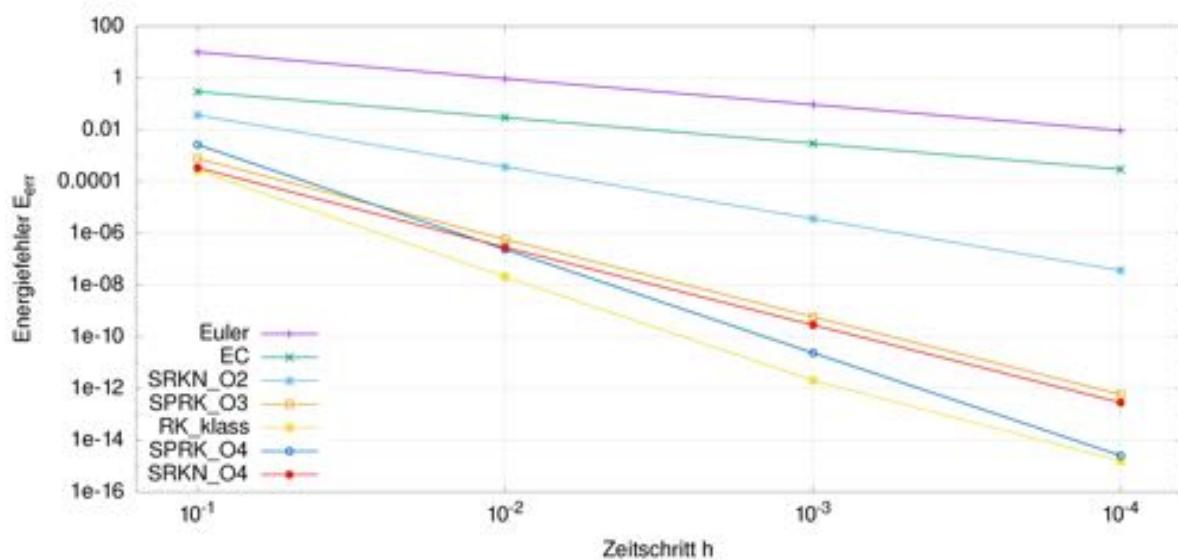


Abbildung 6: Energiefehler des relativistischen anharmonischen Oszillators in Abhangigkeit vom Zeitschritt, Simulation mit Anfangswerten $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,999$ und Zeitintervall $0 \leq t \leq 100$.

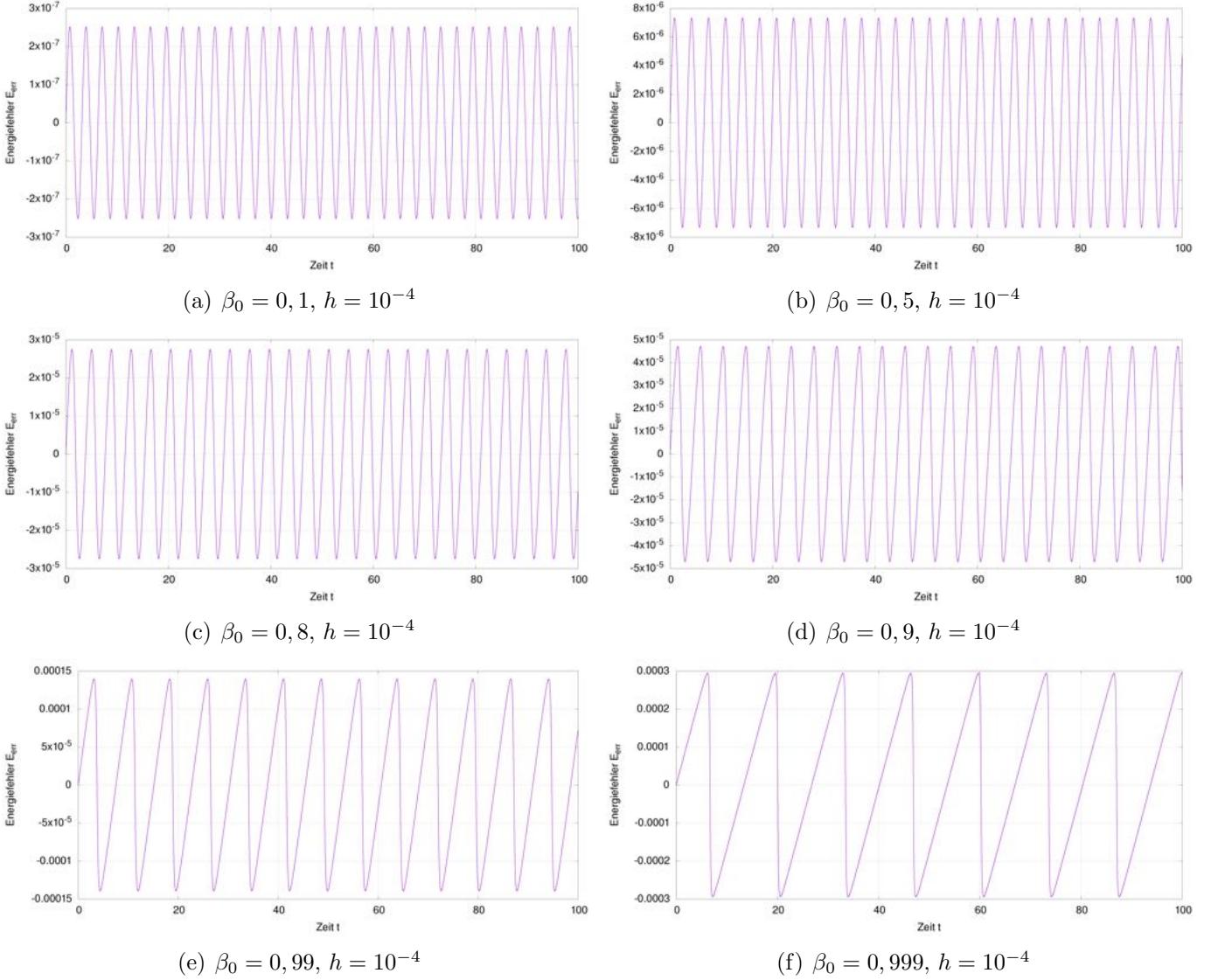


Abbildung 7: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: EC.

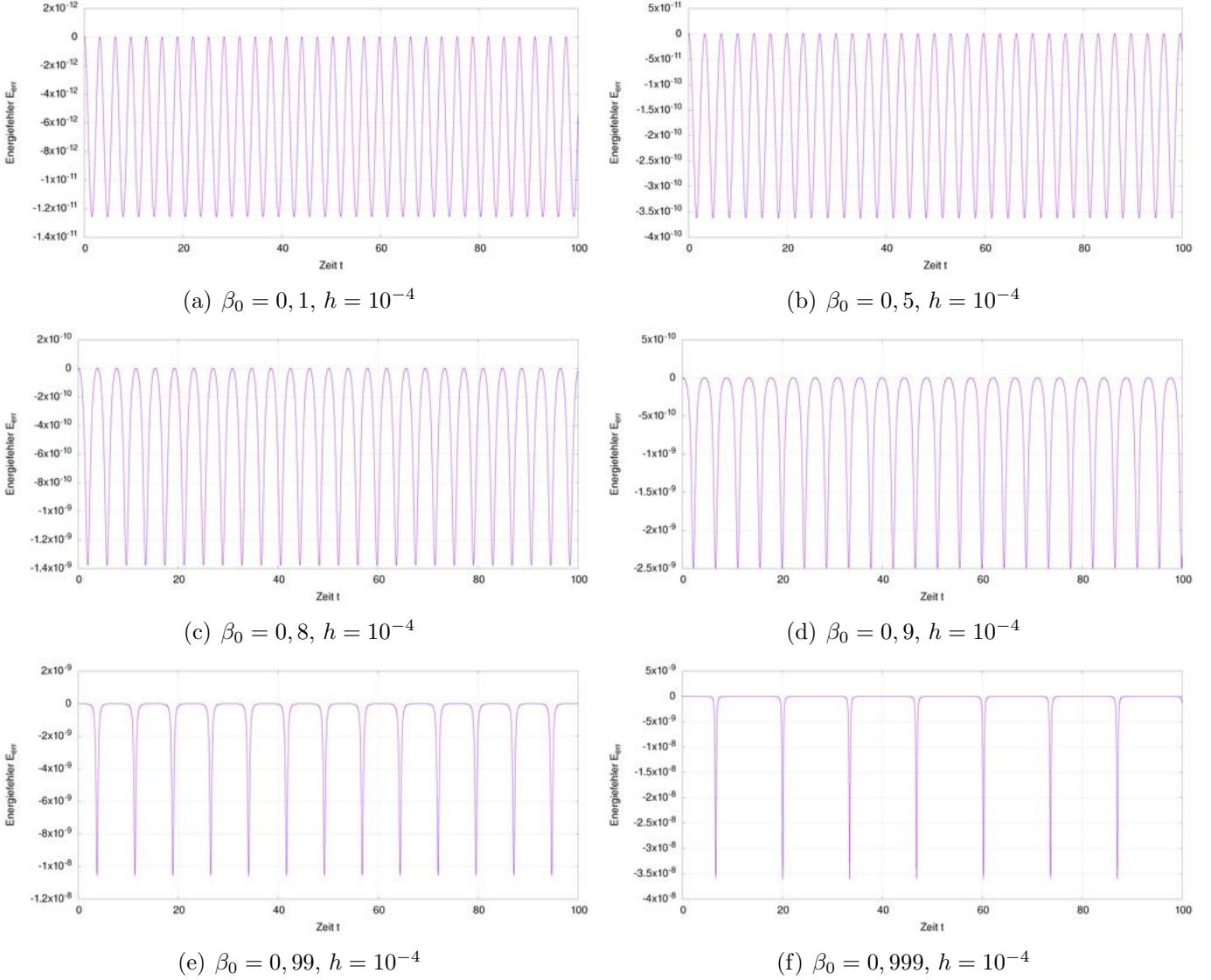


Abbildung 8: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: SRKN_O2.

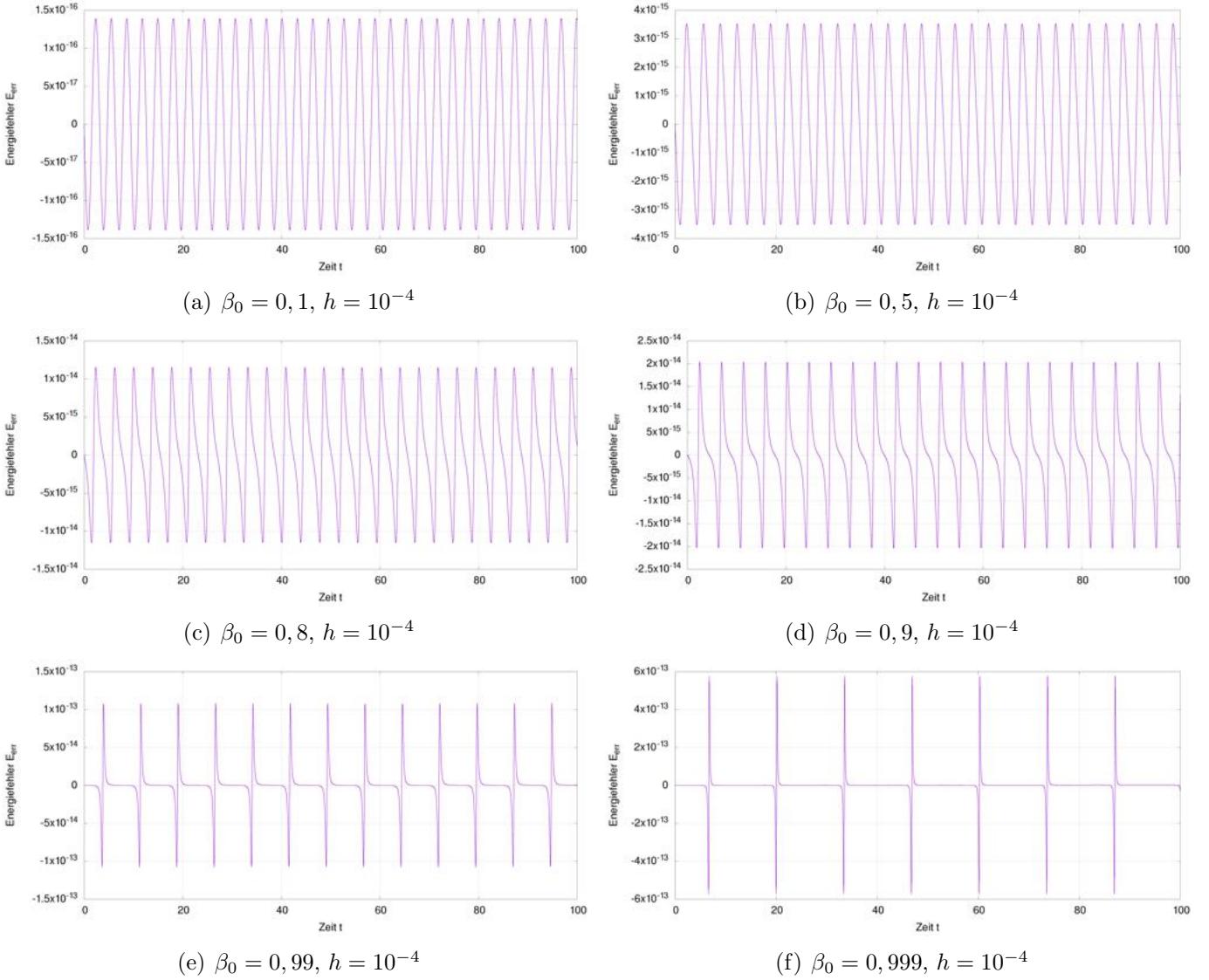


Abbildung 9: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: SPRK_O3.

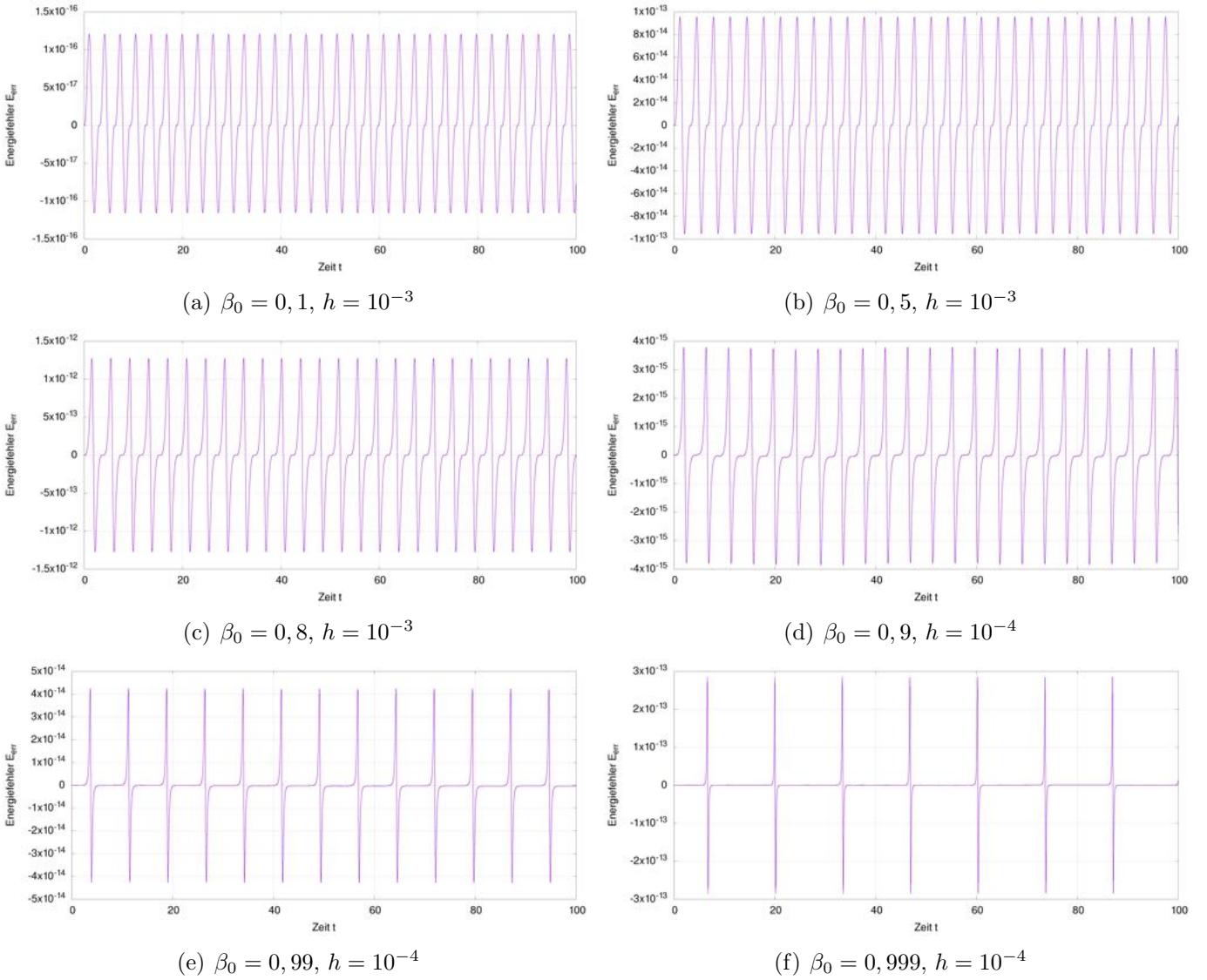
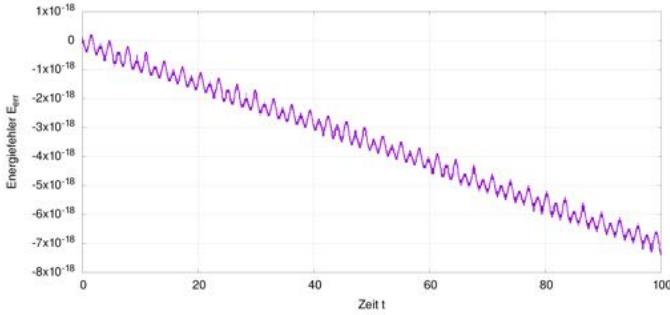
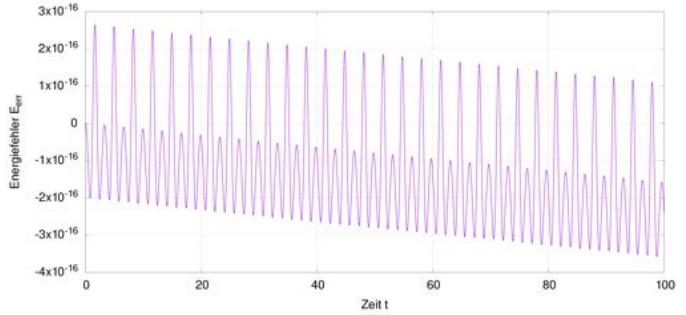


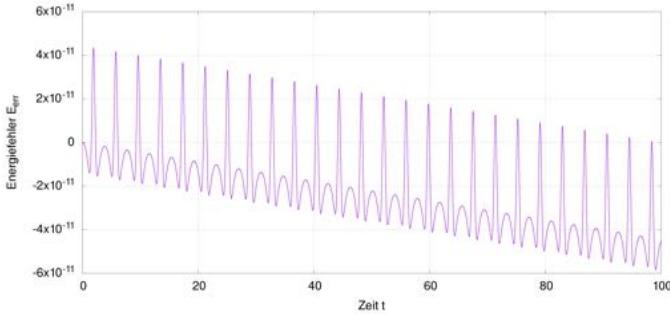
Abbildung 10: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: SRKN_O4.



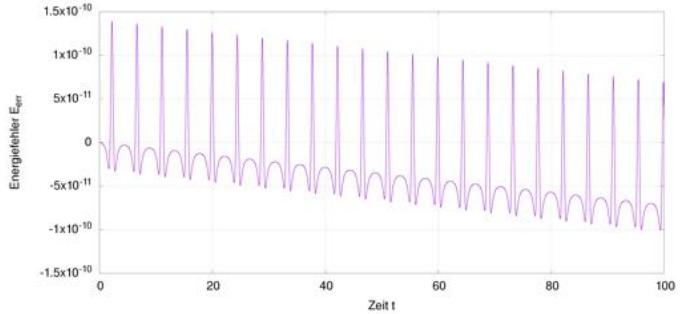
(a) $\beta_0 = 0, 1, h = 10^{-3}$



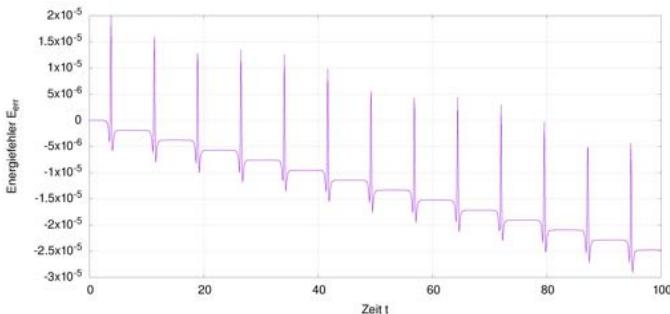
(b) $\beta_0 = 0, 5, h = 10^{-3}$



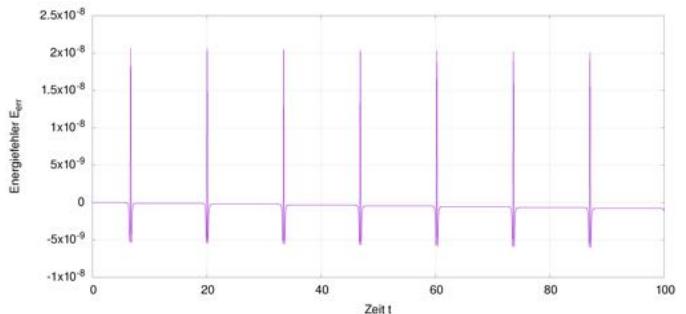
(c) $\beta_0 = 0, 8, h = 10^{-2}$



(d) $\beta_0 = 0, 9, h = 10^{-2}$



(e) $\beta_0 = 0, 99, h = 10^{-1}$



(f) $\beta_0 = 0, 999, h = 10^{-2}$

Abbildung 11: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: RK_klass.

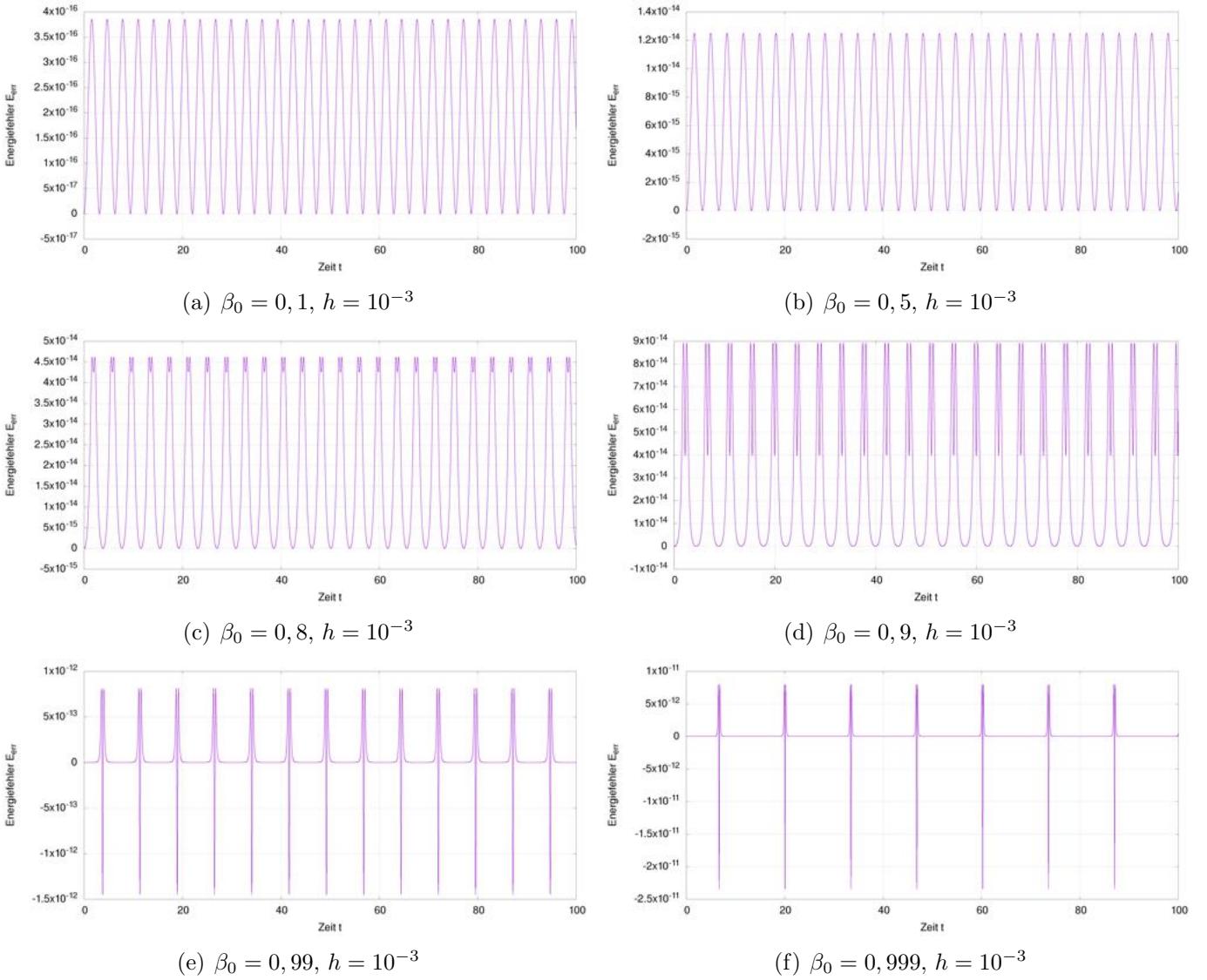


Abbildung 12: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 100$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und unterschiedliche Werte von $\beta_0 \in (0; 1)$, Verfahren: SPRK_O4.

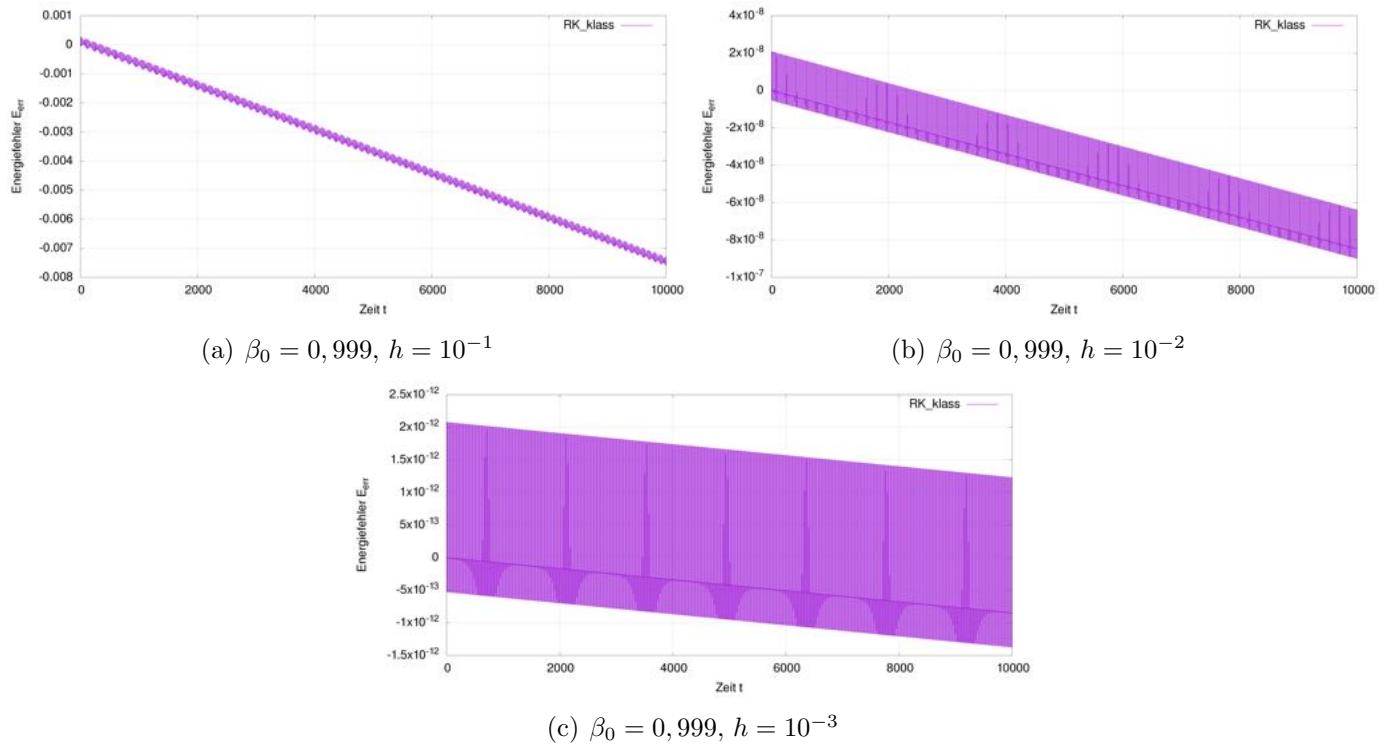


Abbildung 13: Zeitlicher Verlauf des Energiefehlers für die Simulation des relativistischen anharmonischen Oszillators, Zeitspanne $0 \leq t \leq 10^4$, Anfangswerte $q_0 = 0$ und $\beta_0 = 0,999$, Verfahren: RK_klass.

Anhang 4

Quellcode

Listing 1: Simulation eines eindimensionalen Systems

```
1 #include <iostream>
2 #include <fstream>
3 #include <cmath>
4 #include <string>
5 #include <sstream>
6
7 using namespace std;
8
9 const long double pi = 3.14159265358979323846L;
10
11 //Hamiltonfunktion
12 long double H(long double p, long double q){
13     return (sqrtl(p*p+1.L)+(q*q)/2.L);
14 }
15
16 //Bewegungsgleichungen: dp/dt = -dH/dq
17 long double p_dot(long double q){
18     return (-q);
19 }
20
21 //dq/dt=dH/dp
22 long double q_dot(long double p){
23     return (p/sqrtl(p*p+1.L));
24 }
25
26 //Anfangswerte
27 const long double beta0=0.999L;
28 const long double q0 = 0.L;
29 const long double p0 = beta0/sqrtl(1.L-beta0*beta0);
30 const long double E0 = H(p0,q0);
31
32 //Die Iterationen der verschiedenen numerischen Methoden
33
34 const unsigned numOfMethods=7;
35
36 pair<long double ,long double>Euler(pair<long double ,long double> pq,long double dt){
37     long double p = pq.first, q = pq.second;
38     long double pnew = p+p_dot(q)*dt;
39     long double qnew = q+q_dot(p)*dt;
40     return make_pair(pnew,qnew);
41 }
42
43 pair<long double ,long double>EC(pair<long double ,long double> pq,long double dt){
44     long double p = pq.first, q = pq.second;
45     long double pnew = p+p_dot(q)*dt;
46     long double qnew = q+q_dot(pnew)*dt;
47     return make_pair(pnew,qnew);
48 }
```

```

49
50 pair<long double ,long double>SRKN_O2(pair<long double ,long double> pq, long double dt)←
    {
51     long double p = pq.first, q = pq.second;
52     long double Q = q + q_dot(p)/2.L*dt;
53     long double pnew = p+p_dot(Q)*dt;
54     long double qnew = q+(q_dot(p)+q_dot(pnew))/2.L*dt;
55     return make_pair(pnew,qnew);
56 }
57
58 pair<long double ,long double>SPRK_O3(pair<long double ,long double> pq, long double dt)←
    {
59     long double P = pq.first, Q = pq.second;
60     long double b[3] = {7.L/24.L,3.L/4.L,-1.L/24.L}, B[3]={2.L/3.L,-2.L/3.L,1.L};
61     for (int i=0;i<3;i++){
62         P = P + dt*b[i]*p_dot(Q);
63         Q = Q + dt*B[i]*q_dot(P);
64     }
65     long double pnew = P;
66     long double qnew = Q;
67     return make_pair(pnew,qnew);
68 }
69
70 pair<long double ,long double>RK_klass(pair<long double ,long double> pq, long double dt)←
    )
    {
71     long double p = pq.first, q = pq.second;
72     long double pk1 = dt*p_dot(q);
73     long double qk1 = dt*q_dot(p);
74     long double pk2 = dt*p_dot(q+qk1/2.L);
75     long double qk2 = dt*q_dot(p+pk1/2.L);
76     long double pk3 = dt*p_dot(q+qk2/2.L);
77     long double qk3 = dt*q_dot(p+pk2/2.L);
78     long double pk4 = dt*p_dot(q+qk3);
79     long double qk4 = dt*q_dot(p+pk3);
80     long double pnew = p +(pk1 + 2.L*pk2 + 2.L*pk3 + pk4)/6.L;
81     long double qnew = q +(qk1 + 2.L*qk2 + 2.L*qk3 + qk4)/6.L;
82     return make_pair(pnew,qnew);
83 }
84
85 pair<long double ,long double>SPRK_O4(pair<long double ,long double> pq, long double dt)←
    )
    {
86     long double omega = 1.3512071919596576340L; // = (2+2^(1/3)+2^(-1/3))/3.
87     long double nu = -1.7024143839193152681L; // = 1-2*omega.
88     long double P = pq.first, Q = pq.second;
89     long double b[4] = {omega,nu,omega,0.L}, B[4]={omega/2.L,(omega+nu)/2.L,(omega+nu)←
        /2.L,omega/2.L};
90     for (int i=0;i<4;i++){
91         Q = Q + dt*B[i]*q_dot(P);
92         P = P + dt*b[i]*p_dot(Q);
93     }
94     long double pnew = P;
95     long double qnew = Q;
96     return make_pair(pnew,qnew);
97 }
98
99 pair<long double ,long double>SRKN_O4(pair<long double ,long double> pq, long double dt)←
    {
100    long double g[7]={0.L,0.L,0.2051776615422863869L,0.6081989431465009739L←
        ,0.4872780668075869657L,1.L,1.L};
101    long double b[6]={0.0617588581356263250L,0.3389780265536433551L←
        ,0.6147913071755775662L,-0.1405480146593733802L,0.1250198227945261338L,0.L};
102    long double B[6];
103    for (int i=0;i<6;i++){
104        B[i]=g[i+1]-g[i];

```

```

105 }
106 long double P = pq.first, Q = pq.second;
107 for( int i=0;i<6;i++){
108     Q = Q + dt*B[i]*q_dot(P);
109     P = P + dt*b[i]*p_dot(Q);
110 }
111 long double pnew = P;
112 long double qnew = Q;
113 return make_pair(pnew,qnew);
114 }
115
116 //Subroutine f&#252;r das Schreiben der Daten
117 long double writeData(FILE* filehandle, pair<long double,long double> pq, long double<->t){
118     long double E=E(pq.first,pq.second);
119     fprintf(filehandle,"%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\n",t,pq.second,pq.first->E-E0);
120     return E;
121 }
122
123 //Subroutine zur Anwendung einer numerischen Methode
124 typedef pair<long double,long double> (*numMethodCall)(pair<long double,long double> <->pq, long double Dt);
125
126 void compute(numMethodCall numIter, const char* numMethodName, unsigned methodIndex, <->FILE* logfileHandle, long double *dt, unsigned dtSize, long double TTot, pair<long<->double,long double> pq0, long double DeltaE[][numOfMethods]){
127
128     clock_t startT,endT;
129     startT = clock(); //Start des Timers
130
131     stringstream SS;
132
133     for( unsigned ii=0; ii<dtSize; ii++){ // Verschiedene Zeitschritte dt durchlaufen
134         long double Dt = dt[ii]; // Zeitschritt dt ausw&uuml;hlen
135         int steps = TTot/Dt; // Anzahl der Berechnungsschritte
136         //Minimale und maximale Energie zur Bestimmung des Energiefehlers
137         long double Emin=E0;
138         long double Emax=E0;
139         FILE * datafile; //Datei zum schreiben &ffnen
140         SS << numMethodName << ".dt=" << Dt << ".txt";
141         datafile = fopen(SS.str().c_str(),"w");
142         fprintf(datafile,"#Timestep = %15.10Lf\n#Columns: t, q(t), p(t), E(t)\n",Dt); <->
143             //Header der Daten-Datei
144         writeData(datafile,pq0,0.L); //Anfangswerte schreiben
145         pair<long double,long double> pq = pq0;
146         for( int i=1;i<=steps;i++){// Berechnungsschritte ausf&uuml;hren
147             long double t=i*Dt;
148             pq = numIter(pq,Dt);
149             long double E=writeData(datafile,pq,t);
150             //Maximale und minimale Energien speichern
151             if (E>Emax){
152                 Emax=E;
153             }
154             if (E<Emin){
155                 Emin=E;
156             }
157             DeltaE[ii][methodIndex] = ((Emax-E0)>(E0-Emin)) ? (Emax-E0):(E0-Emin); //<->
158                 Energiefehler speichern
159             fclose(datafile);
160             SS.str("");
161     }
162     endT = clock(); //Ende des Timers

```

```

162 //Rechenzeit wird in einer Logdatei verzeichnet
163 fprintf(logfileHandle,"Computation of %s completed: %20.10f sec\n",numMethodName, ←
164     (1.0*(endT-startT)/CLOCKS_PER_SEC));
165 cout << "Computation of " << numMethodName << " completed." << endl;
166 }
167
168 int main(){
169
170     long double dt[]={1e-1L,1e-2L,1e-3L,1e-4L};//Verwendete Zeitschritte
171     long double TTot = 100.0; //Zeitspanne
172     pair<long double ,long double> pq0 = make_pair(p0,q0);
173
174     FILE * logfile; //Logdatei
175     logfile = fopen("log.txt","w");
176
177     unsigned dtSize = int(sizeof(dt)/sizeof(dt[0]));
178     long double DeltaE[dtSize][numOfMethods];
179
180     //Verwendung der verschiedenen numerischen Methoden
181     compute(Euler,"Euler",0,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
182     compute(EC,"EC",1,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
183     compute(SRKN_O2,"SRKN_O2",2,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
184     compute(SPRK_O3,"SPRK_O3",3,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
185     compute(RK_klass,"RK_klass",4,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
186     compute(SPRK_O4,"SPRK_O4",5,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
187     compute(SRKN_O4,"SRKN_O4",6,logfile,dt,dtSize,TTot,pq0,DeltaE);
188
189     //Energiefehler in eine Datei schreiben
190     cout << "Writing energy-error-file." << endl;
191
192     FILE * energyErrorfile;
193     energyErrorfile = fopen("energy-errors.txt","w");
194     fprintf(energyErrorfile,"#log(Delta_t), Euler, EC, SRKN_O2, SPRK_O3, RK_klass, ←
195         SPRK_O4, SRKN_O4\n");
196     for(unsigned ii=0; ii<dtSize; ii++){
197         fprintf(energyErrorfile,"%d\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\t%24.19Lf\n",
198             (ii+1),DeltaE[ii][0],DeltaE[ii][1],DeltaE[ii][2],←
199             DeltaE[ii][3],DeltaE[ii][4],DeltaE[ii][5],DeltaE[ii][6]);
200     }
201     fclose(energyErrorfile);
202
203     fclose(logfile);
204
205     cout << "End of program." << endl;
206
207     return 0;
208 }
```