

Numerieke methoden
voor stelsels
gewone differentiaalvergelijkingen

Prof. Dr. Marnix Van Daele

Deel IV

Geometrische integratie

Hoofdstuk 12

Hamiltoniaanse problemen

12.1 Inleiding

Uit de vorige hoofdstukken is gebleken dat er in de loop der jaren heel veel onderzoek verricht is naar oplossingstechnieken voor stelsels differentiaalvergelijkingen. De meeste van de ontwikkelde algoritmen zijn gebaseerd op het discretiseren van de vergelijkingen op zodanige wijze dat de discretisatiefouten zo klein mogelijk zijn, of dat de methoden stabiel zijn zodat de lokale fouten niet groeien of bvb. dat de fouten liggen binnen vooraf vastgelegde grenzen. Het resulterende discrete stelsel (in vaak een zeer groot aantal onbekenden) wordt dan opgelost met zorgvuldig ontworpen lineaire en niet-lineaire *solvers*. Worden deze methoden gekoppeld aan fout-controle-strategieën, dan leidt dit vaak tot zeer nauwkeurige oplossingen voor ruime algemene klassen van differentiaalvergelijkingen, weliswaar op voorwaarde dat de integratie-intervallen niet te lang zijn en de oplossing voldoende glad blijft met begrensde afgeleiden.

Deze methoden houden echter geen rekening met kwalitatieve of globale eigenschappen van het probleem. Houden we hiermee wel rekening bij het ontwerpen van methoden, dan komen we op het terrein van de *geometrische integratie*. Er zijn verschillende kwalitatieve eigenschappen die we voor ogen kunnen hebben wanneer we het hebben over geometrische integratie: een geometrische structuur, een behoudswet (massa, energie, moment), een symmetrie (bvb. een herschaling), het asymptotisch gedrag, ordening van oplossingen, enz.

De eerste ideeën rond geometrische integratie groeiden bij de integratie van Hamiltoniaanse stelsels gewone differentiaalvergelijkingen. Deze stelsels hebben belangrijke toepassingen in mechanica, moleculaire dynamica en optica en de analyse van de oplossingen was, reeds sedert Hamilton's eerste publicaties, gebaseerd op de geometrische structuur van de vergelijkingen. In de rest van dit hoofdstuk zullen we ons tot deze subklasse van problemen beperken.

12.2 Hamiltoniaanse stelsels

12.2.1 Inleiding

In de mechanica kennen we voor een systeem met veralgemeende coördinaten $q = (q_1, \dots, q_d) \in \mathbb{R}^d$ en Lagrangiaan $L = T - V$ (met $T = T(q, \dot{q})$ de kinetische energie en $V = V(q)$ de

potentiële energie) de vergelijkingen van Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, d. \quad (12.1)$$

Hamilton schreef deze vergelijkingen in een vorm die een betere geometrische analyse toelieten. Daartoe voerde hij de veralgemeende toegevoegde momenten $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ en de Hamiltoniaan

$$H(p, q) = p^T \dot{q} - L(q, \dot{q}) \quad (12.2)$$

in waarmee hij kon aantonen dat (12.1) equivalent is met het stelsel

$$\begin{cases} \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \end{cases} \quad i = 1, \dots, d. \quad (12.3)$$

Dit stelsel van $2d$ eerste orde vergelijkingen, ook de bewegingsvergelijkingen van Hamilton genoemd, wordt de canonieke vorm van het Hamiltoniaans stelsel genoemd. Hierbij stelt d het aantal vrijheidsgraden van het systeem voor en we veronderstellen dat H voldoende afleidbaar (minstens \mathcal{C}^2 zodat het rechterlid van (12.3) minstens \mathcal{C}^1 is, zodat we standaardstellingen over bestaan en uniciteit van oplossingen kunnen toepassen) is over een gebied Ω , die we de *faseruimte* noemen, van de georiënteerde ruimte \mathbb{R}^{2d} .

Stellen we $y = (p, q)$, dan kan (12.3) herschreven worden als

$$\frac{dy}{dt} = J^{-1} \nabla H,$$

waarbij ∇ de gradiëntoperator

$$\left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \frac{\partial}{\partial p_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_d}, \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_d} \right)$$

voorstelt en waarbij J een notatie is voor de scheefsymmetrische $2d \times 2d$ matrix

$$J = \begin{pmatrix} O & I \\ -I & O \end{pmatrix}.$$

Hierin staan I en O respectievelijk voor de $d \times d$ eenheids- en nulmatrix. Men rekent verder na dat $J^{-1} = J^T = -J$.

Verder kan hierbij opgemerkt worden dat, als men de \dot{q}_i elimineert in de uitdrukking (12.2), $H = T + V$, zodat H de totale energie van het systeem voorstelt en bij conservatieve systemen blijft de energie, dus ook de Hamiltoniaan, behouden. Immers, leiden we H af naar t langs een oplossing van (12.3), dan vinden we

$$\frac{d}{dt} H(y(t)) = (\nabla H)^T \frac{dy(t)}{dt} = (\nabla H)^T J^{-1} \dot{y} = 0.$$

Opmerking 12.2.1

De Hamiltoniaan is niet noodzakelijk t onafhankelijk. De meest algemene vorm is $H = H(p, q, t)$. □

12.2.2 Voorbeeld : de een-dimensionale harmonische oscillator

We beschrijven de uitwijking t.o.v. de evenwichtsstand van het uiteinde van een veer waarvan het andere uiteinde vast is. Mits een gepaste keuze van het coördinatenstelsel geldt

$$H = \frac{p_1^2}{2} + \frac{k^2}{2} q_1^2.$$

Schrijven we in het vervolg $p_1 = p$ en $q_1 = q$, dan zijn de bewegingsvergelijkingen gegeven door

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -k^2 q \\ \frac{dq}{dt} = p \end{cases}$$

De algemeenste oplossing van dit probleem is

$$\begin{cases} q(t) = C \sin(kt + \varphi) \\ p(t) = kC \cos(kt + \varphi) \end{cases}$$

waarbij C en φ arbitraire integratieconstanten zijn. Stellen $(p(0), q(0))$ de beginwaarden voor op $t = 0$, dan vinden we makkelijk

$$\begin{bmatrix} p(t) \\ q(t) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \cos kt & -k \sin kt \\ k^{-1} \sin kt & \cos kt \end{pmatrix} \begin{bmatrix} p(0) \\ q(0) \end{bmatrix} \quad (12.4)$$

Als we de parametrische curven $(p(t), q(t))$ voorstellen in de (p, q) faseruimte, dan vinden we de ellipsen

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2} + \frac{k^2}{2} q^2 = \text{constant}.$$

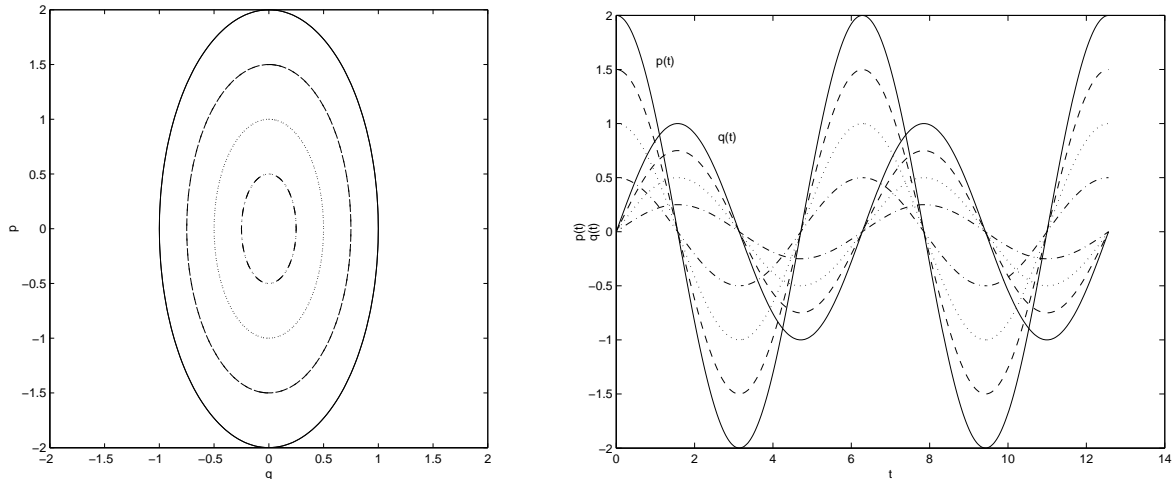
Dit wordt geïllustreerd in Figuur 12.1 voor $k = 2$.

12.2.3 Symplecticiteit

Naast het behoud van de Hamiltoniaan is de symplecticiteit van de flow belangrijk. Symplecticiteit is een karakterisatie van Hamiltoniaanse systemen in termen van hun oplossing, niet in termen van de vorm van de differentiaalvergelijking. Allereerst moeten we daartoe de oplossingsoperator $\phi_H(t, t_0)$ invoeren. Zijn t en t_0 twee reële getallen in het tijdsdomein, dan stelt $\phi_H(t, t_0)$ een transformatie voor van de faseruimte Ω in zichzelf en wel zo dat voor elke (p_0, q_0) in Ω geldt dat

$$(p, q) = \phi_H(t, t_0)(p_0, q_0)$$

de oplossing op tijd t voorstelt van (12.3), dat op tijdstip t_0 de beginwaarden (p_0, q_0) heeft. Laat men in deze uitdrukking t variëren en worden t_0 en (p_0, q_0) vastgehouden, dan kan men de oplossing volgen van (12.3) met beginwaarde (p_0, q_0) . Wat wij nu echter zullen bekijken



Figuur 12.1: Links zien we periodieke banen in de faseruimte voor het geval $k = 2$. In de rechterfiguur zien we voor elk van die banen (let op de lijnstijl) de p en q componenten in functie van de tijd.

is wat gebeurt als t en t_0 vastgehouden worden en (p_0, q_0) varieert, m.a.w. we bekijken een transformatie van Ω in zichzelf.

Het getransformeerde punt $\phi_H(t, t_0)(p_0, q_0)$ is alleen gedefinieerd als de oplossing van (12.3) met beginwaarde (p_0, q_0) op tijd t_0 bestaat op tijdstip t . Dit is niet noodzakelijk het geval als $|t - t_0|$ groot is : oplossingen kunnen de rand van Ω bereiken of naar ∞ gaan in een eindige tijd en alleen bestaan voor begrensde tijdsintervallen. Voor gegeven t en t_0 kan het domein van $\phi_H(t, t_0)$ strikt kleiner zijn dan Ω .

Voorbeeld 12.2.1

Voor het autonome probleem met $H = p q^2$ zijn de bewegingsvergelijkingen

$$\dot{p} = -2 p q, \quad \dot{q} = q^2,$$

en we vinden achtereenvolgens door scheiding van veranderlijken dat

- (i) $q(t) = \frac{q_0}{1 - q_0(t - t_0)}$
- (ii) $p(t) = p_0(1 - q_0(t - t_0))^2$.

Voor gegeven t en t_0 met $t - t_0 > 0$ geldt dus dat het domein van $\phi_H(t, t_0)$ gegeven wordt door

$$\{(p_0, q_0) \mid q_0 < (t - t_0)^{-1}\},$$

en dit ondanks het feit dat H gedefinieerd en glad is in de volledige faseruime \mathbb{R}^2 . □

De operator $\phi_H(t, t_0)$ voldoet voor t_0, t_1 en t_2 aan de vergelijking

$$\phi_H(t_2, t_0) = \phi_H(t_2, t_1) \phi_H(t_1, t_0).$$

Voorbeeld 12.2.2

Nemen we het voorbeeld van daarnet, en kijken we bvb. naar de p -veranderlijke, dan geldt

$$\begin{aligned} p(t_2) &= p(t_1) (1 - q(t_1) (t_2 - t_1))^2 \\ &= p_0 (1 - q_0 (t_1 - t_0))^2 \left(1 - \frac{q_0}{1 - q_0 (t_1 - t_0)} (t_2 - t_1)\right)^2 \\ &= p(t_0) (1 - q(t_0) (t_2 - t_0))^2. \end{aligned}$$

□

Voor autonome Hamiltoniaanse systemen hangt $\phi_H(t, t_0)$ alleen af van het verschil $t - t_0$ (kijk bijvoorbeeld naar de oplossing van (12.2.1)) en dus kunnen we beter $\phi_{t-t_0, H}$ schrijven i.p.v. $\phi_H(t, t_0)$. De transformatie in de faseruimte die bepaald wordt door $\phi_{s, H}$ wordt de s -flow van het systeem genoemd. Zo bekomen we de semigroep-eigenschap

$$\phi_{t+s, H} = \phi_{t, H} \phi_{s, H}.$$

12.2.4 Behoud van oppervlakte bij Hamiltoniaanse systemen met één vrijheidsgraad

Voor elke reële t is de transformatie $\phi_H(t, t_0)$ in Ω oppervlakte-behoudend in die zin dat voor elke begrensde deeldomein D van Ω waarvoor $\phi_H(t, t_0)(D)$ gedefinieerd is, de oppervlakte van D en $\phi_H(t, t_0)(D)$ dezelfde zijn. Het bewijs hiervan steunt op de stelling van Liouville en de opmerking dat het vectorveld in de faseruimte divergentie-vrij is :

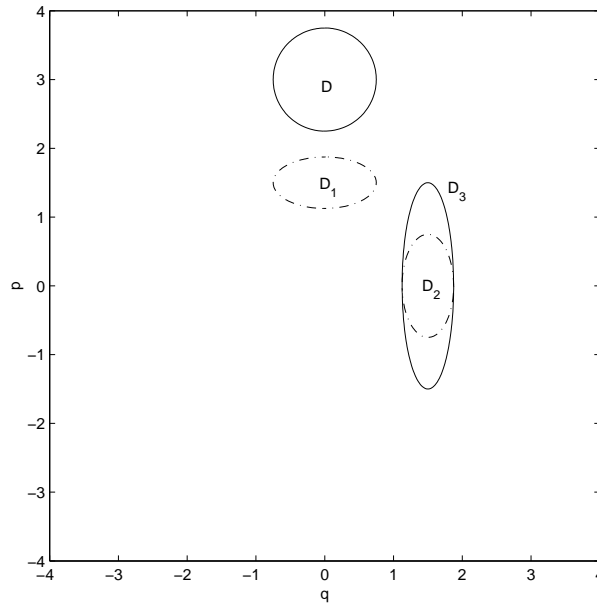
$$\operatorname{div} f = \frac{\partial}{\partial p} \left(-\frac{\partial H}{\partial q} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right) = 0.$$

Voorbeeld 12.2.3

We bekijken opnieuw de harmonische oscillator. De algemeenste oplossing werd gegeven door (12.4). De matrix die hierin optreedt kan gefactoriseerd worden als

$$\begin{pmatrix} \cos k t & -k \sin k t \\ k^{-1} \sin k t & \cos k t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos k t & -\sin k t \\ \sin k t & \cos k t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

We bekijken nu het rechterlid. De meest rechtse matrix verkleint de oppervlakte met een factor k , de middelste behoudt de oppervlakte en de meest linkse vergroot de oppervlakte dan weer met de factor k . Om in te zien wat er precies gebeurt, bekijken we Figuur 12.2. Hierin is $k = 2$ en $t = \frac{\pi}{2}$. Het cirkelvormig gebied D wordt omgezet door de meest rechtse matrix in D_1 . De middelste matrix roteert D_1 in D_2 en de meest linkse matrix zet D_2 om in D_3 . De getransformeerde ellips D_3 heeft dezelfde oppervlakte (en oriëntatie) als D . □



Figuur 12.2: De oppervlakte van D blijft bij omzetting in D_3 behouden.

Het oppervlakte-behoudend karakter van de oplossingsoperator heeft heel belangrijke gevolgen voor het gedrag van de oplossingen wanneer heel lange integratietijden worden bekeken. In de studie van dynamische systemen is men bijvoorbeeld geïnteresseerd in de studie van equilibria. Voor een autonoom stelsel $y' = f(y)$ is y_0 een equilibrium a.s.a. $f(y_0) = 0$. Nu bestaan er verschillende soorten equilibria : *sinks* (stabiele), *sources* (instabiele) of *saddles* (instabiele). Welnu, omdat in de omgeving van sinks de flow samentrekt (en dus oppervlakte verkleint) en in de omgeving van sources de flow expandeert (en dus oppervlakte vergroot) kunnen geen equilibria van dit soort aangetroffen worden in oplossingen van Hamiltoniaanse problemen.

Soortgelijke argumenten kunnen aangehaald worden i.v.m. periodieke oplossingen. Voor niet-Hamiltoniaanse problemen zijn de periodieke banen meestal stabiele of onstabiele limietcycli. Maar nabij dergelijke cycli wordt de oppervlakte verkleind of vergroot. Derhalve kunnen er geen limietcycli bestaan bij Hamiltoniaanse problemen. Anderzijds, bij Hamiltoniaanse systemen worden periodieke banen meestal omringd door andere periodieke banen, een situatie die zich meestal niet voordoet bij niet-Hamiltoniaanse problemen.

Alle eigenschappen die specifiek zijn aan Hamiltoniaanse systemen kunnen afgeleid worden uit het behoud van oppervlakte. Immers, men kan aantonen dat het oppervlakte-behoudend karakter van de oplossingsoperator enkel en alleen geldt voor Hamiltoniaanse systemen. Preciezer geldt het volgende : is Ω enkelvoudig samenhangend (m.a.w. er zijn geen gaten in) en is

$$\frac{dp}{dt} = f(p, q, t), \quad \frac{dq}{dt} = g(p, q, t),$$

een glad stelsel differentiaalvergelijkingen waarvan de oplossingsoperator de oppervlakte behoudt, dan is dit stelsel Hamiltoniaans, m.a.w. er bestaat een functie H waarvoor

$$f = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad \text{en} \quad g = \frac{\partial H}{\partial p}.$$

Het behoud van oppervlakte kan ook uitgedrukt worden in termen van jacobianen. Zij $(p^*, q^*) = \psi(p, q)$ een C^1 transformatie die Ω omzet in Ω^* . Dan is de oppervlakte van Ω^* gegeven door

$$\iint_{\Omega^*} dp^* dq^*,$$

en de oppervlakte van Ω door

$$\iint_{\Omega} dp dq$$

maar anderzijds geldt bij overgang op het ander stel coördinaten

$$\iint_{\Omega^*} dp^* dq^* = \iint_{\Omega} |\psi'| dp dq$$

waarbij

$$\psi' = \begin{pmatrix} \frac{\partial p^*}{\partial p} & \frac{\partial p^*}{\partial q} \\ \frac{\partial q^*}{\partial p} & \frac{\partial q^*}{\partial q} \end{pmatrix}$$

de jacobiaan voorstelt. Aldus is behoud van oppervlakte en oriëntatie equivalent met het identisch 1 zijn van de determinant van de jacobiaan ψ' . Dit betekent

$$\forall (p, q) \in \Omega : \frac{\partial p^*}{\partial p} \frac{\partial q^*}{\partial q} - \frac{\partial p^*}{\partial q} \frac{\partial q^*}{\partial p} = 1$$

en men kan makkelijk narekenen dat dit equivalent is met

$$\psi'^T J \psi' = J,$$

of voluit

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p^*}{\partial p} & \frac{\partial q^*}{\partial p} \\ \frac{\partial p^*}{\partial q} & \frac{\partial q^*}{\partial q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial p^*}{\partial p} & \frac{\partial p^*}{\partial q} \\ \frac{\partial q^*}{\partial p} & \frac{\partial q^*}{\partial q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

12.2.5 Symplectische transformaties

We beschouwen nu het geval waarbij $d > 1$. De vraag is dan of er iets bestaat wat analoog is aan oppervlakte dat bij Hamiltoniaanse oplossingsoperatoren behouden blijft. Wel, het $2d$ dimensionale volume lijkt het equivalent en dit wordt inderdaad behouden. Maar het is wel niet helemaal wat we willen want er blijken ook niet-Hamiltoniaanse systemen te bestaan waarbij dat volume behouden blijft. Willen we een correcte karakterisatie, dan moeten we het volgende beschouwen. Noem D_i , met $i = 1, \dots, d$, de georiënteerde oppervlakte van de projecties op de d tweedimensionale vlakken van de veranderlijken (p_i, q_i) en noem $m(D)$ de som van de oppervlaktes van deze projecties. Dan kan men aantonen dat $m(\psi_H(t, t_0)(D)) = m(D)$.

Transformaties die deze eigenschap bewaren worden *symplectisch* of *canonisch* genoemd. In de klassieke literatuur wordt het behoud van $m(D)$ ook de Poincaré-integraalinvariant genoemd.

De voorwaarde om uit te maken of een transformatie in het vlak symplectisch is kan veralgemeend worden tot

$$\psi'^T J \psi' = J \tag{12.5}$$

waarbij nu

$$\psi' = \begin{pmatrix} \frac{\partial p^*}{\partial p} & \frac{\partial p^*}{\partial q} \\ \frac{\partial q^*}{\partial p} & \frac{\partial q^*}{\partial q} \end{pmatrix}.$$

We herhalen tot slot nog eens dat de correcte veralgemening van behoud van oppervlakte niet zozeer ligt bij het behoud van volume, maar wel bij het symplectisch-zijn : symplectisch-zijn karakteriseert Hamiltoniaanse oplossingsoperatoren terwijl behoud van volume een veel zwakkere eigenschap is die ook gedeeld wordt door sommige niet-Hamiltoniaanse systemen.

12.2.6 Symplectische numerieke methoden

Wordt een probleem numeriek opgelost, dan wordt de oplossingsoperator ϕ vervangen door een discrete operator ψ_h . Als we willen dat ψ_h de Hamiltoniaanse eigenschappen van ϕ behoudt, dan moet ψ_h ook een symplectische transformatie definiëren. De meeste numerieke integrators vervangen ϕ echter door een niet-symplectische afbeelding ψ_h .

Om het probleem te illustreren, beschouwen we opnieuw het probleem van de harmonische oscillator en we bekijken de inwerking van de volgende methoden:

- de Euler methode

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h k^2 \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

- de achterwaartse Euler methode

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + h^2 k^2} \begin{pmatrix} 1 & -h k^2 \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

- de impliciete middelpuntregel

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \frac{h^2 k^2}{4}} \begin{pmatrix} 1 - \frac{h^2 k^2}{4} & -h k^2 \\ h & 1 - \frac{h^2 k^2}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

- de SE-methode

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h k^2 \\ h & 1 - h^2 k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \tag{12.6}$$

De eerste drie methoden zijn van het Runge-Kutta type. De laatste methode is een zogenaamde PRK methode.

We nemen eens het voorbeeld waarbij $k = 1$. We passen de vier methoden toe met staplengte $h = \frac{2\pi}{20}$ en voeren 20 stappen uit. De initiële cirkel (gemarkeerd met 0) wordt in elke stap omgezet in een nieuwe gesloten kromme. Op de tekening zien we de resultaten na 4, 8, 12 en 20 stappen. Is de flow van de numerieke oplossing exact, dan valt de laatste gesloten kromme precies samen met de begincirkel.

Voor de Euler-methode zien we dat de cirkels alsmaar groeien, terwijl de achterwaartse Euler-methode cirkels levert die alsmaar kleiner worden. De twee andere methoden schijnen de oppervlakte te behouden. Het zijn inderdaad symplectische numerieke methoden, want ze beschrijven symplectische transformaties, zoals die gedefinieerd worden in (12.5). Men kan inderdaad narekenen dat (ψ' is de matrix die de omzetting van (p_n, q_n) in (p_{n+1}, q_{n+1}) beschrijft)

$$\left[\frac{1}{1 + \frac{h^2 k^2}{4}} \begin{pmatrix} 1 - \frac{h^2 k^2}{4} & -h k^2 \\ h & 1 - \frac{h^2 k^2}{4} \end{pmatrix} \right]^T J \left[\frac{1}{1 + \frac{h^2 k^2}{4}} \begin{pmatrix} 1 - \frac{h^2 k^2}{4} & -h k^2 \\ h & 1 - \frac{h^2 k^2}{4} \end{pmatrix} \right] = J.$$

en

$$\begin{pmatrix} 1 & -h k^2 \\ h & 1 - h^2 k^2 \end{pmatrix}^T J \begin{pmatrix} 1 & -h k^2 \\ h & 1 - h^2 k^2 \end{pmatrix} = J.$$

De Euler-methode en de achterwaartse Euler methode daarentegen zijn niet-symplectische methoden. Dat volgt reeds uit het feit dat de determinant van de transformatie verschillend van 1.

Behalve de oppervlakte kunnen we ook de energie in acht nemen. Voor de analytische oplossing weten we dat $H = \frac{p^2}{2} + \frac{k^2 q^2}{2}$ een constante is, m.a.w. de curven $p^2 + k^2 q^2 = C$ met C een constante beschrijven periodieke banen. Voor de Euler methode vinden we

$$p_{n+1}^2 + k^2 q_{n+1}^2 = (1 + h^2 k^2) (p_n^2 + k^2 q_n^2),$$

wat betekent dat periodieke banen onder de Euler methode niet behouden blijven. Analoog vindt men voor de achterwaartse Euler-methoden dat

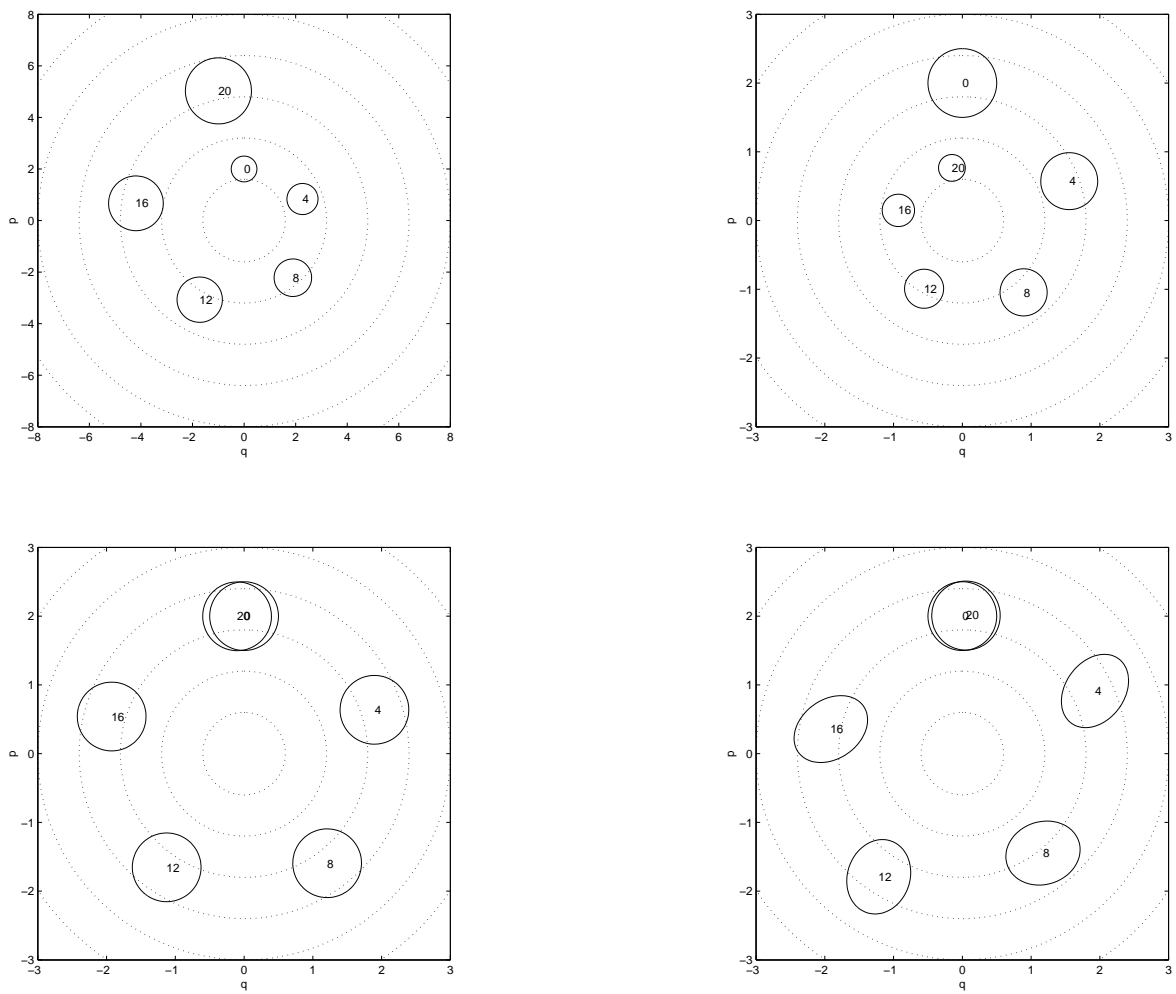
$$p_{n+1}^2 + k^2 q_{n+1}^2 = \frac{1}{1 + h^2 k^2} (p_n^2 + k^2 q_n^2).$$

Voor de impliciete middelpunt methode geldt anderzijds

$$p_{n+1}^2 + k^2 q_{n+1}^2 = p_n^2 + k^2 q_n^2,$$

wat aangeeft dat de Hamiltoniaan behouden blijft. Dit is een eigenschap die gedeeld wordt met elke symplectische Runge-Kutta methode. De methode SE deelt deze eigenschap echter niet. Uit (12.6) volgt namelijk

$$\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - h^2 k^2 & h k^2 \\ -h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix}$$



Figuur 12.3: De Euler methode (linksboven) en de achterwaartse Euler methode (rechtsboven) zijn niet symplectisch, want de oppervlakte binnen elke kromme is niet constant. De impliciete middelpunt methode (linksonder) en de SE methode (rechtsonder) zijn wel symplectisch.

zodat de curve $p_n^2 + k^2 q_n^2 = C$ omgezet wordt in

$$\begin{aligned} C &= p_n^2 + k^2 q_n^2 \\ &= ((1 - h^2 k^2) p_{n+1} + h k^2 q_{n+1})^2 + k^2 (-h p_{n+1} + q_{n+1})^2 \\ &= (1 - h^2 k^2 + h^4 k^4) p_{n+1}^2 - 2 h^3 k^4 p_{n+1} q_{n+1} + k^2 (1 + h^2) q_{n+1}^2. \end{aligned}$$

Symplecticiteit betekent dus niet het behoud van de Hamiltoniaan. Wat betekent symplecticiteit dan wel in de context van de Hamiltoniaan? Wel, men kan narekenen dat in dit voorbeeld

$$p_n^2 + k^2 q_n^2 - h k^2 p_n q_n = p_{n+1}^2 + k^2 q_{n+1}^2 - h k^2 p_{n+1} q_{n+1}.$$

Er zijn dus periodieke banen van de vorm $p^2 + q^2 - h k^2 p q = C$. Dit betekent dat een gewijzigde Hamiltoniaan \hat{H} , gegeven door

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2} + k^2 \frac{q^2}{2} - \frac{1}{2} h p q,$$

behouden blijft. Merk op dat \hat{H} verschilt van H in termen van $\mathcal{O}(h^1)$, waarbij 1 de orde is van de SE methode. Het is deze eigenschap die typisch is voor symplectische methoden: over het algemeen zal een symplectische methode van orde p niet de Hamiltoniaan H behouden, maar wel $\hat{H} = H + \mathcal{O}(h^p)$. In deze context is de *backward error analysis* heel belangrijk.

Tot slot willen we de vraag beantwoorden: zijn er symplectische methoden? Baanbrekend werk op dit gebied is verricht door verschillende onafhankelijke onderzoekers (o.a. Sans-Serna, Lasagni en Suris). Hun resultaat is het volgende.

Stelling 12.2.1 *Een Runge-Kutta methode is symplectisch a.s.a. de coëfficiënten voldoen aan*

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, s.$$

□

Opmerkelijk aan dit resultaat is dat symplectische Runge-Kutta methoden noodzakelijkerwijs (stel $i = j$ in de bovenstaande uitdrukking) impliciet zijn. Tevens kan men aantonen dat symplectische RK methoden noodzakelijkerwijs symmetrisch zijn. Wellicht de meest bekende klasse van RK methoden is de klasse van Gaussische methoden.

Omdat impliciete methoden te duur zijn heeft men gezocht naar alternatieve methoden. Die oplossing is er in het geval de Hamiltoniaan separabel is, m.a.w. als $H(p, q) = T(p) + U(q)$. De structuur van het probleem, nl.

$$\begin{cases} \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial U}{\partial q_i} \\ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial T}{\partial p_i} \end{cases}$$

heeft geleid tot de studie van gepartitioneerde Runge-Kutta methoden (PRK) methoden. Bij een PRK methode zal men sommige componenten (in dit geval alle p -componenten) numeriek

integreren met een bepaalde s -traps RK methode en de andere componenten met een andere s -traps RK methode. Nemen we $d = 1$ (waarbij we de veranderlijken opnieuw noteren als p en q i.p.v. als p_1 en q_1 , dan heeft men voor het geschetste probleem

$$\begin{aligned}
 P_i &= p_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j & Q_i &= q_n + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} l_j \\
 p_{n+1} &= p_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i & q_{n+1} &= q_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i l_i \\
 k_i &= -\frac{\partial U}{\partial q}(Q_i) & l_i &= \frac{\partial T}{\partial p}(P_i)
 \end{aligned} \tag{12.7}$$

Hiervoor geldt de volgende stelling.

Stelling 12.2.2 *Als de coëfficiënten voldoen aan*

$$b_i \hat{a}_{ij} + \hat{b}_j a_{ji} - b_i \hat{b}_j = 0, \quad i, j = 1, \dots, s,$$

dan is de methode (12.7) symplectisch voor separabele Hamiltonianen. □

Opmerking 12.2.2

Toch ook een woordje over de ordevoorwaarden voor PRK methoden. Neem een willekeurige RK voorwaarde van (bijvoorbeeld) orde 4, nl. $\sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{jk} c_k = \frac{1}{24}$. Vertalen we deze voorwaarde naar PRK, dan moet gelden

$$\sum_{i,j,k=1}^s b_i \hat{a}_{ij} a_{jk} \hat{c}_k = \frac{1}{24} \quad \text{en} \quad \sum_{i,j,k=1}^s \hat{b}_i a_{ij} \hat{a}_{jk} c_k = \frac{1}{24}.$$

Op deze wijze wordt elke RK voorwaarde vertaald in 2 PRK voorwaarden. □

Separabele Hamiltonianen maken de constructie van expliciete symplectische methoden mogelijk. Beschouw namelijk het geval waarbij de ene methode DIRK is ($a_{ij} = 0$ voor $i < j$) en de andere expliciet is ($\hat{a}_{ij} = 0$ voor $i \leq j$). De voorwaarde voor symplecticiteit is dan

$$\begin{cases} a_{ij} = b_j & \text{voor } i \geq j \\ \hat{a}_{ij} = \hat{b}_j & \text{voor } i > j \end{cases}$$

De PRK methode ziet er derhalve uit als

$$\begin{array}{c|cccccc}
 b_1 & & & & & & \\
 b_1 & b_2 & & & & & \\
 b_1 & b_2 & b_3 & & & & \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & & \\
 b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s & & \\
 \hline
 b_1 & b_2 & \dots & b_{s-1} & b_s & & \\
 \end{array}
 \quad
 \begin{array}{c|cccccc}
 0 & & & & & & \\
 \hat{b}_1 & 0 & & & & & \\
 \hat{b}_1 & \hat{b}_2 & 0 & & & & \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & & \\
 \hat{b}_1 & \hat{b}_2 & \dots & \hat{b}_{s-1} & 0 & & \\
 \hline
 \hat{b}_1 & \hat{b}_2 & \dots & \hat{b}_{s-1} & \hat{b}_s & &
 \end{array}$$

Een dergelijk schema wordt dus gekenmerkt door enkel en alleen de elementen van de b en \hat{b} vectoren. Deze methode is expliciet en dus vrij makkelijk te implementeren :

$$P_0 = p_n, \quad Q_1 = q_n$$

for $i := 1$ to s do

$$P_i := P_{i-1} - h b_i \frac{\partial U}{\partial q}(Q_i)$$

$$Q_{i+1} := Q_i + h \hat{b}_i \frac{\partial T}{\partial p}(P_i)$$

$$p_{n+1} = P_s, \quad q_{n+1} = Q_{s+1}$$

Kiezen we in het bijzonder de impliciete Euler methode ($b_1 = 1$) en de expliciete Euler methode ($\hat{b}_1 = 1$), dan vinden we

$$p_{n+1} = p_n - h \frac{\partial U}{\partial q}(q_n) \quad q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial T}{\partial p}(p_{n+1}).$$

Deze methode wordt de *symplectische Euler methode* genoemd.

Voorbeeld 12.2.4

Toegepast op de harmonische oscillator levert deze SE methode

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n - h k^2 q_n \\ q_{n+1} = q_n + h p_{n+1} \end{cases}$$

waaruit (12.6) volgt. □

Vanzelfsprekend kunnen de rollen van p en q ook omgewisseld worden en men bekomt dan

$$q_1 = q_0 + h \frac{\partial T}{\partial p}(p_0) \quad p_1 = p_0 - h \frac{\partial U}{\partial q}(q_1),$$

wat ook symplectisch is.