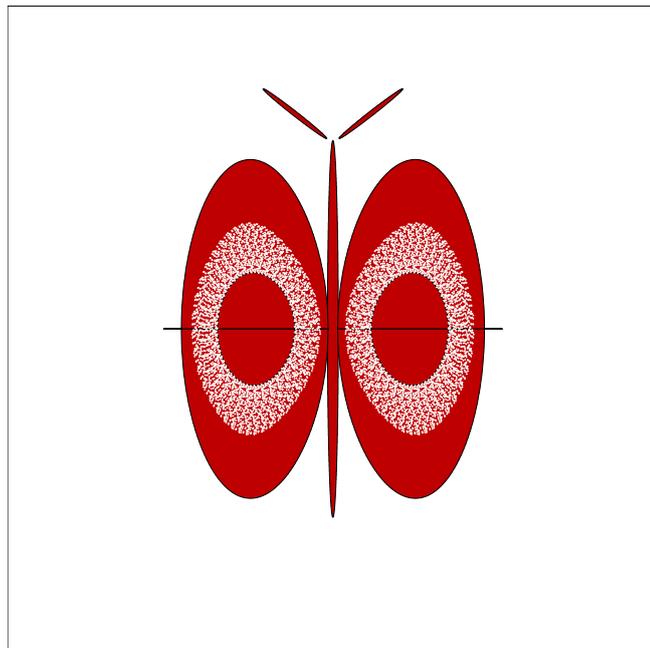


Kompodium zur Lehrveranstaltung

Numerische Verfahren für Differentialgleichungen I

**Strukturerhaltende Algorithmen
für gewöhnliche Differentialgleichungen**

Wintersemester 2012/13



Mechthild Thalhammer

Nach dem Buch

**Christian Lubich, Ernst Hairer, Gerhard Wanner: Geometric Numerical Integration –
Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations (Springer, 2006)**

Das vorliegende Kompendium faßt die im Rahmen der zweistündigen Vorlesung **Numerische Verfahren für Differentialgleichungen I – Strukturerhaltende Algorithmen für gewöhnliche Differentialgleichungen** im Wintersemester 2012/13 an der Universität Innsbruck besprochenen Themen zusammen. Die Inhalte des Kompendiums entsprechen weitgehend den ersten Kapiteln eines Buches von Christian Lubich, Ernst Hairer und Gerhard Wanner mit dem Titel *Geometric Numerical Integration – Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, erschienen im Springer-Verlag (2. Edition, 2006).

Graphik. Die Musterung des Schmetterlings entsteht bei Anwendung eines expliziten Runge-Kutta Verfahrens zur numerischen Lösung des Hamiltonsystems

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) = \left(\frac{1}{6} p(t) - 1\right) \sin(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) = 2 p(t) + \frac{1}{6} \cos(q(t)), \end{cases}$$

mit zugehöriger Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p, q) = p^2 + \left(\frac{1}{6} p - 1\right) \cos q.$$

Inhaltsverzeichnis

1	Numerische Verfahren für Differentialgleichungen	4
1.1	Erhaltungsgrößen für gewöhnliche Differentialgleichungen	5
1.2	Einfache numerische Verfahren	8
2	Anwendungsbeispiele und erste numerische Versuche	14
2.1	Lotka–Volterra Modell	15
2.2	Mathematisches Pendel	18
2.3	Zweikörperproblem (Keplerproblem)	20
2.4	Mehrkörperproblem	26
3	Numerische Verfahrensklassen	29
3.1	Runge–Kutta-Verfahren und Kollokationsverfahren	30
3.1.1	Runge–Kutta-Verfahren	31
3.1.2	Kollokationsverfahren	35
3.1.3	Unstetige Kollokationsverfahren	41
3.1.4	Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren	46
3.1.5	Nyström-Verfahren	49

1 Numerische Verfahren für Differentialgleichungen

Inhalt.

- Grundlagen zu gewöhnlichen Differentialgleichungen
 - Erhaltungsgrößen
 - Hamiltonsysteme
- Grundlagen zu numerischen Verfahren
 - Erste einfache Einschrittverfahren

1.1 Erhaltungsgrößen für gewöhnliche Differentialgleichungen

Differentialgleichung. Im Folgenden betrachten wir ein autonomes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen (kurz **autonome Differentialgleichung**) für eine zeitabhängige Funktion $y: [0, T] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d: t \mapsto y(t)$

$$\frac{d}{dt} y(t) = f(y(t)) \quad (1)$$

mit definierender Funktion (**Vektorfeld**) $f: D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d: z \mapsto f(z)$ und zugehörigem **Phasenraum** \mathbb{R}^d .

Bemerkung. Im Folgenden wird angenommen, daß die exakte Lösung von (1) für die betrachteten Anfangswerte über lange Zeiten hinweg existiert. In Hinblick auf die Anwendung von numerischen Verfahren hoher Ordnung wird außerdem vorausgesetzt, daß die definierende Funktion f und damit die exakte Lösung hinreichend oft differenzierbar sind.

Flußabbildung. Die zur Differentialgleichung (1) gehörige Flußabbildung (bzw. Lösungsoperator, kurz **Fluß**) zur Zeit $t \in [0, T]$ ordnet einem (zulässigen Element) des Phasenraumes $y_0 \in D \subset \mathbb{R}^d$ den Lösungswert zum Anfangswert $y(0) = y_0$ und Zeitpunkt t zu

$$\mathcal{E}(t, y_0) = \mathcal{E}_f(t, y_0) = y(t). \quad (2)$$

Variationsgleichung. Eine alternative Formulierung der Differentialgleichung (1) bei Hinzunahme der Anfangsbedingung $y(0) = y_0$ lautet

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}(t, y_0) = f(\mathcal{E}(t, y_0)).$$

Differentiation der Flußabbildung bezüglich des Anfangswertes y_0 führt auf eine nichtautonome lineare Differentialgleichung (**Variationsgleichung**) für $Y = \partial_{y_0} \mathcal{E}(\cdot, y_0): [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d}: t \mapsto Y(t)$

$$\frac{d}{dt} \partial_{y_0} \mathcal{E}(t, y_0) = f'(\mathcal{E}(t, y_0)) \partial_{y_0} \mathcal{E}(t, y_0) \quad \text{bzw.} \quad \frac{d}{dt} Y(t) = f'(y(t)) Y(t), \quad (3)$$

und Differentiation der Relation $\mathcal{E}(0, y_0) = y_0$ ergibt die Anfangsbedingung $\partial_{y_0} \mathcal{E}(0, y_0) = I$ (Einheitsmatrix) bzw. $Y(0) = I$.

Erhaltungsgrößen. Eine **Erhaltungsgröße** (bzw. Invariante) der Differentialgleichung (1) ist eine Funktion $\mathcal{I}: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit der folgende Eigenschaft für jede Lösung der Differentialgleichung

$$\mathcal{I}(y(t)) = \text{Const} \quad \text{für alle } t \in [0, T]. \quad (4)$$

Bemerkung. Wie allgemein üblich werden im Folgenden Doppelbezeichnungen für Elemente des euklidischen Raumes p, q und Funktionen $t \mapsto p(t), t \mapsto q(t)$ verwendet. Die partiellen Ableitungen einer Funktion $(p, q) \mapsto \mathcal{H}(p, q)$ werden mit $\partial_p \mathcal{H}, \partial_q \mathcal{H}$ (Angabe als Spalten) bezeichnet.

Hamiltonsysteme. Ein **Hamiltonsystem** ist ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen der speziellen Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)). \end{cases} \quad (5)$$

Dabei geben die Größen $q_1, \dots, q_m : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ die Koordinaten (Positionen im ℓ -dimensionalen Raum, m Freiheitsgrade) und $p_1, \dots, p_m : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^\ell$ die zugehörigen Momente (Impulse) an. Die zugehörige **Hamiltonfunktion** $\mathcal{H} : (\mathbb{R}^\ell)^m \times (\mathbb{R}^\ell)^m \rightarrow \mathbb{R} : (p, q) = (p_1, \dots, p_m, q_1, \dots, q_m) \mapsto \mathcal{H}(p, q)$ spiegelt die totale Energie des Systems wider.

Energieerhaltung bei Hamiltonsystemen. Bei Hamiltonsystemen ist die Hamiltonfunktion eine Erhaltungsgröße (bzw. **erstes Integral**).

Erklärung. Mittels Kettenregel und Einsetzen der Differentialgleichung folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{H}(p(t), q(t)) &= \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) \underbrace{\frac{d}{dt} p(t)}_{= -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t))} + \partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) \underbrace{\frac{d}{dt} q(t)}_{= \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t))} = 0, \end{aligned}$$

was zeigt, daß jede Lösung von (5) die Relation

$$\mathcal{H}(p(t), q(t)) = \mathcal{H}(p(0), q(0)) = \text{Const} \quad \text{für alle } t \in [0, T]$$

erfüllt. \diamond

Flächenerhaltung bei Hamiltonsystemen. Eine weitere Eigenschaft von Hamiltonsystemen der Dimension $d = 2$ (d.h. $m = \ell = 1$) ist die Flächenerhaltung bei Anwendung des Flusses.

Erklärung. Für eine Menge von Anfangswerten $K \subset \mathbb{R}^2$ ergibt eine Anwendung des Transformationsatzes für mehrdimensionale Integrale

$$\text{Fläche}(\mathcal{E}(t, K)) = \int_{\mathcal{E}(t, K)} 1 \, dy_0 = \int_K |\det \partial_{y_0} \mathcal{E}(t, y_0)| \, dy_0.$$

Um die Flächenerhaltung bei Hamiltonsystemen nachzuweisen, ist also zu zeigen, daß folgende Relation für $t \in [0, T]$ gilt

$$\begin{aligned} \text{Fläche}(\mathcal{E}(t, K)) &= \int_K |\det \partial_{y_0} \mathcal{E}(t, y_0)| \, dy_0 = \text{Fläche}(K) = \int_K 1 \, dx \\ \iff |\det Y(t)| &= |\det \partial_{y_0} \mathcal{E}(t, y_0)| = 1. \end{aligned}$$

Wegen $\det Y(0) = \det I = 1$ liegt die Vermutung $\det Y(t) = 1$ und insbesondere $\frac{d}{dt} \det Y(t) = 0$ für $t \in [0, T]$ nahe. Das Hamiltonsystem (5) ist von der Form (1) mit

$$y(t) = \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}, \quad f(y(t)) = \begin{pmatrix} -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) \\ \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) \end{pmatrix},$$

und weiters gilt

$$f'(y(t)) = \begin{pmatrix} -\partial_{pq} \mathcal{H}(p(t), q(t)) & -\partial_{qq} \mathcal{H}(p(t), q(t)) \\ \partial_{pp} \mathcal{H}(p(t), q(t)) & \partial_{pq} \mathcal{H}(p(t), q(t)) \end{pmatrix}.$$

Mittels des folgenden Ansatzes für die Ableitung des Flusses bezüglich des Anfangswertes

$$Y(t) = \begin{pmatrix} Y_{11}(t) & Y_{12}(t) \\ Y_{21}(t) & Y_{22}(t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$$

lautet die zugehörige Variationsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} Y(t) &= f'(y(t)) Y(t), \\ \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} Y_{11}(t) & \frac{d}{dt} Y_{12}(t) \\ \frac{d}{dt} Y_{21}(t) & \frac{d}{dt} Y_{22}(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -\partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) & -\partial_{qq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) \\ \partial_{pp}\mathcal{H}(p(t), q(t)) & \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{11}(t) & Y_{12}(t) \\ Y_{21}(t) & Y_{22}(t) \end{pmatrix} \\ \begin{cases} \frac{d}{dt} Y_{11}(t) = -\partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) - \partial_{qq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{21}(t), \\ \frac{d}{dt} Y_{12}(t) = -\partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{12}(t) - \partial_{qq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{22}(t), \\ \frac{d}{dt} Y_{21}(t) = \partial_{pp}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) + \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{21}(t), \\ \frac{d}{dt} Y_{22}(t) = \partial_{pp}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{12}(t) + \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{22}(t). \end{cases} \end{aligned}$$

Aus der kurzen Rechnung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \det Y(t) &= \frac{d}{dt} (Y_{11}(t) Y_{22}(t) - Y_{12}(t) Y_{21}(t)) \\ &= Y_{22}(t) \frac{d}{dt} Y_{11}(t) + Y_{11}(t) \frac{d}{dt} Y_{22}(t) - Y_{21}(t) \frac{d}{dt} Y_{12}(t) - Y_{12}(t) \frac{d}{dt} Y_{21}(t) \\ &= -\partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) Y_{22}(t) - \partial_{qq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{21}(t) Y_{22}(t) \\ &\quad + \partial_{pp}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) Y_{12}(t) + \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) Y_{22}(t) \\ &\quad + \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{12}(t) Y_{21}(t) + \partial_{qq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{21}(t) Y_{22}(t) \\ &\quad - \partial_{pp}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{11}(t) Y_{12}(t) - \partial_{pq}\mathcal{H}(p(t), q(t)) Y_{12}(t) Y_{21}(t) \\ &= 0 \end{aligned}$$

und der direkten Folgerung

$$\det Y(t) = \det Y(0) = \det I = 1$$

folgt die Behauptung. \diamond

Hamiltonsysteme spezieller Form. Falls die Hamiltonfunktion $\mathcal{H} : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : (p, q) \mapsto \mathcal{H}(p, q)$ die spezielle Form

$$\partial_p \mathcal{H}(p, q) = p, \quad \partial_q \mathcal{H}(p, q) = -f(q),$$

besitzt (d.h. $\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} p^2 - F(q)$), ergibt sich ein Hamiltonsystem der Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t), \end{cases} \quad (6)$$

welches äquivalent zur folgenden Differentialgleichung zweiter Ordnung ist

$$\frac{d^2}{dt^2} q(t) = f(q(t)). \quad (7)$$

1.2 Einfache numerische Verfahren

Einschrittverfahren. Ausgehend von einem Startwert $y_0 \approx y(0)$ werden bei **Einschrittverfahren** für Differentialgleichungen (1) numerische Approximationen an exakte Lösungswerte mittels einer Rekursion der Form

$$y_n = \Phi(h, y_{n-1}) = \Phi_f(h, y_{n-1}) \approx y(t_n) = y(nh), \quad 1 \leq n \leq N, \quad (8)$$

bestimmt, wobei $h > 0$ eine (geeignet gewählte) konstante Zeitschrittweite (bzw. Zeitinkrement) bezeichnet und $T = Nh$ gelte. Die numerische Flußabbildung (bzw. numerischer Lösungsoperator, kurz **numerischer Fluß**) stellt also eine Näherung an den exakten Fluß dar.

Stabilität und Ordnung. Das Einschrittverfahren (8) heißt **stabil**, wenn die N -fache Hintereinanderausführung¹ des numerischen Lösungsoperators für $N \rightarrow \infty$ bzw. $h = \frac{T}{N} \rightarrow 0$ beschränkt bleibt

$$\|\Phi^N(h, y_0)\| \leq \text{Const.} \quad (9)$$

Das Einschrittverfahren besitzt die **Konsistenzordnung** (lokale Konvergenzordnung) $p \geq 1$, falls für hinreichend reguläre Funktionen f und exakte Anfangswerte $y_0 = y(0)$ die Relation

$$y_1 - y(h) = \Phi(h, y(0)) - \mathcal{E}(h, y(0)) = \mathcal{O}(h^{p+1}) \quad \text{für } h \rightarrow 0$$

gilt. Um (globale) **Konvergenzordnung** $p \geq 1$ nachzuweisen, das heißt, die Gültigkeit einer Abschätzung der folgenden Form für hinreichend kleine Zeitschrittweiten $0 < h \leq h_0$

$$\|y_N - y(T)\| \leq \text{Const}(f, y_0, \Phi, T) h^p, \quad (10)$$

nützt man im Allgemeinen das Resultat

$$\text{Stabilität} + \text{Konsistenz} \implies \text{Konvergenz.}$$

Bemerkung. Da die mittels Standardtechniken erhaltenen Konvergenzabschätzungen (10) eine Konstante beinhaltet, die im Allgemeinen exponentiell mit der Endzeit T anwächst, verlieren diese im Zusammenhang mit **Langzeitsimulationen** ihre Aussagekraft. Wesentlich sind **geometrische Eigenschaften** der verwendeten numerischen Verfahren wie beispielsweise die Erhaltung von Invarianten der betrachteten Differentialgleichungen mit hoher Genauigkeit.

Explizites Eulerverfahren. Für die autonome Differentialgleichung (1) ist das **explizite Eulerverfahren**² der Ordnung $p = 1$ durch die Relation

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_n) \quad (11)$$

gegeben. Zur Berechnung des neuen Approximationswertes ist eine Auswertung der definierenden Funktion f am bekannten Approximationswert erforderlich.

Erklärung. Zur Bestimmung der Konsistenzordnung des expliziten Eulerverfahrens ist es ausreichend, den lokalen Fehler im ersten Zeitschritt zu untersuchen

$$y_1 - y(h) = y(0) + h f(y(0)) - y(h).$$

¹Kurzschreibweise $\Phi^2(h, y_0) = \Phi(h, \Phi(h, y_0))$ etc.

²Leonhard Euler (1707–171783)

Taylorreihenentwicklung des exakten Lösungswertes (Restglied in Integralform, $y' = \frac{d}{dt} y$ etc.) und Einsetzen der Differentialgleichung führt auf

$$y(h) = y(0) + \int_0^h y'(\tau) d\tau = y(0) + h y'(0) + \int_0^h \int_0^\tau y''(\sigma) d\sigma d\tau = y(0) + h f(y(0)) + \int_0^h \int_0^\tau y''(\sigma) d\sigma d\tau$$

und somit auf die gewünschte Relation

$$y_1 - y(h) = - \int_0^h \int_0^\tau y''(\sigma) d\sigma d\tau = \mathcal{O}(h^2),$$

sofern die zweite Ableitung der exakten Lösung $y'' = f'(y) y' = f'(y) f(y)$ auf dem betrachteten Zeitintervall beschränkt ist. \diamond

Implizites Eulerverfahren. Im Gegensatz zum expliziten Eulerverfahren beruht das **implizite Eulerverfahren** der Ordnung $p = 1$ auf der Auswertung von f am unbekanntem Approximationswert

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_{n+1}). \quad (12)$$

Zur numerischen Lösung des entstehenden nichtlinearen Gleichungssystems verwendet man im Allgemeinen das Newtonverfahren, etwa mit definierender Funktion und erster Ableitung (Jacobi-matrix)

$$F : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d : z \mapsto F(z) = z - y_n - h f(z),$$

$$F' : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d} : z \mapsto F'(z) = I - h f'(z),$$

bzw. eine Modifikation davon.

Erklärung. Ähnliche Überlegungen wie zuvor und eine zusätzliche Taylorreihenentwicklung von $f(y(h))$ zeigen

$$\begin{aligned} y_1 - y(h) &= y(0) + h f(y_1) - y(h) \\ &= y(0) + h \underbrace{f(y(0) + \mathcal{O}(h))}_{= f(y(0)) + \mathcal{O}(h)} - y(0) - h f(y(0)) - \int_0^h \int_0^\tau y''(\sigma) d\sigma d\tau \\ &= \mathcal{O}(h^2), \end{aligned}$$

was die gewünschte Relation ist. Benützt wird dabei bereits die Existenz und Beschränktheit der numerischen Approximation, die mittels des Satzes über implizite Funktionen nachgewiesen wird (vgl. Abschnitt 3.1.1). \diamond

Implizite Mittelpunktsregel. Die **implizite Mittelpunktsregel** der Ordnung $p = 2$ ist durch die Relation

$$y_{n+1} = y_n + h f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right) \quad (13)$$

gegeben und erfordert ebenfalls die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems beispielsweise mittels Newtonverfahren für die definierende Funktion

$$F : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d : z \mapsto F(z) = z - y_n - h f\left(\frac{y_n + z}{2}\right),$$

$$F' : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^{d \times d} : z \mapsto F'(z) = I - \frac{1}{2} h f'\left(\frac{y_n + z}{2}\right).$$

Die implizite Mittelpunktsregel ist ein Beispiel eines **symmetrischen Verfahrens**, das heißt, das Ersetzen $y_n \leftrightarrow y_{n+1}$ sowie $h \leftrightarrow -h$ ergibt das ursprüngliche Verfahren

$$y_{n+1} = y_n + h f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right) \leftrightarrow y_n = y_{n+1} - h f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right).$$

Erklärung. Ähnlich wie zuvor führen das mehrfache Einsetzen der Relation (13) und Taylorreihenentwicklungen

$$\begin{aligned} f\left(\frac{y(0)+y_1}{2}\right) &= f\left(\frac{y(0)+y(0)+h f\left(\frac{y(0)+y_1}{2}\right)}{2}\right) \\ &= f\left(y(0) + \frac{h}{2} f\left(\frac{y(0)+y_1}{2}\right)\right) \\ &= f\left(y(0) + \frac{h}{2} f\left(y(0) + \frac{h}{2} f\left(\frac{y(0)+y_1}{2}\right)\right)\right) \\ &= f\left(y(0) + \frac{h}{2} \underbrace{f\left(y(0) + \mathcal{O}(h)\right)}_{=f(y(0))+\mathcal{O}(h)}\right) \\ &= f\left(y(0) + \frac{h}{2} f(y(0)) + \mathcal{O}(h^2)\right) \\ &= f(y(0)) + \frac{h}{2} f'(y(0)) f(y(0)) + \mathcal{O}(h^2) \end{aligned}$$

schließlich auf die gewünschte Relation ($y'' = f'(y) f(y)$)

$$\begin{aligned} y_1 - y(h) &= y(0) + h f\left(\frac{y(0)+y_1}{2}\right) - y(h) \\ &= y(0) + h f(y(0)) + \frac{h^2}{2} f'(y(0)) f(y(0)) + \mathcal{O}(h^3) \\ &\quad - y(0) - h f(y(0)) - \frac{h^2}{2} f'(y(0)) f(y(0)) - \int_0^h \int_0^{\tau_1} \int_0^{\tau_2} y'''(\tau_3) d\tau_3 d\tau_2 d\tau_1 \\ &= \mathcal{O}(h^3). \end{aligned}$$

Benützt wird dabei wiederum die Existenz und Beschränktheit der numerischen Approximation (vgl. Abschnitt 3.1.1). \diamond

Symplektische Eulerverfahren. Für ein **partitioniertes Differentialgleichungssystem**

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(y(t), z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(y(t), z(t)), \end{cases} \quad (14)$$

führt die Anwendung des expliziten Eulerverfahrens für eine Variable und des impliziten Eulerverfahrens für die andere Variable auf die **symplektischen Eulerverfahren** (bzw. partitionierten Eulerverfahren) der Ordnung $p = 1$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(y_n, z_{n+1}), \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_n, z_{n+1}), \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(y_{n+1}, z_n), \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_{n+1}, z_n). \end{cases} \quad (15)$$

Falls $y : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{d_1}$ und $z : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{d_2}$ mit $d_1 + d_2 = d$ beruht das Newtonverfahren im ersten Fall auf der definierenden Funktion

$$\begin{aligned} F : D_2 \subset \mathbb{R}^{d_2} &\rightarrow \mathbb{R}^{d_2} : z_{n+1} \mapsto F(z_{n+1}) = z_{n+1} - z_n - h g(y_n, z_{n+1}), \\ F' : D_2 \subset \mathbb{R}^{d_2} &\rightarrow \mathbb{R}^{d_2 \times d_2} : z_{n+1} \mapsto F'(z_{n+1}) = I - h \partial_z g(y_n, z_{n+1}), \end{aligned}$$

wobei $\partial_z g$ die partielle Ableitung von g nach der zweiten Variable z bezeichnet, und im zweiten Fall ergibt sich

$$\begin{aligned} F : D_1 \subset \mathbb{R}^{d_1} &\rightarrow \mathbb{R}^{d_1} : y_{n+1} \mapsto F(y_{n+1}) = y_{n+1} - y_n - h f(y_{n+1}, z_n), \\ F' : D_1 \subset \mathbb{R}^{d_1} &\rightarrow \mathbb{R}^{d_1 \times d_1} : z_{n+1} \mapsto F'(y_{n+1}) = I - h \partial_y f(y_{n+1}, z_n). \end{aligned}$$

Symplektische Eulerverfahren für Hamiltonsysteme spezieller Form. Für Hamiltonsysteme der speziellen Form (6)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t), \end{cases}$$

vereinfachen sich die symplektischen Eulerverfahren (15) zu den **expliziten Verfahren**

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h p_n, \\ p_{n+1} = p_n + h f(q_{n+1}), \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \begin{cases} p_{n+1} = p_n + h f(q_n), \\ q_{n+1} = q_n + h p_{n+1}. \end{cases} \quad (16)$$

Störmer–Verlet–Verfahren. Für eine Differentialgleichung zweiter Ordnung (35)

$$\frac{d^2}{dt^2} q(t) = f(q(t))$$

ist es naheliegend, die zweite Ableitung durch symmetrische finite Differenzen zu approximieren, was auf das **Störmer–Verlet–Verfahren**³ (bzw. Leap-frog-Verfahren bzw. Strang-Splittingverfahren) der Ordnung $p = 2$ in der Formulierung als Zweischrittverfahren führt

$$q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1} = h^2 f(q_n).$$

Mittels der äquivalenten Formulierung von (35) als System erster Ordnung (6) (Hamiltonsystem spezieller Form)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t), \end{cases}$$

ergibt sich folgende Formulierung des Störmer–Verlet-Verfahrens als Einschrittverfahren

$$\begin{cases} p_{n+1/2} = p_n + \frac{h}{2} f(q_n), \\ q_{n+1} = q_n + h p_{n+1/2}, \\ p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2} f(q_{n+1}). \end{cases} \quad (17)$$

Da das Ersetzen $p_n \leftrightarrow p_{n+1}$ sowie $q_n \leftrightarrow q_{n+1}$ und $h \leftrightarrow -h$

$$\begin{cases} p_{n+1/2} = p_n + \frac{h}{2} f(q_n), \\ q_{n+1} = q_n + h p_{n+1/2}, \\ p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2} f(q_{n+1}). \end{cases} \quad \leftrightarrow \quad \begin{cases} \tilde{p}_{n+1/2} = p_{n+1} - \frac{h}{2} f(q_{n+1}), \\ q_n = q_{n+1} - h \tilde{p}_{n+1/2}, \\ p_n = \tilde{p}_{n+1/2} - \frac{h}{2} f(q_n), \end{cases}$$

auf das ursprüngliche Verfahren führt, ist das Störmer–Verlet-Verfahren symmetrisch.

Äquivalenz der Formulierungen als Einschrittverfahren bzw. Zweischrittverfahren. Einsetzen der Hilfsgröße $p_{n+1/2}$ in die zweite Relation von (17) ergibt

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

³Carl Störmer (1874–1957), Loup Verlet (1931)

Addition mit der Relation, die durch Einsetzen des Zeitinkrementes $-h$ entsteht

$$q_{n-1} = q_n - h p_n + \frac{h^2}{2} f(q_n),$$

führt auf die angegebene Zweitermrekursion für das Störmer–Verlet-Verfahren.

Zusammenhang mit Splittingverfahren. Das Störmer–Verlet-Verfahren stimmt mit dem Strang-Splittingverfahren überein. Bei **Splittingverfahren** wird die ursprüngliche Differentialgleichung in zwei Teilprobleme *gesplittet*. Für das spezielle Hamiltonsystem (6) ist die folgende Wahl der Teilprobleme naheliegend

$$\begin{aligned} & \begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t), \end{cases} \\ \text{Teilproblem 1: } & \begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = 0, \end{cases} & \text{Teilproblem 2: } & \begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = 0, \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t). \end{cases} \end{aligned}$$

Beim **Lie–Trotter-Splittingverfahren** der Ordnung $p = 1$ löst man ausgehend vom Startwert (p_n, q_n) zuerst das erste Teilproblem zum Zeitinkrement h und anschließend mit der erhaltenen Approximation als Startwert das zweite Teilproblem oder umgekehrt, was gerade den symplektischen Eulerverfahren (16) entspricht. Beim **Strang-Splittingverfahren** der Ordnung $p = 2$ löst man ausgehend vom Startwert (p_n, q_n) das erste Teilproblem zum Zeitinkrement $\frac{h}{2}$, mit der erhaltenen Approximation als Startwert das zweite Teilproblem zum Zeitinkrement h und dann nochmals das erste Teilproblem zum Zeitinkrement $\frac{h}{2}$. Wie anschließend gezeigt wird, entspricht das Strang-Splittingverfahren in der vorliegenden Situation dem Störmer–Verlet-Verfahren.

Störmer–Verlet-Verfahren und Strang-Splittingverfahren. Die exakte Lösung des ersten Teilproblems kann direkt bestimmt werden

$$\text{Teilproblem 1: } \begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = f(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} q(t) = q(t_n), \\ p(t) = p(t_n) + (t - t_n) f(q(t_n)), \end{cases}$$

was insbesondere für die Startwerte $p(t_n) = p_n$ sowie $q(t_n) = q_n$ und Zeitinkrement $\frac{h}{2}$ auf

$$p_{n+1/2} = p(t_n + \frac{h}{2}) = p_n + \frac{h}{2} f(q_n), \quad q(t_n + \frac{h}{2}) = q_n,$$

führt. Löst man ausgehend von diesen Startwerten das zweite Teilproblem

$$\text{Teilproblem 2: } \begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = 0, \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t), \end{cases} \quad \begin{cases} p(t) = p(t_n), \\ q(t) = q(t_n) + (t - t_n) p(t_n), \end{cases}$$

erhält man zum Zeitinkrement h die Approximationen

$$p_{n+1/2}, \quad q_{n+1} = q_n + h p_{n+1/2}.$$

Nochmals von diesen Startwerten ausgehend ergibt die Lösung des ersten Teilproblems zum Zeitinkrement $\frac{h}{2}$ die Approximationen

$$q_{n+1}, \quad p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2} f(q_{n+1}),$$

was mit dem Störmer–Verlet-Verfahren übereinstimmt.

Splittingverfahren für Differentialgleichungen spezieller Form. Für Differentialgleichungen der speziellen Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(y(t)), \end{cases} \quad (18)$$

mit definierenden Funktionen $f, g : \mathbb{R}^{d/2} \rightarrow \mathbb{R}^{d/2}$ sind die symplektischen Eulerverfahren und das Störmer–Verlet-Verfahren durch die **expliziten Relationen**

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(z_n), \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_{n+1}). \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad \begin{cases} z_{n+1} = z_n + h g(y_n), \\ y_{n+1} = y_n + h f(z_{n+1}), \end{cases}$$

bzw.

$$\begin{cases} y_{n+1/2} = y_n + \frac{h}{2} f(z_n), \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_{n+1/2}), \\ y_{n+1} = y_{n+1/2} + \frac{h}{2} f(z_{n+1}), \end{cases}$$

gegeben. Dies entspricht gerade der Betrachtung der explizit lösbaren Teilprobleme

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = 0, \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(y(t)). \end{cases}$$

2 Anwendungsbeispiele und erste numerische Versuche

Inhalt.

- Gewöhnliche Differentialgleichungen aus den Bereichen Biologie und Physik
- Qualitatives Verhalten von numerischen Verfahren bei Langzeitsimulationen

2.1 Lotka–Volterra Modell

Differentialgleichung. Ein erstes Anwendungsbeispiel aus der Biologie modelliert das Wachstum von Spezien. Die Funktion $y: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}: t \mapsto y(t)$ beschreibt die Anzahl der Individuen einer bestimmten Spezies in Abhängigkeit von der Zeit. Ein einfaches Modell für die zeitliche Entwicklung ist

$$\frac{d}{dt} y(t) = r(t) y(t),$$

wobei r die Reproduktionsrate bezeichnet. Für eine zeitlich konstante Reproduktionsrate ergibt sich insbesondere ein exponentielles Wachstum bzw. Abnehmen der Spezies

$$\frac{d}{dt} y(t) = r_0 y(t), \quad y(t) = e^{r_0 t} y(0).$$

Das **Lotka–Volterra Modell**⁴ (bzw. Räuber-Beute Modell) beschreibt die zeitliche Entwicklung von zwei Spezien, deren Reproduktionsraten von der jeweils anderen Spezies abhängt (Lotka, 1925: parasitäre Invasion einer Insektenart, Volterra, 1927: Vermehrung von Fischen in der Adria, Haie und Fische, Füchse und Hasen). Bezeichnet $y: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ die Anzahl der Räuber und $z: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ die Anzahl der Beutetiere, ergibt sich das autonome Differentialgleichungssystem

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = (z(t) - r_y) y(t), \\ \frac{d}{dt} z(t) = (r_z - y(t)) z(t), \end{cases} \quad (19)$$

mit Konstanten $r_y, r_z > 0$ (z.B. $r_y = 2, r_z = 1$), vgl. (1) für $d = 2$. Die Anzahl der Räuber vermehrt sich in Abhängigkeit von der Anzahl der Beutetiere und nimmt in Abhängigkeit von der Anzahl der Räuber ab (Futtermangel), während die Anzahl der Beutetiere in Abhängigkeit von der Anzahl der Beutetiere anwächst (Fortpflanzung) und in Abhängigkeit von der Anzahl der Räuber abnimmt.

Erhaltungsgröße. Eine Erhaltungsgröße des Lotka–Volterra Modells (19) ist durch die Funktion

$$\mathcal{I}: D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}: (y, z) = r_z \ln y - y + r_y \ln z - z \quad (20)$$

gegeben.

Erklärung. Differenzieren und Einsetzen der Differentialgleichungen ergibt (unter der in Hinblick auf Anwendungen sinnvollen Einschränkung $y(t), z(t) \neq 0$ für $t \geq 0$)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{I}(y(t), z(t)) &= r_z \frac{1}{y(t)} \frac{d}{dt} y(t) - \frac{d}{dt} y(t) + r_y \frac{1}{z(t)} \frac{d}{dt} z(t) - \frac{d}{dt} z(t) \\ &= (r_z - y(t)) \underbrace{\frac{1}{y(t)} \frac{d}{dt} y(t)}_{=z(t)-r_y} + (r_y - z(t)) \underbrace{\frac{1}{z(t)} \frac{d}{dt} z(t)}_{r_z-y(t)} \\ &= 0 \quad \text{für alle } t \geq 0, \end{aligned}$$

woraus $\mathcal{I}(y(t), z(t)) = \mathcal{I}(y(0), z(0)) = \text{Const}$ für $t \geq 0$ folgt. \diamond

Stationäre Lösungen und Periodizität. Eine spezielle zeitunabhängige Lösung (**stationäre Lösung**) des Lotka–Volterra Systems (19) ist die Lösung zu den Anfangswerten

$$y(t) = y(0) = r_z, \quad z(t) = z(0) = r_y.$$

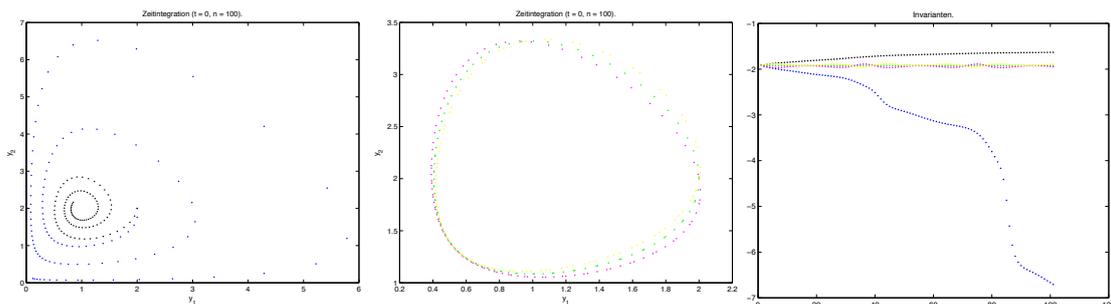
⁴Alfred Lotka (1880–1949), Vito Volterra (1860–1940)

Alle Lösungen von (19) sind periodisch, das heißt, es existiert ein $T_0 > 0$ mit $y(t + T_0) = y(t)$ sowie $z(t + T_0) = z(t)$. Anschaulich bedeutet dies, dass die Menge $\{(y(t), z(t))^T \in \mathbb{R}^2 : t \geq 0\}$ oder gleichbedeutend damit die Niveaulinie der Erhaltungsgröße (20) zu $\mathcal{I}(y(0), z(0))$ eine geschlossene Kurve bildet. Jede Lösung des Lotka–Volterra Modells durchläuft die Phasen

- Zunahme der Beutetiere durch Fortpflanzung,
- Zunahme der Räuber aufgrund ausreichender Futterquellen,
- Abnahme der Räuber aufgrund von Futtermangel.

Illustrationen und numerische Versuche.

- Vektorfeld, vgl. MAPLE (LOTKAVOLTERRA.MWS) und Buch (Abbildung 1.1).
- Darstellung des exakten und numerischen Flußes für eine Menge von Anfangswerten in Form von Arnolds Katze⁵ zu verschiedenen Zeitpunkten, vgl. Buch (Abbildung 1.1).
- Numerische Lösung der Differentialgleichung mittels verschiedener Einschrittverfahren, vgl. MATLAB (ANWENDUNGSBEISPIELE.M). Darstellung des interessanten Falles relativ *großer* Zeitschrittweiten, daher nur einzelne Punkte.
 - Explizites Eulerverfahren
(Spirale nach außen, Schlechte Erhaltung der Invariante)
 - Implizites Eulerverfahren
(Spirale nach innen, Schlechte Erhaltung der Invariante)
 - Implizite Mittelpunktsregel
(Geschlossene Kurve, Sehr gute Erhaltung der Invariante)
 - Symplektische Eulerverfahren
(Geschlossene Kurve, jedoch mit Drift, Oszillationen bei Erhaltung der Invariante)



Lotka–Volterra Modell als Hamiltonsystem. Mittels der Variablentransformation

$$p = \ln y, \quad q = \ln z,$$

ergibt sich für die Erhaltungsgröße $\mathcal{I}(y, z) = r_z \ln y - y + r_y \ln z - z$

$$\mathcal{H}(p, q) = \mathcal{I}(y, z) = r_z p - e^p + r_y q - e^q.$$

⁵Vladimir Arnold (1937–2010)

Das zugehörige Hamiltonsystem (5) lautet

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) = e^{q(t)} - r_y, \\ \frac{d}{dt} q(t) = \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) = r_z - e^{p(t)}. \end{cases}$$

2.2 Mathematisches Pendel

Differentialgleichung. Ein Anwendungsbeispiel aus der Physik beschreibt die Schwingung eines Pendels unter der Einwirkung der Gravitationskraft (Gravitationsbeschleunigung g) in der idealisierten Situation eines punktförmigen Körpers der Masse m , der an einem masselosen Seil der Länge ℓ befestigt ist. Die zeitabhängige Funktion $q : [0, T] \rightarrow \mathbb{R} : t \mapsto q(t)$ gibt die Auslenkung des Pendels, das heißt, den Winkel zur Horizontalen an. Aus der zugehörigen Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} p^2 - \cos q,$$

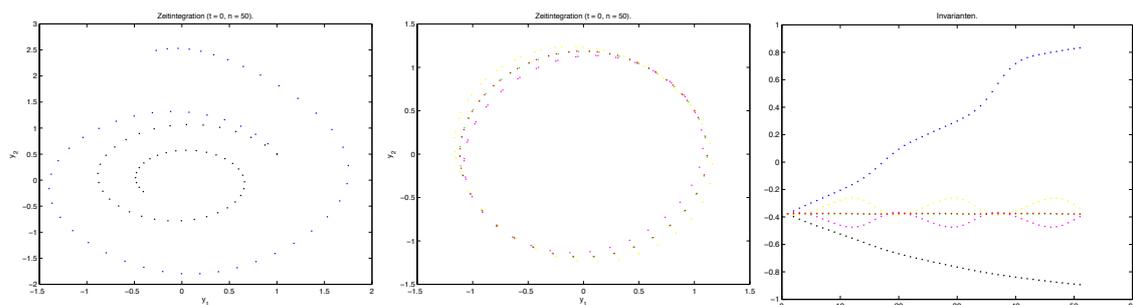
ergibt sich folgendes Hamiltonsystem

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) = -\sin(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) = p(t), \end{cases} \quad (21)$$

das von der speziellen Form (6) mit $f(q) = -\sin q$ ist.

Illustrationen und numerische Versuche.

- (i) Veranschaulichung des Pendels, vgl. Buch (Abbildung auf Seite 5).
- (ii) Darstellung des Phasenraumes $(p, q) \in \mathbb{R} \times S^1$ (Wahl des Kreises $S^1 \subset \mathbb{R}^2$ wegen 2π -Periodizität des Winkels) und Veranschaulichung der Flächenerhaltung des exakten Flusses, vgl. Buch (Abbildung 1.3).
- (iii) Numerische Lösung der Differentialgleichung mittels verschiedener Einschrittverfahren, vgl. MATLAB (ANWENDUNGSBEISPIELE.M). Darstellung des interessanten Falles relativ *großer* Zeitschrittweiten, daher nur einzelne Punkte.
 - Explizites Eulerverfahren
(Spirale nach außen, Schlechte Erhaltung der Invariante, Keine Flächenerhaltung)
 - Implizites Eulerverfahren
(Spirale nach innen, Schlechte Erhaltung der Invariante, Keine Flächenerhaltung)
 - Implizite Mittelpunktsregel
(Geschlossene Kurve, Sehr gute Erhaltung der Invariante, Flächenerhaltung?)
 - Symplektische Eulerverfahren (Lie–Trotter–Splittingverfahren)
(Geschlossene Kurve, jedoch mit Drift (Verlust der Links–Rechts–Symmetrie), Oszillationen bei Erhaltung der Invariante, Flächenerhaltung?)
 - Störmer–Verlet–Verfahren (Strang–Splittingverfahren)
(Geschlossene Kurve, Sehr gute Erhaltung der Invariante, Flächenerhaltung?)



Pendelgleichung mittels Newtonschem Gesetz. Aus dem Newtonschen Gesetz⁶

$$\text{Masse} \times \text{Beschleunigung} = \text{Kraft}$$

ergibt sich folgende Differentialgleichung für die Auslenkung bezüglich kartesischer Koordinaten

$$m \frac{d^2}{dt^2} x(t) = F_{\text{Gravitation}} = \begin{pmatrix} 0 \\ -mg \end{pmatrix} \iff \frac{d^2}{dt^2} x(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ -g \end{pmatrix}.$$

Da das Seil als nicht dehnbar angenommen wird, wird das System durch einen einzigen Freiheitsgrad beschrieben und eine Umrechnung in Polarkoordinaten

$$x(t) = \ell \begin{pmatrix} \cos(q(t)) \\ \sin(q(t)) \end{pmatrix}$$

ist naheliegend. Zweimaliges Differenzieren, die Anwendung der Relation $p(t) = \frac{d}{dt} q(t)$ sowie eine geeignete Kombination der beiden Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} x(t) &= \ell p(t) \begin{pmatrix} -\sin(q(t)) \\ \cos(q(t)) \end{pmatrix}, \\ \frac{d^2}{dt^2} x(t) &= \ell \frac{d}{dt} p(t) \begin{pmatrix} -\sin(q(t)) \\ \cos(q(t)) \end{pmatrix} + \ell (p(t))^2 \begin{pmatrix} -\cos(q(t)) \\ -\sin(q(t)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -g \end{pmatrix}, \\ &\begin{cases} \sin(q(t)) \frac{d}{dt} p(t) + \cos(q(t)) (p(t))^2 = 0, \\ \cos(q(t)) \frac{d}{dt} p(t) - \sin(q(t)) (p(t))^2 = -\frac{g}{\ell}, \end{cases} \\ &\begin{cases} \sin^2(q(t)) \frac{d}{dt} p(t) + \sin(q(t)) \cos(q(t)) (p(t))^2 = 0, \\ \cos^2(q(t)) \frac{d}{dt} p(t) - \sin(q(t)) \cos(q(t)) (p(t))^2 = -\frac{g}{\ell} \cos(q(t)), \end{cases} \end{aligned}$$

führt auf das Hamiltonsystem

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\frac{g}{\ell} \cos(q(t)), \\ \frac{d}{dt} q(t) = p(t). \end{cases}$$

Wegen $\cos(q - \frac{\pi}{2}) = \sin q$ ergibt die Transformation $q \leftrightarrow q - \frac{\pi}{2}$ (Winkel zur Vertikalen \leftrightarrow Winkel zur Horizontalen) schließlich (21).

⁶Isaac Newton (1643–1727)

2.3 Zweikörperproblem (Keplerproblem)

Keplersche Gesetze. Eine wesentliche Entdeckung von Kepler⁷ waren Gesetzmäßigkeiten der Planetenbewegungen, welche er als Assistent von Brahe⁸ durch präzise Messungen der Position des Planeten Mars entdeckte.

Erstes Keplersches Gesetz. Die Planeten bewegen sich auf elliptischen Bahnen mit der Sonne in einem der Brennpunkte.

In mathematischer Formulierung lautet das erste Keplersche Gesetz für zwei Körper (etwa Sonne und einen Planeten)

$$r = \frac{d}{1 + e \cos \varphi}. \quad (22)$$

Dabei bezeichnet

- a die halbe Länge der Hauptachse der Ellipse,
- e die Exzentrizität,
Der Abstand vom Ursprung zu den Brennpunkten ist gegeben durch ae .
- $b = a\sqrt{1 - e^2}$ die halbe Länge der Nebenachse der Ellipse,
Mittels des Satzes von Pythagoras folgt $(ae)^2 + b^2 = a^2$.
- $d = b\sqrt{1 - e^2} = a(1 - e^2)$ den vertikale Abstand vom Brennpunkt aus,
Für den Ellipsenpunkt $(x, y) = (ae, d)$ gilt $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1$. Somit folgt $e^2 + \frac{d^2}{b^2} = 1$ und $d^2 = b^2(1 - e^2) = a^2(1 - e^2)^2$.
- r den Abstand des betrachteten Ellipsenpunktes vom Brennpunkt und φ den eingeschlossenen Winkel (Anomalie).

Vgl. Bemerkung unten und Buch (Abbildung, Seite 9).

Zweites Keplersches Gesetz. In gleichen Zeitintervallen werden von dem Strahl, der Brennpunkt und Ellipsenpunkt verbindet, gleiche Flächen überstrichen.

Die Erhaltung des Drehmomentes entspricht dem zweiten Keplerschen Gesetz.

Zusammenhang mit den Newtonschen Gesetzen. Newton erklärte die Planetenbewegungen mittels des allgemeinen Gravitationsgesetzes (Gravitationskraft ist proportional zum Inversen des Abstandsquadrates $\frac{1}{r^2}$) und dem Newtonschen Gesetz *Masse* \times *Beschleunigung* = *Kraft*. Aufgrund der Erkenntnisse von Newton konnten Bewegungen von Himmelskörpern mittels der Lösung von Differentialgleichungen bestimmt werden.

Differentialgleichung. Das **Zweikörperproblem** modelliert die Bewegung zweier sich anziehender Körper. Üblicherweise wird der schwerere Körper als Ursprung des Koordinatensystems gewählt und man nützt zusätzlich, daß die Bewegung der beiden Körper in einer Ebene liegt. Beschreibt die zeitabhängige Funktion $q = (q_1, q_2)^T : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^2$ die Position des leichteren Körpers in kartesischen Koordinaten, ergibt das Newtonsche Gesetz das folgende (normalisierte) Differentialgleichungssystem

$$\frac{d^2}{dt^2} q(t) = -\frac{q(t)}{\|q(t)\|^3}, \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} q_1(t) = -\frac{q_1(t)}{\|q(t)\|^3}, \\ \frac{d^2}{dt^2} q_2(t) = -\frac{q_2(t)}{\|q(t)\|^3}, \end{cases} \quad (23)$$

⁷Johannes Kepler (1571–1630)

⁸Tycho Brahe (1546–1601)

wobei $\|q(t)\| = \sqrt{(q_1(t))^2 + (q_2(t))^2}$. Dies entspricht der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p, q) = \mathcal{H}(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2} \|p\|^2 - \frac{1}{\|q\|} = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}$$

und dem zugehörigen Hamiltonsystem

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p(t) = -\partial_q \mathcal{H}(p(t), q(t)) = -\frac{1}{\|q(t)\|^3} q(t), \\ \frac{d}{dt} q(t) = \partial_p \mathcal{H}(p(t), q(t)) = p(t), \end{cases} \quad (24)$$

welches von der speziellen Form (6) mit $f(q) = -\frac{1}{\|q\|^3} q$ ist. Vgl. auch folgender Abschnitt (Zusammenhang mit Zweikörperproblem in Relativkoordinaten).

Erklärung. Differentiation mittels Kettenregel

$$\begin{aligned} g_1: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}: x = (x_1, x_2) &\mapsto \|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}, & g_1'(x) &= \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} x = \frac{x}{\|x\|}, \\ g_2: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}: x = (x_1, x_2) &\mapsto \frac{1}{\|x\|} = \frac{1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, & g_2'(x) &= -\frac{1}{\|x\|^2} \frac{x}{\|x\|}, \end{aligned}$$

führt auf die angegebenen Ableitungen. \diamond

Erhaltungsgrößen. Neben der totale Energie

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} \|p\|^2 - \frac{1}{\|q\|}$$

bildet das Drehmoment des Systems

$$\mathcal{L}(p, q) = \det \begin{pmatrix} q_1 & p_1 \\ q_2 & p_2 \end{pmatrix} = p_2 q_1 - p_1 q_2$$

eine Erhaltungsgröße des Zweikörperproblems (24).

Erklärung. Mittels Kettenregel und Einsetzen der Differentialgleichung folgt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{L}(p(t), q(t)) &= q_1(t) \frac{d}{dt} p_2(t) + p_2(t) \frac{d}{dt} q_1(t) - q_2(t) \frac{d}{dt} p_1(t) - p_1(t) \frac{d}{dt} q_2(t) \\ &= -\frac{1}{\|q(t)\|^3} q_1(t) q_2(t) + p_1(t) p_2(t) + \frac{1}{\|q(t)\|^3} q_1(t) q_2(t) - p_1(t) p_2(t) \\ &= 0, \end{aligned}$$

was die Erhaltungseigenschaft zeigt. \diamond

Exakte Integration des Zweikörperproblems. Mittels der beiden Erhaltungsgrößen (bzw. erste Integrale)

$$\mathcal{H}(p(t), q(t)) = \frac{1}{2} \|p(t)\|^2 - \frac{1}{\|q(t)\|} = \mathcal{H}(p(0), q(0)) = \text{Const},$$

$$\mathcal{L}(p(t), q(t)) = \det \begin{pmatrix} q_1(t) & p_1(t) \\ q_2(t) & p_2(t) \end{pmatrix} = p_2(t) q_1(t) - p_1(t) q_2(t) = \mathcal{L}(p(0), q(0)) = \text{Const},$$

ist es möglich, das Zweikörperproblem (24) zu lösen und insbesondere nachzuweisen, daß jede Lösung durch eine Ellipse, Parabel oder Hyperbel gegeben ist. Eine Transformation in Polarkoordinaten

$$q(t) = r(t) \begin{pmatrix} \cos(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) \end{pmatrix}, \quad p(t) = \frac{d}{dt} q(t) = \frac{d}{dt} r(t) \begin{pmatrix} \cos(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) \end{pmatrix} + r(t) \frac{d}{dt} \phi(t) \begin{pmatrix} -\sin(\phi(t)) \\ \cos(\phi(t)) \end{pmatrix},$$

und die Anwendung der Relationen (Satz von Pythagoras für orthogonale Vektoren, Determinante verschwindet für linear abhängige Vektoren)

$$\begin{aligned}\|q(t)\| &= r(t), \\ \|p(t)\|^2 &= \left\| \frac{d}{dt} r(t) \begin{pmatrix} \cos(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) \end{pmatrix} + r(t) \frac{d}{dt} \phi(t) \begin{pmatrix} -\sin(\phi(t)) \\ \cos(\phi(t)) \end{pmatrix} \right\|^2 \\ &= \left\| \frac{d}{dt} r(t) \begin{pmatrix} \cos(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) \end{pmatrix} \right\|^2 + \left\| r(t) \frac{d}{dt} \phi(t) \begin{pmatrix} -\sin(\phi(t)) \\ \cos(\phi(t)) \end{pmatrix} \right\|^2 \\ &= \left(\frac{d}{dt} r(t) \right)^2 + \left(r(t) \frac{d}{dt} \phi(t) \right)^2, \\ \det(q(t)|p(t)) &= (r(t))^2 \frac{d}{dt} \phi(t) \det \begin{pmatrix} \cos(\phi(t)) & -\sin(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) & \cos(\phi(t)) \end{pmatrix} \\ &= (r(t))^2 \frac{d}{dt} \phi(t),\end{aligned}$$

ergibt folgende Identitäten

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(p(t), q(t)) &= \frac{1}{2} \left(\left(\frac{d}{dt} r(t) \right)^2 + \left(r(t) \frac{d}{dt} \phi(t) \right)^2 \right) - \frac{1}{r(t)} = \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}(p(0), q(0)), \\ \mathcal{L}(p(t), q(t)) &= (r(t))^2 \frac{d}{dt} \phi(t) = \mathcal{L}_0 = \mathcal{L}(p(0), q(0)).\end{aligned}$$

Um eine Relation der Form $r(\phi)$ abzuleiten, nützt man die Kettenregel, ersetzt in der ersten Differentialgleichung die Zeitableitung durch $\frac{d}{dt} r = \frac{d}{d\phi} r \frac{d}{dt} \phi$ und erhält mittels der zweiten Differentialgleichung $\frac{d}{dt} \phi = \frac{\mathcal{L}_0}{r^2}$ die Differentialgleichung

$$\frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_0^2}{(r(\phi))^4} \left(\frac{d}{d\phi} r(\phi) \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_0^2}{(r(\phi))^2} - \frac{1}{r(\phi)} = \mathcal{H}_0.$$

Eine Vereinfachung der letzten Relation ergibt sich durch die Substitution

$$r(\phi) = \frac{1}{\varrho(\phi)}, \quad \frac{d}{d\phi} r(\phi) = -\frac{1}{\varrho(\phi)^2} \frac{d}{d\phi} \varrho(\phi),$$

welche auf die Differentialgleichung

$$\frac{\mathcal{L}_0^2}{2} \left(\frac{d}{d\phi} \varrho(\phi) \right)^2 + \frac{\mathcal{L}_0^2}{2} (\varrho(\phi))^2 - \varrho(\phi) - \mathcal{H}_0 = 0$$

führt. Differentiation bezüglich ϕ ergibt eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_0^2 \frac{d}{d\phi} \varrho(\phi) \frac{d^2}{d\phi^2} \varrho(\phi) + \mathcal{L}_0^2 \varrho(\phi) \frac{d}{d\phi} \varrho(\phi) - \frac{d}{d\phi} \varrho(\phi) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{d^2}{d\phi^2} \varrho(\phi) &= -\varrho(\phi) + \frac{1}{\mathcal{L}_0^2}\end{aligned}$$

mit bekannter Lösung

$$\varrho(\phi) = \left(\varrho_0 - \frac{1}{\mathcal{L}_0^2} \right) \cos \phi + \varrho'_0 \sin \phi + \frac{1}{\mathcal{L}_0^2}, \quad \varrho_0 = \varrho(0), \quad \varrho'_0 = \frac{d}{d\phi} \varrho(\phi)|_{\phi=0}.$$

Bei vorgegebenen Anfangswerten

$$r_0 = r(0), \quad \frac{d}{d\phi} r(\phi)|_{\phi=0} = r'_0, \quad \varrho_0 = \frac{1}{r_0}, \quad \varrho'_0 = -\frac{1}{r_0^2} r'_0,$$

erhält man somit (Bestimmung der Konstanten c_1, c_2 aus $c_1 \cos c_2 = \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0} - 1$, $c_1 \sin c_2 = \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^2} r_0'$, Anwendung des Additionstheorems $\cos(\phi + c) = \cos c \cos \phi - \sin c \sin \phi$)

$$\varrho(\phi) = \left(\varrho_0 - \frac{1}{\mathcal{L}_0^2}\right) \cos \phi + \varrho_0' \sin \phi + \frac{1}{\mathcal{L}_0^2} = \frac{1}{\mathcal{L}_0^2} \left(\left(\frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0} - 1\right) \cos \phi - \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^2} r_0' \sin \phi + 1 \right),$$

$$\Rightarrow r(\phi) = \frac{\mathcal{L}_0^2}{1 + c_1 (\cos c_2 \cos \phi - \sin c_2 \sin \phi)} = \frac{\mathcal{L}_0^2}{1 + c_1 \cos(\phi + c_2)}.$$

Mittels der Relationen

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^4} (r_0')^2 + \frac{1}{2} \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^2} - \frac{1}{r_0},$$

$$c_1^2 = c_1^2 \cos^2 c_2 + c_1^2 \sin^2 c_2 = \left(\frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0} - 1\right)^2 + \left(\frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^2} r_0'\right)^2 = 1 + \mathcal{L}_0^2 \left(\frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^4} (r_0')^2 + \frac{\mathcal{L}_0^2}{r_0^2} - 2 \frac{1}{r_0}\right) = 1 + 2 \mathcal{H}_0 \mathcal{L}_0^2,$$

ergibt sich somit die Darstellung (22)

$$r(\phi - c_2) = \frac{d}{1 + e \cos \phi}, \quad d = \mathcal{L}_0^2, \quad e = \sqrt{1 + 2 \mathcal{H}_0 \mathcal{L}_0^2}.$$

Abhängig von den gewählten Anfangswerten entspricht dies einer Ellipse, Parabel oder Hyperbel, falls $\mathcal{H}_0 > 0$, $\mathcal{H}_0 = 0$ oder $\mathcal{H}_0 < 0$. Insbesondere für die Anfangswerte

$$q_1(0) = 1 - e, \quad q_2(0) = 0, \quad p_1(0) = \frac{d}{dt} q_1(t)|_{t=0} = 0, \quad p_2(0) = \frac{d}{dt} q_2(t)|_{t=0} = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}},$$

ergibt sich wegen

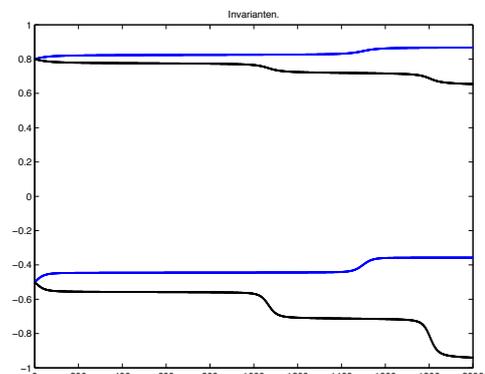
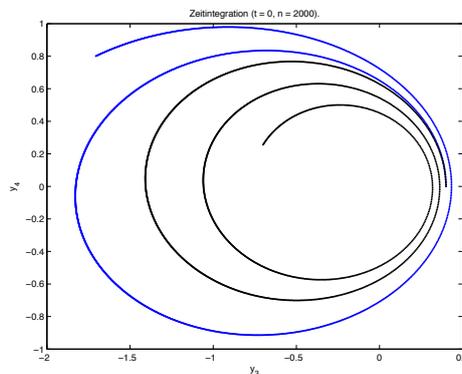
$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} \|p(0)\|^2 - \frac{1}{\|q(0)\|} = \frac{1}{2} \frac{1+e}{1-e} - \frac{1}{1-e} = -\frac{1}{2}, \quad \mathcal{L}_0 = p_2(0) q_1(0) - p_1(0) q_2(0) = \sqrt{1 - e^2},$$

die Gleichung einer Ellipse.

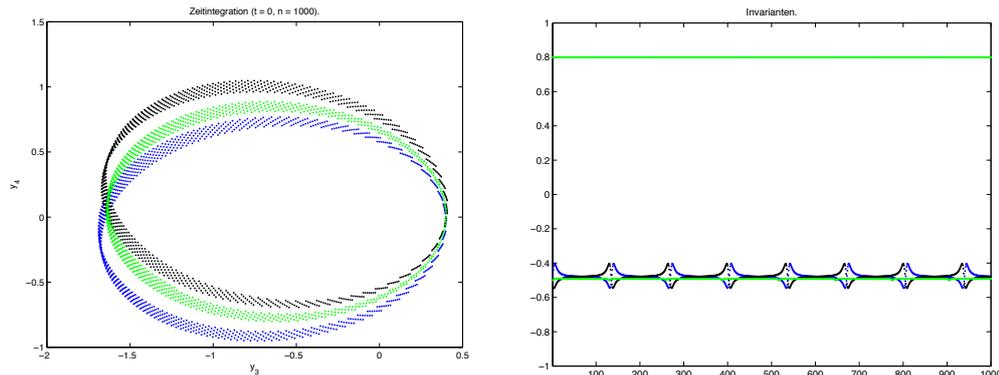
Illustrationen und numerische Versuche.

(i) Numerische Lösung der Differentialgleichung mittels verschiedener Einschrittverfahren, vgl. MATLAB (ANWENDUNGSBEISPIELE.M).

- Explizites Eulerverfahren, Implizites Eulerverfahren
(Spirale nach außen bzw. innen, Schlechte Erhaltung der Invarianten)



- Implizite Mittelpunktsregel
(Besseres Resultat für wesentlich größere Zeitschrittweite, Präzessionseffekt gegen den Uhrzeigersinn)
- Symplektische Eulerverfahren (Lie–Trotter-Splittingverfahren), Störmer–Verlet-Verfahren (Strang-Splittingverfahren)
(Besseres Resultat für wesentlich größere Zeitschrittweite, Präzessionseffekt im Uhrzeigersinn)



Globaler Fehler und Erhaltung der Invarianten. Vgl. auch Buch (Tabelle 2.1).

Explizites Eulerverfahren ($p = 1$):	Globaler Fehler = $\mathcal{O}(T^2 h)$ Fehler (Energie) = $\mathcal{O}(Th)$ Fehler (Drehmoment) = $\mathcal{O}(Th)$
Implizite Mittelpunktsregel ($p = 2$):	Globaler Fehler = $\mathcal{O}(Th^p)$ Fehler (Energie) = $\mathcal{O}(h^p)$ Fehler (Drehmoment) = 0
Symplektische Eulerverfahren ($p = 1$):	Globaler Fehler = $\mathcal{O}(Th^p)$ Fehler (Energie) = $\mathcal{O}(h^p)$ Fehler (Drehmoment) = 0
Störmer–Verlet-Verfahren ($p = 2$):	Globaler Fehler = $\mathcal{O}(Th^p)$ Fehler (Energie) = $\mathcal{O}(h^p)$ Fehler (Drehmoment) = 0

Bemerkung (Ellipsengleichung). Eine Ellipse mit Brennpunkten bei $(\pm ae, 0)^T$ ist durch die Relation

$$\begin{aligned} &\text{Abstand des Ellipsenpunktes } (x, y)^T \text{ vom ersten Brennpunkt } (-ae, 0)^T \\ &+ \text{Abstand des Ellipsenpunktes } (x, y)^T \text{ vom zweiten Brennpunkt } (ae, 0)^T = \text{Const} \end{aligned}$$

gegeben. Einsetzen des Ellipsenpunktes $(a, 0)^T$ ergibt

$$\text{Const} = \left\| \begin{pmatrix} a + ae \\ 0 \end{pmatrix} \right\| + \left\| \begin{pmatrix} a - ae \\ 0 \end{pmatrix} \right\| = a(1 + e) + a(1 - e) = 2a$$

und führt folglich auf die Ellipsengleichung

$$\sqrt{(x + ae)^2 + y^2} + \sqrt{(x - ae)^2 + y^2} = 2a.$$

Einsetzen des Ellipsenpunktes $(0, b)^T$ ergibt weiters

$$2a = \left\| \begin{pmatrix} ae \\ b \end{pmatrix} \right\| + \left\| \begin{pmatrix} ae \\ b \end{pmatrix} \right\| = 2\sqrt{(ae)^2 + b^2} \iff b^2 = a^2(1 - e^2).$$

Bezeichnet r den Abstand des betrachteten Ellipsenpunktes $(x, y)^T$ vom Brennpunkt und φ den eingeschlossenen Winkel, so folgt

$$x = ae + r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi.$$

Einsetzen in die Ellipsengleichung führt auf die Relation

$$\begin{aligned} \sqrt{(2ae + r \cos \varphi)^2 + (r \sin \varphi)^2} + \sqrt{(r \cos \varphi)^2 + (r \sin \varphi)^2} &= 2a, \\ \implies 4a^2e^2 + 4aer \cos \varphi + r^2 &= (2a - r)^2, \\ \implies r(1 + e \cos \varphi) &= a(1 - e^2), \end{aligned}$$

und mit der Bezeichnung $d = a(1 - e^2)$ folgt die Darstellung

$$r(\varphi) = \frac{d}{1 + e \cos \varphi}.$$

2.4 Mehrkörperproblem

Differentialgleichung (Äußeres Sonnensystem, Sechskörperproblem). Die Berechnung der Planetenbewegungen über lange Zeiträume hinweg fasziniert AstrophysikerInnen und MathematikerInnen bis zum heutigen Tag. Für die Beschreibung der Bewegungen der Sonne sowie der fünf äußeren Planeten (Jupiter, Saturn, Uranus, Neptun, Pluto) führen ähnliche Überlegungen wie für das Zweikörperproblem auf die Hamiltonfunktion (mit $J = 6$ und Gravitationskonstante $2.95912208286 \cdot 10^{-4}$)

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(p, q) &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \frac{1}{m_j} \|p_j\|^2 - G \sum_{\substack{j,k=1 \\ k < j}}^J \frac{m_j m_k}{\|q_j - q_k\|} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^J \frac{1}{m_j} \|p_j\|^2 - G \left(\frac{m_1 m_2}{\|q_1 - q_2\|} + \frac{m_1 m_3}{\|q_1 - q_3\|} + \frac{m_1 m_4}{\|q_1 - q_4\|} + \frac{m_1 m_5}{\|q_1 - q_5\|} + \frac{m_1 m_6}{\|q_1 - q_6\|} \right. \\ &\quad + \frac{m_2 m_3}{\|q_2 - q_3\|} + \frac{m_2 m_4}{\|q_2 - q_4\|} + \frac{m_2 m_5}{\|q_2 - q_5\|} + \frac{m_2 m_6}{\|q_2 - q_6\|} \\ &\quad + \frac{m_3 m_4}{\|q_3 - q_4\|} + \frac{m_3 m_5}{\|q_3 - q_5\|} + \frac{m_3 m_6}{\|q_3 - q_6\|} \\ &\quad + \frac{m_4 m_5}{\|q_4 - q_5\|} + \frac{m_4 m_6}{\|q_4 - q_6\|} \\ &\quad \left. + \frac{m_5 m_6}{\|q_5 - q_6\|} \right).\end{aligned}$$

Dabei gibt $m_1 = 1$ die Masse der Sonne wieder und die Größen m_2, \dots, m_6 bezeichnen die relativen Massen der Planeten. Um den Einfluß der innereren Planeten (Merkur, Venus, Erde, Mars) auszugleichen, setzt man $m_1 = 1.00000597682$. Die Funktionen $p_j, q_j : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^3$ für $1 \leq j \leq J$ beschreiben die Positionen und zugehörigen Momente der Körper. Die angegebene Hamiltonfunktion führt auf ein Differentialgleichungssystem der speziellen Form (18) (Modifikation des Hamiltonsystems der speziellen Form (6))

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p_j(t) = -\partial_{q_j} \mathcal{H}(p(t), q(t)) = -G \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^J \frac{m_j m_k}{\|q_j(t) - q_k(t)\|^3} (q_j(t) - q_k(t)), \\ \frac{d}{dt} q_j(t) = \partial_{p_j} \mathcal{H}(p(t), q(t)) = \frac{1}{m_j} p_j(t), \end{cases} \quad (25)$$

wobei $1 \leq j \leq J$. Die in Tabelle 1 angegebenen Massen der Planeten und Anfangspositionen sowie Anfangsgeschwindigkeiten sind dem Buch entnommen (Angabe in den Längeneinheiten *Astronomische Einheit* = 149 597 870 km und Zeiteinheit *Erdentag*).

Zusammenhang mit Zweikörperproblem in Relativkoordinaten. Für den Spezialfall von zwei Körpern ($J = 2$) entspricht das Mehrkörperproblem (25) der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_1} \|p_1\|^2 + \frac{1}{m_2} \|p_2\|^2 \right) - G m_1 m_2 \frac{1}{\|q_1 - q_2\|}$$

mit zugehörigem Differentialgleichungssystem (wegen $g(x) = \frac{1}{\sqrt{(x-y)^2+c}}$, $g'(x) = -\frac{x-y}{\sqrt{(x-y)^2+c}^3}$)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} p_1(t) = -G \frac{m_1 m_2}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_1(t) - q_2(t)), \\ \frac{d}{dt} p_2(t) = -G \frac{m_1 m_2}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_2(t) - q_1(t)), \\ \frac{d}{dt} q_1(t) = \frac{1}{m_1} p_1(t), \\ \frac{d}{dt} q_2(t) = \frac{1}{m_2} p_2(t), \end{cases}$$

Sonne	$m_1 = 1.00000597682,$	$q_1(0) = 0,$	$q_1'(0) = 0,$
Jupiter	$m_2 = 0.000954786104043,$	$q_2(0) = \begin{pmatrix} -3.5023653 \\ -3.8169847 \\ -1.5507963 \end{pmatrix},$	$q_2'(0) = \begin{pmatrix} 0.00565429 \\ -0.00412490 \\ -0.00190589 \end{pmatrix},$
Saturn	$m_3 = 0.000285583733151,$	$q_3(0) = \begin{pmatrix} 9.0755314 \\ -3.0458353 \\ -1.6483708 \end{pmatrix},$	$q_3'(0) = \begin{pmatrix} 0.00168318 \\ 0.00483525 \\ 0.00192462 \end{pmatrix},$
Uranus	$m_4 = 0.0000437273164546,$	$q_4(0) = \begin{pmatrix} 8.3101420 \\ -16.2901086 \\ -7.2521278 \end{pmatrix},$	$q_4'(0) = \begin{pmatrix} 0.00354178 \\ 0.00137102 \\ 0.00055029 \end{pmatrix},$
Neptun	$m_5 = 0.0000517759138449,$	$q_5(0) = \begin{pmatrix} 11.4707666 \\ -25.7294829 \\ -10.8169456 \end{pmatrix},$	$q_5'(0) = \begin{pmatrix} 0.00288930 \\ 0.00114527 \\ 0.00039677 \end{pmatrix},$
Pluto	$m_6 = 7.692307692307693 \cdot 10^{-9},$	$q_6(0) = \begin{pmatrix} -15.5387357 \\ -25.2225594 \\ -3.1902382 \end{pmatrix},$	$q_6'(0) = \begin{pmatrix} 0.00276725 \\ -0.00170702 \\ -0.00136504 \end{pmatrix}.$

Tabelle 1: Massen, Anfangspositionen und Anfangsgeschwindigkeiten der äußeren Planeten

bzw. das äquivalente Differentialgleichungssystem zweiter Ordnung

$$\begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} q_1(t) = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dt} p_1(t) = -G \frac{m_2}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_1(t) - q_2(t)), \\ \frac{d^2}{dt^2} q_2(t) = \frac{1}{m_2} \frac{d}{dt} p_2(t) = -G \frac{m_1}{\|q_1(t) - q_2(t)\|^3} (q_2(t) - q_1(t)). \end{cases}$$

Zur Transformation dieses Systems auf ein Differentialgleichungssystem von einfacherer Struktur, nützt man eine Transformation auf die Koordinaten des Massenmittelpunktes sowie Relativkoordinaten

$$q_Z(t) = \frac{1}{m_1 + m_2} (m_1 q_1(t) + m_2 q_2(t)), \quad q_d(t) = q_1(t) - q_2(t).$$

Mittels Lösung eines linearen Gleichungssystem ergibt sich der Zusammenhang

$$\begin{pmatrix} q_Z \\ q_d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m_1}{m_1 + m_2} & \frac{m_2}{m_1 + m_2} \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{m_2}{m_1 + m_2} \\ 1 & -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_Z \\ q_d \end{pmatrix}.$$

Einsetzen der Differentialgleichungen führt einerseits auf

$$\begin{aligned} p_Z(t) &= \frac{d}{dt} q_Z(t) = \frac{1}{m_1 + m_2} (m_1 \frac{d}{dt} q_1(t) + m_2 \frac{d}{dt} q_2(t)) = \frac{1}{m_1 + m_2} (p_1(t) + p_2(t)), \\ \frac{d}{dt} p_Z(t) &= \frac{d^2}{dt^2} q_Z(t) = \frac{1}{m_1 + m_2} (\frac{d}{dt} p_1(t) + \frac{d}{dt} p_2(t)) = 0, \end{aligned}$$

was zeigt, daß die Koordinaten des Massenmittelpunktes eine gleichförmige Bewegung ausführen

$$\frac{d}{dt} p_Z(t) = 0, \quad p_Z(t) = p_Z(0), \quad q_Z(t) = q_Z(0) + t p_Z(0),$$

Andererseits erfüllt die Differenz q_d die Relationen

$$\begin{aligned} p_d(t) &= \frac{d}{dt} q_d(t) = \frac{d}{dt} q_1(t) - \frac{d}{dt} q_2(t) = \frac{1}{m_1} p_1(t) - \frac{1}{m_2} p_2(t), \\ \frac{d}{dt} p_d(t) &= \frac{d^2}{dt^2} q_d(t) = \frac{1}{m_1} \frac{d}{dt} p_1(t) - \frac{1}{m_2} \frac{d}{dt} p_2(t) = -G \frac{m_1 + m_2}{\|q_d(t)\|^3} q_d(t). \end{aligned}$$

Die erhaltene Differentialgleichung zweiter Ordnung

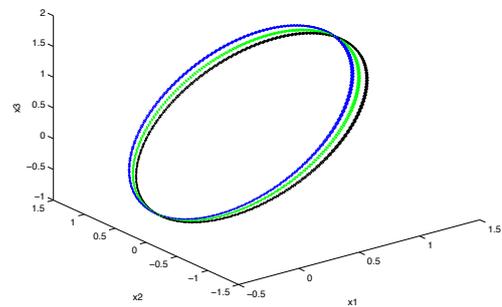
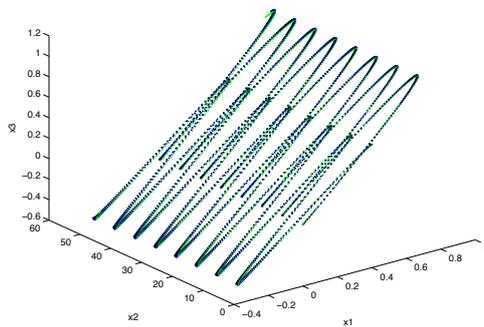
$$\frac{d}{dt} p_d(t) = \frac{d^2}{dt^2} q_d(t) = -G \frac{m_1 + m_2}{\|q_d(t)\|^3} q_d(t),$$

involviert die Gesamtmasse $m_1 + m_2$ und entspricht der Differentialgleichung (23).

Illustrationen und numerische Versuche.

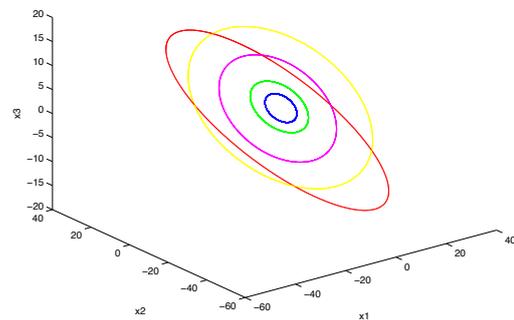
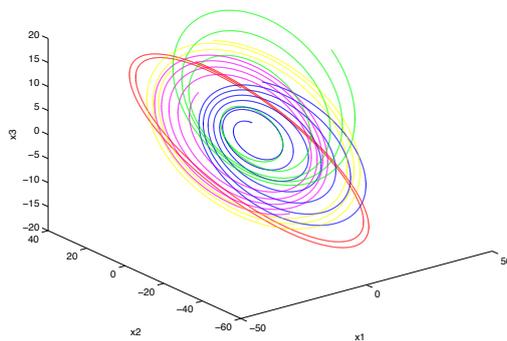
(i) Numerische Lösung des Zweikörperproblems (3D, Ursprüngliche Formulierung und Relativkoordinaten), vgl. MATLAB (ANWENDUNGSBEISPIELE.M). Darstellung in Relativkoordinaten.

- Explizites Eulerverfahren
(Spirale nach außen, Schlechte Erhaltung der Hamiltonfunktion)
- Symplektische Eulerverfahren (Lie-Trotter-Splittingverfahren), Störmer-Verlet-Verfahren (Strang-Splittingverfahren)
(Zufriedenstellendes Resultat für wesentlich größere Zeitschrittweite, Gute Erhaltung der Hamiltonfunktion)



(ii) Numerische Lösung des Äußeren Sonnensystems (Sechskörperproblem) mittels verschiedener Einschrittverfahren, vgl. Buch (Abbildung 2.4).

- Explizites Eulerverfahren
(Spiralen nach außen, Schlechte Erhaltung der Hamiltonfunktion)
- Symplektische Eulerverfahren (Lie-Trotter-Splittingverfahren), Störmer-Verlet-Verfahren (Strang-Splittingverfahren)
(Zufriedenstellende Resultate)



3 Numerische Verfahrensklassen

Inhalt.

- Runge–Kutta-Verfahren
Kollokationsverfahren
- Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren
Nyström-Verfahren

Bemerkung. Aus Zeitgründen werden Kompositionsverfahren und Splittingverfahren nicht mehr behandelt.

3.1 Runge–Kutta-Verfahren und Kollokationsverfahren

Verfahrensklasse. Runge–Kutta-Verfahren⁹ bilden eine bekannte Klasse von Einschrittverfahren zur numerischen Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen und finden auch bei der Zeitintegration von partiellen Differentialgleichungen Anwendung. Eine spezielle Teilkategorie sind Kollokationsverfahren, für welche Eigenschaften wie Ordnung und Symplektizität sowie stetige Ausgabe (continuous output) auf vergleichsweise einfache Art und Weise zu analysieren sind.

⁹Carl Runge (1856–1927), Wilhelm Kutta (1867–1944)

3.1.1 Runge–Kutta-Verfahren

Differentialgleichung. Wir betrachten ein [Anfangswertproblem](#) (nichtautonome Differentialgleichung, Anfangsbedingung) für eine zeitabhängige Funktion $y : [t_0, T] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d : t \mapsto y(t)$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(t, y(t)), \\ y(t_0) \text{ gegeben,} \end{cases} \quad (26)$$

mit definierender Funktion $f : [t_0, T] \times D \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d : (t, y) \mapsto f(t, y)$ und vorgegebenem Anfangswert $y(t_0) \in D \subset \mathbb{R}^d$.

Runge–Kutta-Verfahren. Ein s -stufiges [Runge–Kutta-Verfahren](#) zur näherungsweise Lösung des Anfangswertproblems (26) ist durch eine Rekursion der Form

$$\begin{cases} Y'_{ni} = f(t_n + c_i h, Y_{ni}), \\ Y_{ni} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Y'_{nj}, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i Y'_{ni}, & 0 \leq n \leq N-1, \end{cases} \quad (27)$$

gegeben. Die Koeffizienten $\mathfrak{A} = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq s} \in \mathbb{R}^{s \times s}$, $\mathfrak{b} = (b_i)_{1 \leq i \leq s} \in \mathbb{R}^s$ und $\mathfrak{c} = (c_i)_{1 \leq i \leq s} \in \mathbb{R}^s$ mit $c_i \in [0, 1]$ für $1 \leq i \leq s$ werden meistens mittels [Butcher Tableau](#)¹⁰ angegeben.

$$\begin{array}{c|c} \mathfrak{c} & \mathfrak{A} \\ \hline & \mathfrak{b}^T \end{array}$$

Falls $a_{ij} = 0$ für $1 \leq i < j \leq s$, heißt das Runge–Kutta-Verfahren [explizit](#), ansonsten [implizit](#). Eine übliche Bedingung an die Verfahrenskoeffizienten, die im Folgenden vorausgesetzt wird, ist

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad 1 \leq i \leq s. \quad (28)$$

Satz über implizite Funktionen. Der Satz über implizite Funktionen sichert die Lösbarkeit eines nichtlinearen Gleichungssystems

$$G(x, y) = 0$$

in einer Umgebung einer bekannten Lösung (x_0, y_0) . Es bezeichne $G : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}^n : (x, y) \mapsto G(x, y)$ (mit offenen Mengen $X \subset \mathbb{R}^m$ und $Y \subset \mathbb{R}^n$) eine stetig differenzierbare Funktion. Weiters seien für ein Element $(x_0, y_0) \in X \times Y$ die folgenden Bedingungen erfüllt (partielle Ableitung bezüglich y)

$$G(x_0, y_0) = 0, \quad \partial_2 G(x_0, y_0) \text{ invertierbar.}$$

Dann existiert eine eindeutig bestimmte stetig differenzierbare Funktion $g : X_0 \subset X \rightarrow Y_0 \subset Y$ (definiert auf offenen Umgebungen X_0 von x_0 und Y_0 von y_0) mit den Eigenschaften

$$g(x_0) = y_0, \quad G(x, g(x)) = 0 \text{ für alle Elemente } x \in X_0.$$

¹⁰John Butcher (31. März 1933)

Lösbarkeit von impliziten Runge–Kutta-Verfahren. Um die Existenz und Eindeutigkeit der numerischen Lösung sicherzustellen, ist bei impliziten Runge–Kutta-Verfahren (27) die Lösbarkeit des nichtlinearen Gleichungssystems $G(h, Y'_n) = 0$ mit

$$G(h, Y'_n) = G(h, Y'_{n1}, \dots, Y'_{ns}) = \begin{pmatrix} Y'_{n1} - f\left(t_n + c_1 h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{1j} Y'_{nj}\right) \\ \vdots \\ Y'_{ns} - f\left(t_n + c_s h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{sj} Y'_{nj}\right) \end{pmatrix}$$

zu untersuchen. Für $h = 0$ ist eine Lösung durch

$$G(0, f(t_n, y_n), \dots, f(t_n, y_n)) = 0$$

gegeben. Unter gewissen Regularitätsvoraussetzungen an die Funktion f folgt

$$\partial_2 G(h, Y'_n) = I - h \left(a_{ij} \partial_2 f\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{\ell=1}^s a_{i\ell} Y'_{n\ell}\right) \right)_{1 \leq i, j \leq s},$$

$$\partial_2 G(0, Y'_n) = I \text{ invertierbar.}$$

Somit sichert der Satz über implizite Funktionen für hinreichend kleine Zeitinkremente $h > 0$ die eindeutige Lösbarkeit des definierenden Systems

$$G(h, Y'_n) = 0 \iff \begin{cases} Y'_{ni} = f(t_n + c_i h, Y_{ni}), \\ Y_{ni} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Y'_{nj}, \end{cases} \quad 1 \leq i \leq s.$$

Lokaler Fehler, Ordnung. Ein Runge–Kutta-Verfahren (27) besitzt die **Ordnung** (Konsistenzordnung, lokale Konvergenzordnung) $p \geq 1$, falls der **lokale Fehler**

$$y_1 - y(t_1) = y_1 - y(t_0 + h)$$

für hinreichend reguläre Funktionen f und exakte Anfangswerte $y_0 = y(t_0)$ die Relation

$$y_1 - y(t_1) = \mathcal{O}(h^{p+1}) \quad \text{für } h \rightarrow 0$$

erfüllt.

Runge–Kutta Verfahren der Ordnungen $p = 1, 2$. Vgl. Kapitel 1 (Nachweis der Ordnung).

- Explizites Eulerverfahren ($s = p = 1$)

$$\begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline & 1 \end{array}$$

Erklärung. Einsetzen der Verfahrenskoeffizienten $a_{11} = 0$, $c_1 = 0$, $b_1 = 1$ in die Rekursion (27) ergibt $Y_{n1} = y_n$ und $Y'_{n1} = f(t_n, Y_{n1}) = f(t_n, y_n)$, und wegen $y_{n+1} = y_n + h Y'_{n1}$ folgt somit

$$y_{n+1} = y_n + h f(t_n, y_n),$$

vgl. (11). \diamond

- Implizites Eulerverfahren ($s = p = 1$)

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Erklärung. Einsetzen der Koeffizienten $a_{11} = 1$, $c_1 = 1$, $b_1 = 1$ in (27) ergibt $Y'_{n1} = f(t_{n+1}, Y_{n1})$ und folglich $Y_{n1} = y_n + hY'_{n1} = y_n + hf(t_{n+1}, Y_{n1})$. Wegen $y_{n+1} = y_n + hY'_{n1} = Y_{n1}$ ergibt sich somit

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1}),$$

vgl. (12). \diamond

- Implizite Mittelpunktsregel ($s = 1$, $p = 2$)

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array}$$

Erklärung. Einsetzen der Koeffizienten $a_{11} = \frac{1}{2}$, $c_1 = \frac{1}{2}$, $b_1 = 1$ in (27) ergibt die Relationen $Y'_{n1} = f(t_n + \frac{h}{2}, Y_{n1})$, $Y_{n1} = y_n + \frac{h}{2}Y'_{n1}$ und $y_{n+1} = y_n + hY'_{n1}$. Aus $\frac{1}{2}(y_{n+1} - y_n) = \frac{h}{2}Y'_{n1} = Y_{n1} - y_n$ folgt $Y_{n1} = \frac{1}{2}(y_n + y_{n+1})$ bzw. $Y'_{n1} = f(t_n + \frac{h}{2}, \frac{1}{2}(y_n + y_{n+1}))$ und somit

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(\frac{t_n + t_{n+1}}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right),$$

vgl. (13). \diamond

Konstruktion von Runge–Kutta Verfahren und Ordnungsbedingungen. Zur Konstruktion einfacher Runge–Kutta-Verfahren (27) wie des expliziten bzw. impliziten Eulerverfahrens oder der impliziten Mittelpunktsregel kann man die Formulierung des Anfangswertproblems (26) als Integralgleichung

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(t, y(t)), \\ y(t_0) \text{ gegeben,} \end{cases} \iff y(t) = y(t_0) + \int_{t_0}^t f(\tau, y(\tau)) d\tau$$

nützen. Die Anwendung einer Quadraturformel mit Gewichten $(b_i)_{1 \leq i \leq s}$ und Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ führt auf

$$y(t_n + h) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_n+h} f(\tau, y(\tau)) d\tau \approx y(t_n) + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)),$$

im Vergleich mit der definierenden Relation für die Runge–Kutta Lösung

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, Y_{ni}).$$

Im Spezialfall einer Funktion $f(t, y) = f(t)$ zeigt dies, daß die Verfahrenskoeffizienten eines Runge–Kutta-Verfahrens der Ordnung $p \geq 1$ insbesondere die Ordnungsbedingungen für Quadraturformeln (Einsetzen der Monome $f(t) = t^{k-1}$ für $1 \leq k \leq p$)

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k}, \quad 1 \leq k \leq p, \quad (29)$$

erfüllen. Taylorreihenentwicklungen des exakten Lösungswertes $y(t_1) = y(t_0 + h)$ und der Runge-Kutta Lösung y_1 bezüglich der Zeitschrittweite h (mit Entwicklungspunkt $h = 0$) führen auf folgende **Ordnungsbedingungen** (algebraische Bedingungen an die Verfahrenskoeffizienten, ohne Erklärung, vgl. unten)

$$\text{Ordnung } p = 1: \quad \sum_{i=1}^s b_i = 1,$$

$$\text{Ordnung } p = 2: \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i = \frac{1}{2},$$

$$\text{Ordnung } p = 3: \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} c_j = \frac{1}{6}.$$

Dies zeigt, daß unter der zusätzlichen Bedingung (28)

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad 1 \leq i \leq s,$$

bei Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung $p = 1, 2$ nur die Quadraturbedingungen auftreten.

- Für $p = s = 1$ folgt $b = 1$ und für $c_1 = 0$ bzw. $c_1 = 1$ ergibt sich das explizite bzw. implizite Eulerverfahren (mit $a_{11} = c_1$).
- Für $p = 2$ und $s = 1$ folgt $b_1 = 1$ sowie $c_1 = \frac{1}{2}$, was auf die implizite Mittelpunktsregel führt (mit $a_{11} = c_1$).
- Für $p = s = 2$ und Knoten $c_1 = 0, c_2 = 1$ ergeben sich die Bedingungen $b_1 + b_2 = 1$ sowie $b_1 c_1 + b_2 c_2 = b_2 = \frac{1}{2}$ und somit $b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$. Wegen $0 = c_1 = a_{11} + a_{12}$ sowie $1 = c_2 = a_{21} + a_{22}$ ergeben sich als Entsprechungen der Trapezregel beispielsweise folgende explizite Runge-Kutta-Verfahren mit $a_{11} = 0 = a_{12}$ und $a_{12} = a_{21} = \frac{1}{2}$ oder $a_{21} = 1, a_{22} = 0$.

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

Für $p \geq 4$ ist die Herleitung der Ordnungsbedingungen technisch schwierig, eine wesentlich bessere und elegantere Alternative nützt graphentheoretische Mittel (Bäume, B-Reihen).

3.1.2 Kollokationsverfahren

Vorbemerkung. Kollokationsverfahren führen auf spezielle implizite Runge–Kutta-Verfahren und ermöglichen es, dafür auf vergleichsweise einfache Weise Aussagen über Eigenschaften der Verfahren wie lokale Konvergenzordnung, Stabilitätseigenschaften (A - und B -Stabilität) sowie Symplektizität, was wesentlich in Hinblick auf Langzeitintegrationen ist, nachzuweisen.

Kollokationsverfahren. Es seien $\mathbf{c} = (c_i)_{1 \leq i \leq s}$ vorgegebene paarweise verschiedene reelle Knoten mit $0 \leq c_i \leq 1$ für $1 \leq i \leq s$. Das zugehörige **Kollokationspolynom** (auf dem n -ten Teilintervall $[t_n, t_{n+1}]$) ist ein Polynom $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ vom Grad $\leq s$, welches den folgenden Bedingungen genügt

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)), & 1 \leq i \leq s, \\ u(t_n) = y_n, \end{cases}$$

d.h. das Kollokationspolynom erfüllt die Differentialgleichung in (26) an den Stützstellen $t_n + c_i h$ und die (numerische) Anfangsbedingung. Die **Kollokationslösung** ist dann durch den Funktionswert des Polynoms bei $t_{n+1} = t_n + h$ definiert

$$y_{n+1} = u(t_{n+1}).$$

Durch Auswertung des entsprechenden Kollokationspolynoms für $t \in [t_0, T]$ erhält man neben den diskreten Approximationswerten $(y_n)_{1 \leq n \leq N}$ zudem auch stetige Approximationswerte (**continuous output**).

Zusammenhang mit Runge–Kutta-Verfahren. Im Spezialfall $s = 1$, d.h. bei Vorgabe eines Knotens $0 \leq c_1 \leq 1$, ist das Kollokationspolynom vom Grad ≤ 1 von der Form (Anfangsbedingung erfüllt)

$$u(t) = y_n + a(t - t_n).$$

Wegen $u'(t) = a$ folgt aus der Bedingung $u'(t_n + c_1 h) = f(t_n + c_1 h, u(t_n + c_1 h))$ die Relation

$$a = f(t_n + c_1 h, y_n + a c_1 h), \quad y_{n+1} = u(t_{n+1}) = y_n + a h.$$

Für die Knotenwahl $c_1 = 0$, $c_1 = \frac{1}{2}$ bzw. $c_1 = 1$ ergeben sich bekannte Runge–Kutta-Verfahren.

- Explizites Eulerverfahren

$$c_1 = 0: \quad a = f(t_n, y_n), \quad y_{n+1} = y_n + h f(t_n, y_n).$$

- Implizites Eulerverfahren

$$c_1 = 1: \quad \begin{cases} a = f(t_{n+1}, y_n + a h) = f(t_{n+1}, y_{n+1}), \\ y_{n+1} = y_n + a h, \end{cases} \quad y_{n+1} = y_n + h f(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

- Implizite Mittelpunktsregel

$$c_1 = \frac{1}{2}: \quad \begin{cases} a = f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} a) = f(\frac{t_n + t_{n+1}}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2}), \\ y_{n+1} = y_n + a h, \end{cases} \quad y_{n+1} = y_n + h f(\frac{t_n + t_{n+1}}{2}, \frac{y_n + y_{n+1}}{2}).$$

Allgemein gilt folgendes Resultat.

Theorem. Jedes Kollokationsverfahren zu s paarweise verschiedenen Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ ist äquivalent zu einem s -stufigen Runge–Kutta-Verfahren (27) mit Koeffizienten

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \ell_j(\tau) \, d\tau, \quad b_i = \int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau, \quad (30)$$

wobei die Lagrange-Polynome $(\ell_i)_{1 \leq i \leq s}$ durch

$$\ell_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} : \tau \mapsto \ell_i(\tau) = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^s \frac{\tau - c_j}{c_i - c_j}, \quad 1 \leq i \leq s,$$

gegeben sind.

Beweis. Das Kollokationspolynom u (eigentlich $u = u_{[t_n, t_{n+1}]}$) zu den paarweise verschiedenen Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ ist ein Polynom vom Grad $\leq s$, das durch die Anfangsbedingung $u(t_n) = y_n$ sowie die s Bedingungen $u'(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h))$ für $1 \leq i \leq s$ eindeutig bestimmt ist. Da die Lagrange-Polynome eine Basis des Raumes der Polynome vom Grad $\leq s - 1$ bilden, folgt

$$q(\tau) = \sum_{i=1}^s q(c_i) \ell_i(\tau), \quad \text{gr } q \leq s - 1,$$

und insbesondere mit $q : \tau \mapsto u'(t_n + \tau h)$ (Polynom vom Grad $\leq s - 1$)

$$u'(t_n + \tau h) = \sum_{i=1}^s u'(t_n + c_i h) \ell_i(\tau).$$

Integration der obigen Identität, Einsetzen der Anfangsbedingung $u(t_n) = y_n$ sowie $y_{n+1} = u(t_n + h)$ und (30) führt auf

$$\begin{aligned} u(t_n + c_i h) - y_n &= u(t_n + \tau h) \Big|_{\tau=0}^{c_i} = h \int_0^{c_i} u'(t_n + \tau h) \, d\tau = h \sum_{i=1}^s u'(t_n + c_i h) \int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s a_{ij} u'(t_n + c_i h), \\ y_{n+1} - y_n &= u(t_n + \tau h) \Big|_{\tau=0}^1 = h \int_0^1 u'(t_n + \tau h) \, d\tau = h \sum_{i=1}^s u'(t_n + c_i h) \int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i u'(t_n + c_i h). \end{aligned}$$

Dies ergibt gerade die definierenden Rekursion eines Runge–Kutta-Verfahrens mit

$$Y_{ni} = u(t_n + c_i h), \quad Y'_{ni} = u'(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) = f(t_n + c_i h, Y_{ni}),$$

vgl. (27). \diamond

Folgerung. Für $p \geq 1$ und $q \geq 1$ betrachte die Bedingungen

$$\begin{aligned} B(p) : \quad & \sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k}, \quad 1 \leq k \leq p, \\ C(q) : \quad & \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} = \frac{1}{k} c_i^k, \quad 1 \leq k \leq q, \quad 1 \leq i \leq s, \end{aligned}$$

vgl. auch Ordnungsbedingungen für Quadraturformeln (29). Jedes zu einem Kollokationsverfahren äquivalente s -stufige Runge–Kutta-Verfahren (27) erfüllt dann die Bedingungen $B(p)$ sowie $C(s)$.

Erklärung. Aus der Darstellung der Monome $f(t) = t^{k-1}$ für $1 \leq k \leq s$ mittels Lagrange-Basispolynomen ($\ell_i(c_k) = \delta_{ik}$ für $1 \leq i, k \leq s$) folgt

$$t^{k-1} = f(t) = \sum_{i=1}^s f(c_i) \ell_i(t) = \sum_{i=1}^s c_i^{k-1} \ell_i(t), \quad 1 \leq k \leq s. \quad (31)$$

Da die Koeffizienten des Runge–Kutta-Verfahrens durch (30)

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \ell_j(\tau) d\tau, \quad b_i = \int_0^1 \ell_i(\tau) d\tau,$$

gegeben sind, ergibt sich

$$B(s): \quad \sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \sum_{i=1}^s \int_0^1 \ell_i(\tau) d\tau c_i^{k-1} = \int_0^1 \sum_{i=1}^s c_i^{k-1} \ell_i(\tau) d\tau = \int_0^1 \tau^{k-1} d\tau = \frac{1}{k}, \quad 1 \leq k \leq s,$$

und weiters

$$C(s): \quad \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} = \int_0^{c_i} \sum_{j=1}^s c_j^{k-1} \ell_j(\tau) d\tau = \int_0^{c_i} \tau^{k-1} d\tau = \frac{1}{k} c_i^k, \quad 1 \leq i, k \leq s,$$

was zu zeigen war. \diamond

Bemerkung. Das folgende Resultat sichert, daß ein Kollokationsverfahren dieselbe Ordnung wie die zugrundeliegende Quadraturformel besitzt, und stellt damit eine wesentliche Erleichterung bei der Konstruktion von impliziten Runge–Kutta-Verfahren hoher Ordnung dar.

Theorem. Falls die Koeffizienten eines zu einem Kollokationsverfahren äquivalenten impliziten s -stufigen Runge–Kutta-Verfahrens die Bedingung $B(p)$ für ein $p \geq s$ erfüllen, dann besitzt das Verfahren Ordnung p .

Beweis. Es ist zu zeigen, daß der lokale Fehler des Kollokationsverfahrens die Relation

$$y_{n+1} - y(t_{n+1}) = \mathcal{O}(h^{p+1})$$

erfüllt, wobei $y_n = y(t_n)$ angenommen wird. Die Idee ist es, das durch die Bedingungen

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)), & 1 \leq i \leq s, \\ u(t_n) = y_n, \end{cases}$$

bestimmte Kollokationspolynom als Lösung der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t)) + r(t), \quad t_n \leq t \leq t_{n+1},$$

mit zusätzlicher zeitabhängiger Inhomogenität (Störungsterm) zu betrachten. Beachte, daß

$$r(t_n + c_i h) = \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) - f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) = 0, \quad 1 \leq i \leq s.$$

Bilden der Differenz mit der ursprünglichen Differentialgleichung ergibt

$$\frac{d}{dt} u(t) - \frac{d}{dt} y(t) = f(t, u(t)) - f(t, y(t)) + r(t), \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}.$$

Eine Taylorreihenentwicklung von f führt weiters auf

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} u(t) - \frac{d}{dt} y(t) &= f(t, \tau u(t) + (1 - \tau)y(t)) \Big|_{\tau=0}^1 + r(t) \\ &= \int_0^1 \partial_\tau f(t, \tau u(t) + (1 - \tau)y(t)) d\tau + r(t) \\ &= \int_0^1 \partial_y f(t, \tau u(t) + (1 - \tau)y(t)) d\tau (u(t) - y(t)) + r(t), \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}. \end{aligned}$$

Die Funktion $d = u - y$ erfüllt somit eine nichtautonome lineare Differentialgleichung mit zusätzlicher Inhomogenität

$$\frac{d}{dt} d(t) = A(t) d(t) + r(t), \quad A(t) = \int_0^1 \partial_y f(t, \tau u(t) + (1 - \tau)y(t)) d\tau, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1},$$

sowie die Anfangsbedingung $d(t_n) = u(t_n) - y(t_n) = 0$, da für die Untersuchung des lokalen Fehlers $y_n = y(t_n)$ angenommen ist. Mittels linearer Variation-der-Konstanten Formel folgt die Lösungsdarstellung

$$d(t) = \int_{t_n}^t \Omega(t, \tau) r(\tau) d\tau, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1},$$

wobei $\Omega(t, s)$ die Resolvente der zugehörigen homogenen Differentialgleichung bezeichnet

$$\frac{d}{dt} \Omega(t, \tau) = A(t) \Omega(t, \tau), \quad \Omega(t, t) = I, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}.$$

Differentiation ergibt nämlich

$$\frac{d}{dt} d(t) = \int_{t_n}^t A(t) \Omega(t, \tau) r(\tau) d\tau + \Omega(t, t) r(t) = A(t) d(t) + r(t), \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}.$$

Insgesamt ergibt sich für den lokalen Verfahrensfehler die Darstellung

$$y_{n+1} - y(t_{n+1}) = u(t_{n+1}) - y(t_{n+1}) = d(t_{n+1}) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau.$$

Wegen $r(t_n + c_i h) = 0$ für $1 \leq i \leq s$ und da nach Voraussetzung die Quadraturformel (b_i, c_i) Ordnung $p \geq s$ besitzt, was gerade der Bedingung $B(p)$ entspricht, folgt

$$y_{n+1} - y(t_{n+1}) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau - h \sum_{i=1}^s b_i \Omega(t_{n+1}, t_n + c_i h) r(t_n + c_i h) = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

was die Behauptung ist. \diamond

Bemerkung. Ein weiteres Resultat sichert, daß das Kollokationspolynom auf dem entsprechenden Teilintervall die lokale Ordnung s besitzt.

Theorem. Das Kollokationspolynom besitzt auf dem zugehörigen Teilintervall $[t_n, t_{n+1}]$ die lokale Ordnung s , das heißt, für hinreichend kleine Schrittweiten $0 < h \leq h_0$ gilt

$$\|u(t) - y(t)\| \leq C h^{s+1}, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}.$$

Außerdem erfüllen die Ableitungen die Abschätzung

$$\|u^{(k)}(t) - y^{(k)}(t)\| \leq C h^{s+1-k}, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}, \quad 1 \leq k \leq s.$$

Beweis. Die Darstellung der ersten Ableitung des Kollokationspolynoms mittels Lagrange-Polynomen führt auf

$$u'(t_n + \tau h) = \sum_{i=1}^s u'(t_n + c_i h) \ell_i(\tau) = \sum_{i=1}^s f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) \ell_i(\tau), \quad 0 \leq \tau \leq 1.$$

Andererseits ergibt sich mittels Interpolation durch die s Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ für die exakte Lösung der Differentialgleichung die Relation

$$y'(t_n + \tau h) = f(t_n + \tau h, y(t_n + \tau h)) = \sum_{i=1}^s f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)) \ell_i(\tau) + \mathcal{O}(h^s), \quad 0 \leq \tau \leq 1,$$

wobei der Interpolationsfehlerterm von der $(s+1)$ -ten Ableitung der Lösung y abhängt. Bilden der Differenz und Integration führt auf

$$\begin{aligned} & \frac{1}{h} \left((u(t_n + \tau h) - y(t_n + \tau h)) - (u(t_n) - y(t_n)) \right) \\ &= \int_0^\tau (u'(t_n + \sigma h) - y'(t_n + \sigma h)) d\sigma \\ &= \sum_{i=1}^s \left(f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) - f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)) \right) \int_0^\tau \ell_i(\sigma) d\sigma + \mathcal{O}(h^s). \end{aligned} \quad (32)$$

Wegen $u(t_n) - y(t_n) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ und durch Anwendung der Lipschitz-Stetigkeit von f ergibt sich die Abschätzung

$$\begin{aligned} \max_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t) - y(t)\| &\leq C h \sum_{i=1}^s \|u(t_n + c_i h) - y(t_n + c_i h)\| + C h^{s+1} \\ &\leq C h \max_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t) - y(t)\| + C h^{s+1}, \end{aligned}$$

was für hinreichend klein gewählte Schrittweiten auf die erste Behauptung führt

$$\max_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t) - y(t)\| \leq C h^{s+1}.$$

Differentiation der Relation (32) zeigt die weitere Behauptung. \diamond

Gauß-Kollokationsverfahren. Die Wahl der s -stufigen Gaußschen Quadraturformel mit zugehörigen Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ gegeben als Nullstellen des s -ten Legendre-Polynoms

$$P: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}: x \mapsto P(x) = \frac{d^s}{dx^s} (x^s (1-x)^s)$$

führt auf ein implizites Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung $p = 2s$. Neben den Stabilitätseigenschaften A -stabil und B -stabil sind Gaußsche Quadraturformel symplektisch, weswegen sie für Langzeitintegrationen geeigneter als andere Verfahren sind.

- Speziell für $s = 1$ ergibt sich die implizite Mittelpunktsregel.

Radau-Kollokationsverfahren. Die Wahl der s -stufigen Radau-Quadraturformel mit $c_s = 1$ führt auf implizite Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung $p = 2s - 1$ (Radau IIA Verfahren). Obwohl diese Verfahren für steife Differentialgleichungen wie beispielsweise Zeitdiskretisierungen von parabolischen partiellen Differentialgleichungen bedeutsam sind, sind sie aufgrund fehlender Symmetrie- und Symplektizitätseigenschaften nicht für Langzeitintegrationen geeignet.

Lobatto-Kollokationsverfahren. Die Wahl der s -stufigen Lobatto-Quadraturformel mit zugehörigen Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ gegeben als Nullstellen des Polynoms

$$P: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}: x \mapsto P(x) = \frac{d^{s-2}}{dx^{s-2}} (x^{s-1}(1-x)^{s-1}),$$

wobei insbesondere $c_1 = 0$ und $c_s = 1$, führt auf ein implizites Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung $p = 2s - 2$ (Lobatto IIIA).

- Speziell für $s = 2$ ergibt sich die implizite Trapezregel.

3.1.3 Unstetige Kollokationsverfahren

Vorbemerkung. Die Betrachtung unstetiger Kollokationsverfahren ermöglicht es, auf vergleichsweise einfache Weise Aussagen über Eigenschaften von gewissen Verfahrensklassen wie lokale Konvergenzordnung, Stabilitätseigenschaften (A - und B -Stabilität) sowie Symplektizität herzuleiten. Um sicherzustellen, daß die Ordnung des Kollokationsverfahrens mit der Ordnung der zugrundeliegenden Quadraturformel übereinstimmt, wird die Kollokationslösung folgendermaßen definiert.

Unstetige Kollokationsverfahren. Es seien $(c_i)_{2 \leq i \leq s-1}$ vorgegebene paarweise verschiedene reelle Knoten mit $0 \leq c_i \leq 1$ für $2 \leq i \leq s-1$ und $b_1, b_s \in \mathbb{R}$ zwei Gewichte. Das zum **unstetigen Kollokationsverfahren** gehörige Polynom (auf dem n -ten Teilintervall $[t_n, t_{n+1}]$) ist ein Polynom $u: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ vom Grad $\leq s-2$, welches den folgenden Bedingungen genügt

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)), & 2 \leq i \leq s-1, \\ u(t_n) = y_n - h b_1 \left(\frac{d}{dt} u(t_n) - f(t_n, u(t_n)) \right), \end{cases}$$

d.h. das Kollokationspolynom erfüllt die Differentialgleichung in (26) an den inneren Stützstellen $t_n + c_i h$ für $2 \leq i \leq s-1$ und eine spezielle Anfangsbedingung, welche die Differenz $\frac{d}{dt} u(t_n + c_1 h) - f(t_n + c_1 h, u(t_n + c_1 h))$ mit $c_1 = 0$ beinhaltet. Die **Kollokationslösung** ist dann mittels des Funktionswertes des Polynoms bei $t_{n+1} = t_n + h$ und die Differenz $\frac{d}{dt} u(t_n + c_s h) - f(t_n + c_s h, u(t_n + c_s h))$ mit $c_s = 1$ definiert

$$y_{n+1} = u(t_{n+1}) - h b_s \left(\frac{d}{dt} u(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1})) \right).$$

Bemerkung. Das erste Resultat zeigt die Äquivalenz von unstetigen Kollokationsverfahren und speziellen impliziten Runge–Kutta-Verfahren.

Theorem. Jedes unstetige Kollokationsverfahren zu $s-2$ paarweise verschiedenen Knoten $(c_i)_{2 \leq i \leq s-1}$ und Gewichten $b_1, b_s \in \mathbb{R}$ ist äquivalent zu einem s -stufigen Runge–Kutta-Verfahren (27) mit Koeffizienten gegeben durch die Bedingungen

$$c_1 = 0, \quad c_s = 1, \quad a_{i1} = b_1, \quad a_{is} = 0, \quad 1 \leq i \leq s, \quad B(s-2), \quad C(s-2).$$

Beweis. Ähnlich wie zuvor nützt man, daß die Lagrange-Polynome zu den $s-2$ paarweise verschiedenen Knoten $(c_i)_{2 \leq i \leq s-1}$ eine Basis des Raumes der Polynome vom Grad $\leq s-3$ bilden, d.h., es folgt

$$q(\tau) = \sum_{i=2}^{s-1} q(c_i) \ell_i(\tau), \quad \text{gr } q \leq s-3,$$

und insbesondere mit $q: \tau \mapsto u'(t_n + \tau h)$ (Polynom vom Grad $\leq s-3$) gilt

$$u'(t_n + \tau h) = \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \ell_i(\tau).$$

Auswerten bei $\tau = 0$ sowie $\tau = 1$ ergibt

$$u'(t_n) = \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \ell_i(0), \quad u'(t_{n+1}) = \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \ell_i(1).$$

Integration der obigen Identität und Einsetzen der Relation $u(t_n) = y_n - h b_1 (u'(t_n) - f(t_n, u(t_n)))$ führt somit auf

$$\begin{aligned}
 u(t_n + c_i h) &= u(t_n) + u(t_n + \tau h) \Big|_{\tau=0}^{c_i} \\
 &= u(t_n) + h \int_0^{c_i} u'(t_n + \tau h) \, d\tau \\
 &= y_n - h b_1 u'(t_n) + h b_1 f(t_n, u(t_n)) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau \\
 &= y_n - h b_1 \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \ell_i(0) + h b_1 f(t_n, u(t_n)) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau \\
 &= y_n + h b_1 f(t_n, u(t_n)) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \left(\int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) \right),
 \end{aligned}$$

was mittels $Y_{ni} = u(t_n + c_i h)$ sowie $Y'_{ni} = u'(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) = f(t_n + c_i h, Y_{ni})$ für $1 \leq i \leq s-1$ mit $c_1 = 0$ die Relation

$$Y_{ni} = y_n + h b_1 Y'_{n1} + h \sum_{i=2}^{s-1} Y'_{ni} \left(\int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) \right)$$

ergibt. In ähnlicher Weise erhält man mittels $y_{n+1} = u(t_{n+1}) - h b_s \left(\frac{d}{dt} u(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1})) \right)$

$$\begin{aligned}
 u(t_{n+1}) &= u(t_n) + h \int_0^1 u'(t_n + \tau h) \, d\tau = u(t_n) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau \\
 \Rightarrow y_{n+1} &= u(t_n) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - h b_s (u'(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))) \\
 &= u(t_n) + h \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \left(\int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - b_s \ell_i(1) \right) + h b_s f(t_{n+1}, u(t_{n+1})) \\
 &= y_n + h b_1 Y'_{n1} + h \sum_{i=2}^{s-1} Y'_{ni} \left(\int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) - b_s \ell_i(1) \right) + h b_s Y'_{ns}.
 \end{aligned}$$

Insgesamt zeigt dies den Zusammenhang mit einem Runge-Kutta-Verfahren mit Koeffizienten

$$\begin{aligned}
 a_{i1} &= b_1, & a_{ij} &= \int_0^{c_i} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0), & 2 \leq i \leq s-1, & & a_{is} &= 0, & 1 \leq i \leq s, \\
 b_i &= \int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) - b_s \ell_i(1), & 2 \leq i \leq s-1.
 \end{aligned}$$

Es bleibt zu zeigen, daß die Ordnungsbedingungen $B(s-2)$ und $C(s-2)$, das heißt

$$\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k}, \quad \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} = \frac{1}{k} c_i^k, \quad 1 \leq k \leq s-2,$$

erfüllt sind. Wegen $c_1 = 0$ sowie $c_s = 1$ und der Darstellung der Polynome $q(\tau) = \tau^{k-1}$ für $1 \leq k \leq s-2$ mittels der $s-2$ Lagrange-Polynome folgt

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^s b_i &= b_1 + \sum_{i=2}^{s-1} \left(\int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) - b_s \ell_i(1) \right) + b_s \\
&= b_1 + \int_0^1 \sum_{i=2}^{s-1} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \sum_{i=2}^{s-1} \ell_i(0) - b_s \sum_{i=2}^{s-1} \ell_i(1) + b_s \\
&= b_1 + 1 - b_1 - b_s + b_s \\
&= 1, \\
\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} &= \sum_{i=2}^{s-1} \left(\int_0^1 \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \ell_i(0) - b_s \ell_i(1) \right) c_i^{k-1} + b_s \\
&= \int_0^1 \sum_{i=2}^{s-1} c_i^{k-1} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \sum_{i=2}^{s-1} c_i^{k-1} \ell_i(0) - b_s \sum_{i=2}^{s-1} c_i^{k-1} \ell_i(1) + b_s \\
&= \int_0^1 \tau^{k-1} \, d\tau \\
&= \frac{1}{k}, \quad 2 \leq k \leq s-2, \\
\sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} &= a_{i1} c_1^{k-1} + \sum_{j=2}^{s-1} a_{ij} c_j^{k-1} + a_{is} c_s^{k-1} \\
&= b_1 c_1^{k-1} + \int_0^{c_i} \sum_{j=2}^{s-1} c_j^{k-1} \ell_i(\tau) \, d\tau - b_1 \sum_{j=2}^{s-1} c_j^{k-1} \ell_i(0) \\
&= b_1 c_1^{k-1} + \int_0^{c_i} \tau^{k-1} \, d\tau - b_1 \tau^{k-1} \Big|_{\tau=0} \\
&= \frac{1}{k} c_i^k, \quad 1 \leq k \leq s-2,
\end{aligned}$$

was die Behauptung zeigt. \diamond

Bemerkung. Unstetige Kollokationsverfahren sind so konstruiert, daß sie analog zu stetigen Kollokationsverfahren dieselbe Ordnung wie die zugrundeliegende Quadraturformel besitzen.

Theorem. Falls die Koeffizienten eines zu einem unstetigen Kollokationsverfahren äquivalenten impliziten s -stufigen Runge–Kutta-Verfahren die Bedingung $B(p)$ für ein $p \geq s$ erfüllen, dann besitzt das Verfahren Ordnung p .

Beweis. Es ist zu zeigen, daß der lokale Fehler des Kollokationsverfahrens die Relation

$$y_{n+1} - y(t_{n+1}) = \mathcal{O}(h^{p+1})$$

erfüllt, wobei $y_n = y(t_n)$ angenommen wird. Wie bei stetigen Kollokationsverfahren ist die Idee, das durch die Bedingungen

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) = f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)), & 2 \leq i \leq s-1, \\ u(t_n) = y_n - h b_1 \left(\frac{d}{dt} u(t_n) - f(t_n, u(t_n)) \right), \\ y_{n+1} = u(t_{n+1}) - h b_s \left(\frac{d}{dt} u(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1})) \right), \end{cases}$$

bestimmte Kollokationspolynom als Lösung der Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} u(t) = f(t, u(t)) + r(t), \quad t_n \leq t \leq t_{n+1},$$

mit zusätzlicher zeitabhängiger Inhomogenität (Störungsterm) zu betrachten und dabei die Bedingungen

$$r(t_n + c_i h) = \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) - f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) = 0, \quad 2 \leq i \leq s-1,$$

zu nutzen. Die selbe Vorgehensweise wie bei stetigen Kollokationsverfahren führt auf eine nicht-autonome lineare Differentialgleichung für die Funktion $d = u - y$

$$\frac{d}{dt} d(t) = A(t) d(t) + r(t), \quad A(t) = \int_0^1 \partial_y f(t, \tau u(t) + (1-\tau)y(t)) d\tau, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1},$$

mit folgender Lösungsdarstellung

$$d(t) = \Omega(t, t_n) d(t_n) + \int_{t_n}^t \Omega(t, \tau) r(\tau) d\tau, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}.$$

Für den lokalen Verfahrensfehler ergibt sich mit der Notation $r(t) = u'(t) - f(t, u(t))$ die Relation

$$\begin{aligned} y_{n+1} - y(t_{n+1}) &= u(t_{n+1}) - h b_s (u'(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))) - y(t_{n+1}) \\ &= d(t_{n+1}) - h b_s (u'(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))) \\ &= \Omega(t_{n+1}, t_n) (u(t_n) - y_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau \\ &\quad - h b_s (u'(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))) \\ &= -h b_1 \Omega(t_{n+1}, t_n) (u'(t_n) - f(t_n, u(t_n))) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau \\ &\quad - h b_s (u'(t_{n+1}) - f(t_{n+1}, u(t_{n+1}))) \\ &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau - h b_1 \Omega(t_{n+1}, t_n) r(t_n) - h b_s \Omega(t_{n+1}, t_{n+1}) r(t_{n+1}). \end{aligned}$$

Wegen $r(t_n + c_i h) = 0$ für $2 \leq i \leq s-1$ und da nach Voraussetzung die Quadraturformel (b_i, c_i) Ordnung $p \geq s$ besitzt, folgt

$$y_{n+1} - y(t_{n+1}) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Omega(t_{n+1}, \tau) r(\tau) d\tau - h \sum_{i=1}^s b_i \Omega(t_{n+1}, t_n + c_i h) r(t_n + c_i h) = \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

was die Behauptung ist. \diamond

Bemerkung. Im Gegensatz zu stetigen Kollokationsverfahren besitzt ein unstetiges Kollokationsverfahren auf dem entsprechenden Teilintervall die lokale Ordnung $s-1$.

Theorem. Das zu einem unstetigen Kollokationsverfahren zugehörige Polynom besitzt auf dem zugehörigen Teilintervall $[t_n, t_{n+1}]$ die lokale Ordnung $s-1$, genauer, für hinreichend kleine Schrittweiten $0 < h \leq h_0$ gilt

$$\|u(t) - y(t)\| \leq C h^{s-1}, \quad \|u^{(k)}(t) - y^{(k)}(t)\| \leq C h^{s-1-k}, \quad t_n \leq t \leq t_{n+1}, \quad 1 \leq k \leq s-2.$$

Beweis. Die Darstellung der ersten Ableitung des Kollokationspolynoms mittels Lagrange-Polynomen führt auf

$$u'(t_n + \tau h) = \sum_{i=2}^{s-1} u'(t_n + c_i h) \ell_i(\tau) = \sum_{i=2}^{s-1} f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) \ell_i(\tau), \quad 0 \leq \tau \leq 1.$$

Andererseits ergibt sich mittels Interpolation durch die $s - 2$ Knoten $(c_i)_{2 \leq i \leq s-1}$ für die exakte Lösung der Differentialgleichung die Relation

$$y'(t_n + \tau h) = f(t_n + \tau h, y(t_n + \tau h)) = \sum_{i=2}^{s-1} f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)) \ell_i(\tau) + \mathcal{O}(h^{s-2}), \quad 0 \leq \tau \leq 1,$$

wobei der Interpolationsfehlerterm von der $(s - 1)$ -ten Ableitung der Lösung y abhängt. Bilden der Differenz, Integration und Einsetzen der Anfangsbedingung führt auf

$$\begin{aligned} u(t_n + \tau h) - y(t_n + \tau h) &= y_n - y(t_n) \\ &+ h \sum_{i=2}^{s-1} \left(f(t_n + c_i h, u(t_n + c_i h)) - f(t_n + c_i h, y(t_n + c_i h)) \right) \int_0^\tau \ell_i(\tau) d\tau \\ &- h b_1 \left(\frac{d}{dt} u(t_n) - f(t_n, u(t_n)) \right) + \mathcal{O}(h^{s-1}). \end{aligned}$$

Wegen $y_n - y(t_n) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ und durch Anwendung der Lipschitz-Stetigkeit von f ergibt sich für hinreichend klein gewählte Schrittweiten die Abschätzung

$$\max_{t_n \leq t \leq t_{n+1}} \|u(t) - y(t)\| \leq C h \|u'(t_n) - f(t_n, u(t_n))\| + C h^{s-1} \leq C h^{s-1},$$

was auf die erste Behauptung führt. Differentiation ergibt die Behauptung für die Ableitung. \diamond

Bemerkung. Unstetige Kollokationsverfahren beinhalten stetige Kollokationsverfahren als Spezialfall mit $b_1 = 0$ und $b_s = 0$.

Lobatto-Kollokationsverfahren. Die Wahl der s -stufigen Lobatto-Quadraturformel mit zugehörigen Knoten $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ gegeben als Nullstellen des Polynoms

$$P: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}: x \mapsto P(x) = \frac{d^{s-2}}{dx^{s-2}} (x^{s-1} (1-x)^{s-1}),$$

wobei insbesondere $c_1 = 0$ und $c_s = 1$, führt auf ein unstetiges Kollokationsverfahren der Ordnung $p = 2s - 2$ (Lobatto IIIB). In Kombination mit den Lobatto-IIIA-Verfahren bilden diese Verfahren eine wesentliche Verfahrensklasse für Langzeitintegrationen.

3.1.4 Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren

Vorbemerkung. Für Langzeitintegrationen von Hamiltonsystemen wesentliche Verfahren wie das symplektische Eulerverfahren oder das Störmer–Verlet-Verfahren zählen zwar nicht zur Verfahrensklasse der Runge–Kutta-Verfahren, jedoch zur Klasse der partitionierten Runge–Kutta-Verfahren. Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren ergeben sich durch Anwendung von zwei Runge–Kutta-Verfahren auf **Differentialgleichungen in partitionierter Form** für Funktionen $y: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{d_1}$ und $z: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{d_2}$ (mit $d_1, d_2 \geq 1$ und $d_1 + d_2 = d$)

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(y(t), z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(y(t), z(t)), \end{cases} \quad (33)$$

wobei $f: \mathbb{R}^{d_1} \times \mathbb{R}^{d_2} \rightarrow \mathbb{R}^{d_1}$ und $g: \mathbb{R}^{d_1} \times \mathbb{R}^{d_2} \rightarrow \mathbb{R}^{d_2}$, vgl. auch (14).

Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren. Es seien $\mathfrak{b} = (b_i)_{1 \leq i \leq s} \in \mathbb{R}^s$, $\mathfrak{A} = (a_{ij})_{1 \leq i, j \leq s} \in \mathbb{R}^{s \times s}$ und $\hat{\mathfrak{b}} = (\hat{b}_i)_{1 \leq i \leq s} \in \mathbb{R}^s$, $\hat{\mathfrak{A}} = (\hat{a}_{ij})_{1 \leq i, j \leq s} \in \mathbb{R}^{s \times s}$ die Koeffizienten zweier s -stufiger Runge–Kutta-Verfahren. Das zugehörige **partitionierte Runge–Kutta-Verfahren** zur näherungsweise Lösung des partitionierten Differentialgleichungssystems (33) ist durch die Rekursion

$$\begin{cases} Y'_{ni} = f(Y_{ni}, Z_{ni}), & Z'_{ni} = g(Y_{ni}, Z_{ni}), \\ Y_{ni} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Y'_{nj}, & Z_{ni} = z_n + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} Z'_{nj}, & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i Y'_{ni}, & z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i Z'_{ni}, & 0 \leq n \leq N-1, \end{cases} \quad (34)$$

gegeben.

Symplektisches Eulerverfahren. Die Kombination des expliziten Eulerverfahrens und des impliziten Eulerverfahrens

$$s = 1, \quad a_{11} = 1, \quad b_1 = 1, \quad \hat{a}_{11} = 0, \quad \hat{b}_1 = 1,$$

führt auf das symplektische Eulerverfahren (15) der Ordnung $p = 1$

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(y_{n+1}, z_n), \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_{n+1}, z_n). \end{cases}$$

als partitioniertes Runge–Kutta-Verfahren (34), da aus

$$\begin{aligned} Y'_{n1} &= f(Y_{n1}, Z_{n1}), & Y_{n1} &= y_n + h Y'_{n1}, & Z'_{n1} &= g(Y_{n1}, Z_{n1}), & Z_{n1} &= z_n, \\ y_{n+1} &= y_n + h Y'_{n1}, & z_{n+1} &= z_n + h Z'_{n1}, \end{aligned}$$

die Relationen $Y_{n1} = y_n + h Y'_{n1} = y_{n+1}$, $Z_{n1} = z_n$ und somit $Y'_{n1} = f(Y_{n1}, Z_{n1}) = f(y_{n+1}, z_n)$ bzw. $Z'_{n1} = g(Y_{n1}, Z_{n1}) = g(y_{n+1}, z_n)$ folgen.

Störmer–Verlet-Verfahren. Das Störmer–Verlet-Verfahren der Ordnung $p = 2$ ergibt sich als zweistufiges partitioniertes Runge–Kutta-Verfahren (34) zu den Verfahrenskoeffizienten

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

Insbesondere für ein partitioniertes System der Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(z(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(y(t)), \end{cases}$$

ergeben sich aus

$$\begin{aligned} Y'_{n1} &= f(Z_{n1}), & Z'_{n1} &= g(Y_{n1}), & Y'_{n2} &= f(Z_{n2}), & Z'_{n2} &= g(Y_{n2}), \\ Y_{n1} &= y_n, & Y_{n2} &= y_n + \frac{1}{2}h(Y'_{n1} + Y'_{n2}), & Z_{n1} &= z_n + \frac{1}{2}hZ'_{n1}, & Z_{n2} &= z_n + \frac{1}{2}hZ'_{n1}, \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}h(Y'_{n1} + Y'_{n2}), & z_{n+1} &= z_n + \frac{1}{2}h(Z'_{n1} + Z'_{n2}), \end{aligned}$$

die Relationen

$$\begin{aligned} Y'_{n1} &= f(Z_{n1}), & Z'_{n1} &= g(y_n), & Y'_{n2} &= f(Z_{n1}), & Z'_{n2} &= g(y_{n+1}), \\ Y_{n2} &= y_n + \frac{1}{2}h(Y'_{n1} + Y'_{n2}) = y_{n+1}, & Z_{n1} &= Z_{n2} = z_n + \frac{1}{2}hZ'_{n1} = z_n + \frac{1}{2}hg(y_n), \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}h(Y'_{n1} + Y'_{n2}), & z_{n+1} &= z_n + \frac{1}{2}h(Z'_{n1} + Z'_{n2}), \end{aligned}$$

und somit wegen $z_{n+1} = z_n + \frac{1}{2}h(g(y_n) + g(y_{n+1})) = Z_{n1} + \frac{1}{2}hg(y_{n+1})$ die Rekursion

$$\begin{cases} Z_{n1} = z_n + \frac{1}{2}hg(y_n), \\ y_{n+1} = y_n + hf(Z_{n1}), \\ z_{n+1} = Z_{n1} + \frac{1}{2}hg(y_{n+1}), \end{cases}$$

vgl. auch (17).

Bemerkung. Partitionierte Runge–Kutta-Verfahren bilden spezielle Einschrittverfahren $(y_n, z_n) \rightarrow (y_{n+1}, z_{n+1})$, und somit ist der Begriff der Konsistenzordnung direkt anwendbar. Aus der Betrachtung entkoppelter Systeme der Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = f(y(t)), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(z(t)), \end{cases}$$

folgt unmittelbar, daß die Ordnung des partitionierten Verfahren die Bedingung $\leq \min(p, \hat{p})$ erfüllen muß, wobei p, \hat{p} die Ordnungen der Runge–Kutta-Verfahren $(b, \mathfrak{A}), (\hat{b}, \hat{\mathfrak{A}})$ bezeichnet. Im Allgemeinen ist es kompliziert, die Ordnungsbedingungen für ein partitioniertes Runge–Kutta-Verfahren herzuleiten. Im Zusammenhang mit Langzeitintegration nützt man deshalb folgendes Resultat zu Paaren von Lobatto-IIIAB-Verfahren, welche die Verallgemeinerung des Störmer–Verlet-Verfahrens darstellen.

Lobatto-IIIAB-Verfahren. Das aus dem s -stufigen Lobatto-III A-Verfahren und dem s -stufigen Lobatto-III B-Verfahren gebildete partitionierte Runge–Kutta-Verfahren kann als unstetiges Kollokationsverfahren betrachtet werden. Es besitzt somit dieselbe Ordnung wie die zugrundeliegende Quadraturformel, d.h. $p = 2s - 2$, und die zugehörigen Polynome genügen den Abschätzungen

$$\begin{cases} \|u^{(k)}(t) - y^{(k)}(t)\| \leq C h^{s-k}, & 0 \leq k \leq s, \\ \|v^{(k)}(t) - z^{(k)}(t)\| \leq C h^{s-1-k}, & 0 \leq k \leq s-2. \end{cases}$$

Beweis. Es seien $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$ mit $c_1 = 0$ und $c_s = 1$ die Knoten der s -stufigen Lobatto-Quadraturformel und $(b_i)_{1 \leq i \leq s}$ die zugehörigen Gewichte. Analoge Untersuchungen wie für Runge–Kutta-Verfahren zeigen, daß Paare von Lobatto-III AB-Verfahren für (33) als unstetige Kollokationsverfahren betrachtet werden können, wobei die zugehörigen Polynome u, v vom Grad $\leq s$ bzw. $\leq s - 2$ die Bedingungen

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u(t_n + c_i h) = f(u(t_n + c_i h), v(t_n + c_i h)), & 1 \leq i \leq s, \\ \frac{d}{dt} v(t_n + c_i h) = g(u(t_n + c_i h), v(t_n + c_i h)), & 2 \leq i \leq s-1, \\ u(t_n) = y_n, \\ v(t_n) = z_n - h b_1 \left(\frac{d}{dt} v(t_n) - g(u(t_n), v(t_n)) \right), \\ y_{n+1} = u(t_{n+1}), \\ z_{n+1} = v(t_{n+1}) - h b_s \left(\frac{d}{dt} v(t_{n+1}) - g(u(t_{n+1}), v(t_{n+1})) \right), \end{cases}$$

erfüllen. Ähnliche Überlegungen wie zuvor zeigen die angegebenen Abschätzungen. \diamond

3.1.5 Nyström-Verfahren

Nyström-Verfahren. Nyström-Verfahren sind spezielle Verfahren für Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\frac{d^2}{dt^2} y(t) = g\left(t, y(t), \frac{d}{dt} y(t)\right). \quad (35)$$

Die Einführung der Hilfsfunktion $z = \frac{d}{dt} y$ führt auf ein partitioniertes System erster Ordnung (33) der speziellen Form

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} y(t) = z(t), \\ \frac{d}{dt} z(t) = g(t, y(t), z(t)), \end{cases}$$

wofür ein partitioniertes Runge–Kutta-Verfahren (34) die Approximation

$$\begin{cases} Y'_{ni} = Z_{ni}, & Z'_{ni} = g(t_n + c_i h, Y_{ni}, Z_{ni}), \\ Y_{ni} = y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Y'_{nj}, & Z_{ni} = z_n + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} Z'_{nj}, \end{cases} \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i Y'_{ni}, \quad z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i Z'_{ni}, \quad 0 \leq n \leq N-1,$$

ergibt. Ersetzen der internen Stufen Y_{ni} und Y'_{ni} ergibt

$$\begin{cases} Z'_{ni} = g\left(t_n + c_i h, y_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} Z_{nj}, Z_{ni}\right), \\ Z_{ni} = z_n + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} Z'_{nj}, \end{cases} \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i Z_{ni}, \quad z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i Z'_{ni}, \quad 0 \leq n \leq N-1.$$

Weiteres Eliminieren von Z_{ni} und Verwendung der Bedingungen

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad 1 \leq i \leq s, \quad \sum_{i=1}^s b_i = 1,$$

führt schließlich auf die übliche Formulierung eines **Nyström-Verfahrens** zur numerischen Lösung der Differentialgleichung zweiter Ordnung (35) mit Hilfsgrößen z_n, Z_{ni}

$$\begin{aligned} Z'_{ni} &= g\left(t_n + c_i h, y_n + c_i h z_n + h^2 \sum_{j,k=1}^s a_{ij} \hat{a}_{ik} Z'_{nk}, z_n + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} Z'_{nj}\right), \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} &= y_n + h z_n + h^2 \sum_{i,j=1}^s b_i \hat{a}_{ij} Z'_{nj}, \quad z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i Z'_{ni}, \quad 0 \leq n \leq N-1. \end{aligned} \quad (36)$$

Bemerkung. Ein Nyström-Verfahren besitzt die lokale Konvergenzordnung $p \geq 1$, wenn folgende Bedingung erfüllt ist

$$\|y_1 - y(h)\| + \|z_1 - z(h)\| = \mathcal{O}(h^{p+1}), \quad h \rightarrow 0. \quad (37)$$

Spezialfall und Störmer-Verlet-Verfahren. Für Differentialgleichungen zweiter Ordnung der speziellen Form

$$\frac{d^2}{dt^2} y(t) = g(t, y(t)),$$

das heißt, ohne explizite Abhängigkeit von der ersten Ableitung $\frac{d}{dt}y(t)$ vereinfacht sich die Rekursion (36) zu

$$\begin{aligned} \alpha_{ik} &= \sum_{j=1}^s a_{ij} \hat{a}_{ik}, \quad \beta_j = \sum_{i=1}^s b_i \hat{a}_{ij}, \quad 1 \leq i, j, k \leq s, \\ Z'_{ni} &= g\left(t_n + c_i h, y_n + c_i h z_n + h^2 \sum_{j=1}^s \alpha_{ij} Z'_{nj}\right), \quad 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} &= y_n + h z_n + h^2 \sum_{i=1}^s \beta_i Z'_{ni}, \quad z_{n+1} = z_n + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i Z'_{ni}, \quad 0 \leq n \leq N-1. \end{aligned}$$

Für die Koeffizientenwahl

$$s = 1, \quad c_1 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_{11} = 0, \quad \beta_1 = 1, \quad \hat{b}_1 = 1,$$

ergibt sich das Nyström-Verfahren

$$y_{n+1} = y_n + h z_n + h^2 g\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} z_n\right), \quad z_{n+1} = z_n + h g\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} z_n\right), \quad 0 \leq n \leq N-1,$$

welches den folgenden Relationen entspricht (mit $t_{n+1/2} = t_n + \frac{h}{2}$)

$$y_{n+1/2} = y_n + \frac{h}{2} z_n, \quad z_{n+1} = z_n + h g(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}), \quad y_{n+1} = y_n + h z_{n+1}, \quad 0 \leq n \leq N-1.$$

Das Störmer-Verlet-Verfahren erhält man für die Wahl

$$s = 2, \quad c_1 = 0, \quad c_2 = 1, \quad \alpha_{11} = \alpha_{12} = \alpha_{22} = 0, \quad \alpha_{21} = \frac{1}{2}, \quad \beta_1 = \frac{1}{2}, \quad \beta_2 = 0, \quad \hat{b}_1 = \hat{b}_2 = \frac{1}{2},$$

da sich aus den folgenden Relationen

$$\begin{aligned} Z'_{n1} &= g(t_n, y_n), \quad Z'_{n2} = g\left(t_{n+1}, y_n + h z_n + \frac{1}{2} h^2 Z'_{n1}\right), \\ y_{n+1} &= y_n + h z_n + \frac{1}{2} h^2 Z'_{n1}, \quad z_{n+1} = z_n + \frac{1}{2} h (Z'_{n1} + Z'_{n2}), \quad 0 \leq n \leq N-1, \end{aligned}$$

weitere $Z'_{n2} = g(t_{n+1}, y_{n+1})$ und somit

$$\begin{aligned} z_{n+1/2} &= z_n + \frac{h}{2} g(t_n, y_n), \\ y_{n+1} &= y_n + h z_{n+1/2}, \quad z_{n+1} = z_{n+1/2} + \frac{h}{2} g(t_{n+1}, y_{n+1}), \quad 0 \leq n \leq N-1, \end{aligned}$$

ergibt, was dem Störmer-Verlet-Verfahren (17) mit zusätzlicher Zeitabhängigkeit der definierenden Funktion g entspricht.