

Adiabatische Integratoren für hochoszillatorische Hamilton-Systeme

Dissertation

der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität Tübingen

zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften

vorgelegt von
Katina Lorenz
aus Stuttgart

Sommersemester 2006

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Juli 2006

Dekan: Prof. Dr. Peter Schmid

Erster Berichterstatter: Prof. Dr. Christian Lubich

Zweiter Berichterstatter: Prof. Dr. Stefan Teufel

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Hamilton-Systeme mit zeitabhängigen hohen Frequenzen	3
1.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen	3
1.2 Hamilton-Systeme mit zeitabhängigen hohen Frequenzen	4
1.3 Numerische Aspekte und Ziele	5
1.4 Transformationen	6
1.5 Adiabatische Invarianten und Dynamik von Fastkreuzungen	18
2 Adiabatische Integratoren I: lineare Phasenapproximation	26
2.1 Notation	27
2.2 Verfahren für ein vereinfachtes Modell	28
2.3 Splitting-Verfahren	35
2.4 Fehleranalyse: Resultate	40
2.5 Numerische Beispiele	45
2.6 Schrittweitensteuerung	51
2.7 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 2 (1. Verfahren)	55
2.8 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 3 & 4 (Splitting-Verfahren)	68
3 Adiabatische Integratoren II: quadratische Phasenapproximation	75
3.1 Die adiabatische Mittelpunktsregel	75
3.2 Das adiabatische Magnusverfahren	83
3.3 Fehleranalyse: Resultate	85
3.4 Numerische Beispiele	88
3.5 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 5	90
3.6 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 6	98

4	Hamilton-Systeme mit lösungsabhängigen hohen Frequenzen	99
4.1	Problemfeld	99
4.2	Transformationen	104
4.3	Adiabatische Invarianten	114
4.4	Dynamik von Fastkreuzungen	117
4.5	Numerische Integratoren	123
4.6	Numerische Beispiele	126
	Literaturverzeichnis	130
	Danksagung	133

Einleitung

Mechanische Systeme mit hohen Oszillationen und Bewegungen auf mehreren Zeitskalen begegnen uns, wenn auch oft nicht bewusst, in vielen Lebensbereichen. Schon das für Lehrer störende Vibrieren eines Lineals an der Tischkante fällt in diese Problemklasse. Die Motivation für Wissenschaftler aus Mathematik, Physik, Chemie und Biologie sich mit hochoszillatorischen mechanischen Systemen, insbesondere Hamilton-Systemen auseinanderzusetzen, rührt allerdings eher von anderen, in der Natur weit verbreiteten Phänomenen her, wie zum Beispiel Problemen aus der Moleküldynamik, Astrophysik oder Wellenausbreitung (hierunter fällt im weitesten Sinne auch unser Beispiel mit dem Lineal). Ihnen zugrunde liegen hochoszillatorische Differentialgleichungen, deren Integration schon seit langem eine numerische Herausforderung darstellt (siehe u.a. [8], Kapitel XIII und XIV sowie [25]).

Um eine Lösung mit ausreichender Genauigkeit approximieren zu können, müssen Standardintegratoren Schrittweiten verwenden, die deutlich kleiner sind als die kleinste Periode der Oszillationen. Trotz deutlich verbesserter Rechenleistung und stetiger Weiterentwicklung der Computerhardware warten wir mit solchen Integratoren mitunter Wochen auf akzeptable Lösungen. Seit über 40 Jahren gibt es deshalb Versuche geeignete Integratoren für hochoszillatorische mechanische Systeme zu entwickeln. Geeignet bedeutet in diesem Fall vor allem größere Schrittweiten verwenden zu können, ohne große Verluste in der Genauigkeit der Verfahren hinnehmen zu müssen.

Einer der ersten Versuche größere Schrittweiten zu verwenden wurde von Gautschi [6] vorgenommen, der trigonometrische Integratoren für Differentialgleichungen der Form $\ddot{x} + \omega^2 x = g(t, x)$ mit einer festen Frequenz ω präsentiert. Auch in jüngerer Zeit wurden Integratoren vom Gautschi-Typ weiterentwickelt und andere Ansätze gesucht mit dem Ziel, günstig an gute Lösungsapproximationen zu kommen [5, 7, 12].

Bei obiger Differentialgleichung bleiben die hohen Frequenzen der Oszillationen konstant; neue Aspekte ergeben sich, wenn die hohen Frequenzen und ihre assoziierten Eigenräume zeit- oder lösungsabhängig sind. Kommt es dabei zu einer Fastkreuzung von Eigenfrequenzen, das heißt zwei Eigenfrequenzen nähern sich einander an und trennen sich wieder, ohne dass eine echte Kreuzung zwischen ihnen stattfindet, beobachten wir neue Phänomene bis hin zu chaotischem Verhalten [2, 26, 28].

Für den Fall eines Hamilton-Systems mit zeitabhängigen hohen Frequenzen existieren bereits einige Lösungsansätze in der Literatur, die unter anderem Magnus-Integratoren verwenden [3, 7, 13].

In der vorliegenden Arbeit werden neue Integratoren für nichtlineare oszillatorische mechanische Systeme mit zeit- und lösungsabhängigen hohen Frequenzen entwickelt, die auf einer Transformation eines vorliegenden Hamilton-Systems in sogenannte adiabatische Variablen beruhen.

Die Arbeit lässt sich in zwei große Teile gliedern; der Erste umfasst Kapitel 1 bis 3 und behandelt den Fall zeitabhängiger hoher Frequenzen. Wir beginnen mit einer Darstellung des Ausgangsproblems im Hamiltonschen Formalismus und bringen das System durch eine Reihe von Transformationen in eine für Numerik und Analyse geeignetere Form. In Kapitel 2 und 3 stellen wir Integratoren vor, die auf die transformierten Gleichungen angewendet werden und damit auch die Lösungen des ursprünglichen Systems deutlich effektiver annähern, als dies mit den bekannten Integratoren gelingt. In jedem der Kapitel wird eine Fehleranalyse durchgeführt und das Verhalten der Verfahren an Beispielen veranschaulicht. Auch ein symmetrisches Verfahren zur Wahl adaptiver Schrittweiten beim Auftreten von Fastkreuzungen wird vorgestellt und illustriert.

Der zweite Teil besteht aus Kapitel 4 und beschäftigt sich mit dem Fall lösungsabhängiger hoher Frequenzen. Auch hier erreichen wir mit der Transformation des Systems eine numerisch und analytisch geeignetere Gestalt, in welcher wir unter anderem das Auftreten von chaotischem Verhalten der Lösungen nach vermiedenen Kreuzungen der Eigenfrequenzen näher beleuchten. Wir stellen zwei neue Integratoren vor und illustrieren ihr Verhalten ebenfalls an numerischen Beispielen.

Kapitel 1

Hamilton-Systeme mit zeitabhängigen hohen Frequenzen

1.1 Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Die Dynamik mechanischer Systeme lässt sich durch Hamiltons kanonische Gleichungen modellieren. Hier sei dazu eine explizit zeitabhängige Hamiltonfunktion

$$H(p_1, \dots, p_d, q_1, \dots, q_d, t) : \mathbb{R}^{d \times d} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

gegeben, wobei q_i die Positionskoordinaten der beteiligten Massepunkte und p_i die jeweils konjugierten Impulse bezeichnen. Der Index i nimmt die Werte $i = 1, \dots, d$ an; d entspricht der Anzahl der Freiheitsgrade des Systems.

Durch Einführung der Energievariablen E als konjugierte Variable zur Zeit t erhalten wir die kanonischen Bewegungsgleichungen für p , q , E und t :

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\nabla_q H(p, q, t), & \dot{t} &= 1, \\ \dot{q} &= \nabla_p H(p, q, t), & \dot{E} &= -\frac{\partial H}{\partial t}(p, q, t), \end{aligned} \quad (1.1)$$

$\nabla_q H$ und $\nabla_p H$ sind dabei definiert als Vektoren der jeweiligen partiellen Ableitungen von H und die Bewegung des Systems ergibt sich aus der Zuordnung $t \rightarrow (p(t), q(t))$.

Lässt sich die kinetische Energie eines mechanischen Systems als quadratische Funktion $T(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T M(t)^{-1} p$ mit einer symmetrisch positiv definiten Massematrix

$M(t)$ schreiben, so beschreibt die Hamiltonfunktion H die Gesamtenergie des Systems, also die Summe aus kinetischer und potentieller Energie,

$$H(p, q, t) = T(p, q, t) + U(q, t).$$

Durch Einführung der Energievariablen E wird die Hamiltonfunktion erweitert zu $\hat{H}(p, E, q, t) = H(p, q, t) + E$. Entlang der Lösungskurven von (1.1) bleibt diese Gesamtenergie des Systems konstant, d.h. $\hat{H}(p(t), q(t), t) = \text{Const.}$, was sich aus $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \nabla_q H \cdot \dot{q} + \nabla_p H \cdot \dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} + \dot{E} = 0$ leicht ersehen lässt. In dieser Dissertation werden dabei ausschließlich Systeme mit beschränkter Energie betrachtet, also $H(p(t), q(t), t) \leq \text{Const.} < \infty$.

1.2 Hamilton-Systeme mit zeitabhängigen hohen Frequenzen

Zunächst untersuchen wir oszillatorische mechanische Systeme, deren Frequenzen von der Zeit abhängen und die durch folgende zeitabhängige Hamiltonfunktion gegeben sind

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T M(t)^{-1} p + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^T A(t) q + U(q, t). \quad (1.2)$$

Die potentielle Energie des Systems wird hier repräsentiert durch $\frac{1}{2\varepsilon^2} q^T A(t) q + U(q, t)$, wobei der Parameter $\varepsilon > 0$ sehr kleine Werte annimmt ($\varepsilon \ll 1$). $M(t)$ ist die bereits angesprochene Massematrix aus der kinetischen Energie des Systems, $A(t)$ eine positiv semidefinite sogenannte Steifigkeitsmatrix, deren Ableitungen als unabhängig von ε beschränkt angenommen werden und $U(q, t)$ steht für ein glattes Potential. Die Anwesenheit von ε im Nenner führt zu Oszillationen in Positionen und Impulsen, deren Frequenz mit kleiner werdendem ε zunimmt.

Abbildung 1.1 illustriert diesen Effekt an einem einfachen Testbeispiel mit

$$M(t) \equiv \text{Id.}, U(q, t) \equiv 0 \text{ und } A(t) = B(t)^2 \text{ mit } B(t) = \begin{pmatrix} t+3 & 1 \\ 1 & 2t+3 \end{pmatrix}.$$

Der erste Eintrag in $q(t)$ wird auf $t \in [-1, 1]$ für $\varepsilon = 1, 0.1$ und 0.01 geplottet und die Zunahme der Oszillationen kann direkt beobachtet werden.

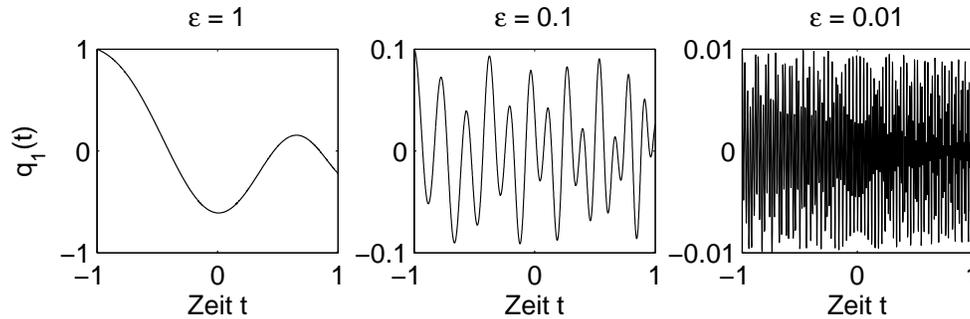


Abbildung 1.1: $q_1(t)$ für $\varepsilon = 1$ (links), 0.1 (Mitte) und 0.01 (rechts)

In praktischen Anwendungen sind allerdings noch deutlich kleinere Werte als $\varepsilon = 0.01$ und damit noch stärkere Oszillationen von Bedeutung.

Eine Hamiltonfunktion wie (1.2) beschreibt dann die Dynamik mechanischer Systeme, die stark oszillieren und gleichzeitig eine Bewegung auf einer langsameren Zeitskala ausführen, wie zum Beispiel die Oszillationen der Radaufhängung eines Autos [27] oder das Entfalten des Antennenarms eines Satelliten. Der zeitabhängige Fall ist aber auch eine wichtige Voraussetzung für die Untersuchung und das Verständnis des lösungsabhängigen Falls, welcher in Kapitel 4 näher betrachtet wird.

1.3 Numerische Aspekte und Ziele

Die Schwierigkeit bei der numerischen Lösung der Bewegungsgleichungen (1.1) zur Hamiltonfunktion (1.2) besteht darin, dass die Positionen und Impulse je nach Größe des Parameters ε stark oszillieren. Wie wir im vorigen Abschnitt gesehen haben, verhält sich die Geschwindigkeit dieser Oszillationen umgekehrt proportional zu ε , das Verhalten der Positionen $q(t)$ und Impulse $p(t)$ ist also wesentlich von ε abhängig. Verwendet man für die Lösung eines solchen Problems Standardverfahren wie zum Beispiel partitionierte Runge-Kutta-Verfahren (darunter das Störmer-Verlet-Verfahren), muss die Zeitschrittweite h so klein gewählt werden, dass jede Oszillation durch viele Schritte aufgelöst wird. In jedem dieser Zeitschritte müssen die Matrizen $M(t)$, $A(t)$ und das Potential U mindestens einmal ausgewertet werden, was einen hohen Rechenaufwand verursacht und sich dadurch in der Rechenzeit der Programme drastisch nieder schlägt.

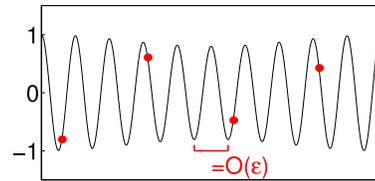
Dies führt dazu, dass manche Anwendungen und Probleme damit gar nicht adäquat gelöst werden (können).

Auch die Verfahren, die in letzter Zeit zur Lösung solcher Probleme vorgeschlagen wurden, wie zum Beispiel exponentielle oder trigonometrische Integratoren [3, 7, 12, 13], liefern nur für Werte $h \ll \varepsilon$ zufriedenstellende Ergebnisse bzw. benötigen viele teure Funktionsauswertungen pro Zeitschritt.

Ein Ziel der vorliegenden Arbeit ist es deshalb, neue numerische Integratoren zu entwickeln, welche speziell auf dieses Problem zugeschnitten sind.

Von einem solchen Verfahren erwarten wir:

- Das Verfahren soll mit Schrittweiten $h \geq \varepsilon$ angewandt werden können und trotzdem eine akzeptable Genauigkeit erreichen.
Das heißt, die Schrittweite kann so groß gewählt werden, dass die Funktion zwischen zwei Zeitschritten eine oder mehrere Oszillationen durchläuft (siehe auch nebenstehende Abbildung).
- Auch für sehr kleine Werte von ε soll das Verfahren präzise Resultate liefern.
- Das Verfahren soll zweite Ordnung haben; das bedeutet, dass der entstehende Approximationsfehler durch Ch^2 beschränkt bleiben soll mit einer von ε unabhängigen Konstanten C .
- Pro Zeitschritt soll das Verfahren maximal zwei Funktionsauswertungen benötigen.
- Das Verfahren soll zeitsymmetrisch sein.



Diese Erwartungen können nur erfüllt werden, wenn wir die besondere mathematische Struktur des Ausgangsproblems ausnutzen. Dazu investieren wir nun etwas Arbeit in Transformationen.

1.4 Transformationen

Vor der Entwicklung neuer Integratoren ist es sinnvoll, das Problem in eine günstigere Form zu bringen. Dazu werden eine Reihe kanonischer Transformationen auf die Hamiltonfunktion (1.2) angewandt mit dem Ziel, die Zeitskalen in den Bewegungsgleichungen annähernd zu trennen. Diese Fastseparation der Zeitskalen macht das

Problem für die numerische Diskretisierung im Folgenden leichter zugänglich. Ausgangssituation ist die Hamiltonfunktion (1.2)

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T M(t)^{-1} p + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^T A(t) q + U(q, t),$$

welche durch die Energievariable E ergänzt wird zu

$$\hat{H}(p, E, q, t) = H(p, q, t) + E. \quad (1.3)$$

Die kanonischen Bewegungsgleichungen lauten dann

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{1}{\varepsilon^2} A(t) q - \nabla_q U(q, t) \\ \dot{q} &= M(t)^{-1} p \end{aligned} \quad (1.4)$$

zusammen mit $\dot{E} = -\frac{\partial H}{\partial t}$ und $\dot{t} = 1$.

Sei nun $q = \chi(\tilde{q})$ eine Koordinatentransformation in den Positionen. Nach Beispiel 5.2 aus [8], Kapitel VI.5 kann diese Transformation zu einer symplektischen Transformation $(p, q) \rightarrow (\tilde{p}, \tilde{q})$ auf die Impulse erweitert werden, indem man $\tilde{p} = \chi'(\tilde{q})^T p$ setzt. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich dann wieder kanonisch aus der Hamiltonfunktion.

Diese Eigenschaft hilft uns dabei, eine Reihe von symplektischen Transformationen zu konstruieren und uns so Schritt für Schritt bzw. Lemma für Lemma, an eine annähernde Trennung der Zeitskalen heranzutasten.

Alle Lemmata bzw. Transformationen zusammengenommen ergeben schließlich:

Theorem 1 *Es existieren symplektische Transformationen $(p, E, q, t) \rightarrow (\hat{p}, \hat{E}, \hat{q}, \hat{t})$ mit $\hat{t} = t$, so dass die Hamiltonfunktion $\hat{H}(p, E, q, t)$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{p}, \hat{E}, \hat{q}, \hat{t}) &= \frac{1}{2} \hat{p}_0^T M_0(\hat{t})^{-1} \hat{p}_0 + \frac{1}{2\varepsilon} \hat{p}_1^T \Omega(\hat{t}) \hat{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon} \hat{q}_1^T \Omega(\hat{t}) \hat{q}_1 \\ &\quad + \hat{q}^T L(\hat{t}) \hat{p} + \frac{1}{2} \hat{q}^T S(\hat{t}) \hat{q} + U(B(\hat{t})T(\hat{t})\hat{q}, \hat{t}) + \hat{E} \end{aligned} \quad (1.5)$$

mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix $M_0(t)$, einer Diagonalmatrix $\Omega(t)$, einer unteren Dreiecksmatrix $L(t)$, einer symmetrischen Matrix $S(t)$, einer orthogonalen Matrix $B(t)$ und einer Transformationsmatrix $T(t)$, sowie einer Aufspaltung von p bzw. q in die Komponenten (p_0, p_1) bzw. (q_0, q_1) . Die Nebendiagonalblöcke von L und S sind dabei genauso klein wie die "schnellen" Variablen p_1 und q_1 und haben die Größenordnung $\mathcal{O}(\sqrt{\varepsilon})$.

Beweis: Der Beweis dieses Theorems ergibt sich durch die sukzessive Konstruktion entsprechender Transformationen in den folgenden Lemmata, deren Hintereinanderausführung wieder eine symplektische Transformation darstellt. \square

Die erste Transformation wird so konstruiert, dass die positiv semidefinite Steifigkeitsmatrix A in einen positiv definiten Block und einen Block mit Nullen aufgespalten wird.

Lemma 1 *Es existiert eine symplektische Transformation $q = B(t)\check{q}$, $t = \check{t}$, $B(t)$ orthogonal, so dass die Hamiltonfunktion $\hat{H}(p, E, q, t)$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \check{H}(\check{p}, \check{E}, \check{q}, \check{t}) &= \frac{1}{2} \check{p}^T \check{M}(\check{t})^{-1} \check{p} + \frac{1}{2\varepsilon^2} \check{q}^T \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_1(t) \end{pmatrix} \check{q} \\ &\quad - \check{q}^T \dot{B}(\check{t})^T B(\check{t}) \check{p} + \check{U}(\check{q}, \check{t}) + \check{E}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Beweis: Da $A(t)$ symmetrisch und positiv semidefinit ist, existiert eine orthogonale Matrix $B(t)$, die $A(t)$ auf folgende Blockdiagonalform bringt

$$A(t) = B(t) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_1(t) \end{pmatrix} B(t)^T, \quad (1.7)$$

wobei $A_1(t)$ nun symmetrisch und positiv definit ist.

Durch

$$\begin{pmatrix} \check{p} \\ \check{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B(\check{t})^T & 0 \\ \check{q}^T \dot{B}(\check{t})^T & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ E \end{pmatrix}$$

werden die angegebenen Transformationen in Ort und Zeit zu einer symplektischen Transformation erweitert und wir erhalten die Hamiltonfunktion \check{H} mit

$$\check{M}(\check{t})^{-1} = B(\check{t})^T M(\check{t})^{-1} B(\check{t}),$$

$$\check{U}(\check{q}, \check{t}) = U(B(\check{t})\check{q}, \check{t}) \quad \text{und}$$

$$\check{E} = E + \check{q}^T \dot{B}(\check{t})^T p. \quad \square$$

Wir können nun \check{p} und \check{q} analog zu den Blöcken in (1.7) zerlegen:

$$\check{p} = \begin{pmatrix} \check{p}_0 \\ \check{p}_1 \end{pmatrix}, \quad \check{q} = \begin{pmatrix} \check{q}_0 \\ \check{q}_1 \end{pmatrix}$$

und sprechen auch von \check{q}_0 als den *langsamen* Positionen, von \check{p}_0 als den *langsamen* Impulsen und von \check{q}_1 (\check{p}_1) als den *schnellen* Positionen (Impulsen). Da wir ausschließlich Systeme mit beschränkter Gesamtenergie ($\check{H} \leq \text{Const.}$) betrachten, muss \check{q}_1 von der Größenordnung ε sein:

$$\check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (1.8)$$

Mit der zweiten Transformation wird die neue Steifigkeitsmatrix $A_1(t)$ in die Identität transformiert.

Lemma 2 *Es existiert eine symplektische Transformation $\check{q}_0 = \tilde{q}_0$, $\check{q}_1 = C(t)\tilde{q}_1$, $\check{t} = \tilde{t}$, so dass die Hamiltonfunktion $\check{H}(\check{p}, \check{E}, \check{q}, \check{t})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\check{H}(\check{p}, \check{E}, \check{q}, \check{t}) = \frac{1}{2} \check{p}^T \tilde{M}(\tilde{t})^{-1} \check{p} + \frac{1}{2\varepsilon^2} \tilde{q}_1^T \tilde{q}_1 + \check{q}^T K(\tilde{t}) \check{p} + \tilde{U}(\tilde{q}, \tilde{t}) + \tilde{E}. \quad (1.9)$$

Beweis: Wir schreiben die Choleski-Zerlegung der Steifigkeitsmatrix $A_1(t)$ als

$$A_1(t) = C(t)^{-T} C(t)^{-1}$$

und transformieren Positionen und Zeit wie angegeben. Durch

$$\begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \\ \tilde{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & C(\tilde{t})^T & 0 \\ 0 & \tilde{q}_1^T \dot{C}(\tilde{t})^T & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \check{p}_0 \\ \check{p}_1 \\ \check{E} \end{pmatrix}$$

wird diese Transformation zu einer symplektischen Transformation erweitert.

Setzen wir

$$C_1(t) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & C(t) \end{pmatrix},$$

so erhalten wir die angegebene Hamiltonfunktion \check{H} mit

$$\begin{aligned} \tilde{M}(\tilde{t})^{-1} &= C_1(\tilde{t})^{-1} \check{M}(\tilde{t})^{-1} C_1(\tilde{t})^{-T}, \\ K(\tilde{t}) &= C_1(\tilde{t})^T B(\tilde{t})^T \dot{B}(\tilde{t}) C_1(\tilde{t})^{-T} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \dot{C}(\tilde{t})^T C(\tilde{t})^{-T} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$\tilde{U}(\tilde{q}, \tilde{t}) = \check{U}(C_1(\tilde{t})\tilde{q}, \tilde{t}) \quad \text{und}$$

$$\tilde{E} = \check{E} + \tilde{q}_1^T \dot{C}(\tilde{t})^T \check{p}_1. \quad \square$$

Als Nächstes werden die Blockmatrizen in der Nebendiagonalen der Massematrix \tilde{M} aus (1.9) eliminiert.

Lemma 3 *Es existiert eine symplektische Transformation $\tilde{q}_0 = \bar{q}_0 + G(\bar{t})\bar{q}_1$, $\tilde{q}_1 = \bar{q}_1$, $\tilde{t} = \bar{t}$, so dass die Hamiltonfunktion $\tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{E}, \tilde{q}, \tilde{t})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \bar{H}(\bar{p}, \bar{E}, \bar{q}, \bar{t}) &= \frac{1}{2} \bar{p}_0^T \bar{M}_0(\bar{t})^{-1} \bar{p}_0 + \frac{1}{2} \bar{p}_1^T \bar{M}_1(\bar{t})^{-1} \bar{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon^2} \bar{q}_1^T \bar{q}_1 \\ &\quad + \bar{q}^T \bar{K}(\bar{t}) \bar{p} + \bar{U}(\bar{q}, \bar{t}) + \bar{E}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Beweis: Wir schreiben die Massematrix $\tilde{M}(t)$ als

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} M_{00} & M_{01} \\ M_{10} & M_{11} \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

und setzen

$$G(t) = -M_{00}(t)^{-1} M_{01}(t).$$

Durch

$$\begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \\ \tilde{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ G(\bar{t})^T & I & 0 \\ \bar{q}_1^T \dot{G}(\bar{t})^T & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \\ \tilde{E} \end{pmatrix}$$

wird die im Lemma angegebene Transformation zu einer symplektischen Transformation erweitert.

Setzen wir

$$G_1(t) = \begin{pmatrix} I & G(t) \\ 0 & I \end{pmatrix},$$

so erhalten wir die angegebene Hamiltonfunktion \bar{H} mit

$$\begin{aligned} \bar{M}_0(\bar{t}) &= M_{00}(t), \\ \bar{M}_1(\bar{t}) &= M_{11}(t) - M_{10}(t)M_{00}(t)^{-1}M_{01}(t), \\ \bar{K}(\bar{t}) &= G_1(\bar{t})^T K(\bar{t}) G_1(\bar{t})^{-T} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \dot{G}(\bar{t})^T & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.13)$$

$$\bar{U}(\bar{q}, \bar{t}) = \check{U}(C_1(\bar{t})G_1(\bar{t})\bar{q}, \bar{t}) \quad \text{und}$$

$$\bar{E} = \tilde{E} + \bar{q}_1^T \dot{G}(\bar{t})^T \tilde{p}_0. \quad \square$$

Mit der folgenden Transformation wird die Massematrix $\bar{M}_1(\bar{t})$ der schnellen Variablen diagonalisiert.

Lemma 4 *Es existiert eine symplektische Transformation $\bar{q}_0 = \hat{q}_0$, $\bar{q}_1 = Q(t)\hat{q}_1$, $\bar{t} = \hat{t}$, $Q(t)$ orthogonal, so dass die Hamiltonfunktion $\bar{H}(\bar{p}, \bar{E}, \bar{q}, \bar{t})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{p}, \hat{E}, \hat{q}, \hat{t}) &= \frac{1}{2} \hat{p}_0^T \hat{M}_0(\hat{t})^{-1} \hat{p}_0 + \frac{1}{2} \hat{p}_1^T \Omega(\hat{t})^2 \hat{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon^2} \hat{q}_1^T \hat{q}_1 \\ &\quad + \hat{q}^T \hat{K}(\hat{t}) \hat{p} + \hat{U}(\hat{q}, \hat{t}) + \hat{E}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Beweis: Wir diagonalisieren

$$\bar{M}_1(t) = Q(t)\Omega(t)^{-2}Q(t)^T, \quad (1.15)$$

mit der Diagonalmatrix $\Omega(t) = \text{diag}(\omega_j(t))$ der Frequenzen und einer orthogonalen Matrix $Q(t)$, die glatt von t abhängt, falls die Frequenzen ω_j für alle Zeiten t voneinander getrennt bleiben.

Wir transformieren Positionen und Zeit wie angegeben und erhalten durch

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \\ \hat{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & Q(\hat{t})^T & 0 \\ 0 & \hat{q}_1^T \dot{Q}(\hat{t})^T & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{p}_0 \\ \bar{p}_1 \\ \bar{E} \end{pmatrix}$$

eine symplektische Transformation.

Setzen wir

$$\hat{Q}(t) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & Q(t) \end{pmatrix},$$

so erhalten wir die angegebene Hamiltonfunktion \hat{H} mit

$$\begin{aligned} \hat{M}_0(\hat{t}) &= \bar{M}_0(\hat{t}), \\ \hat{K}(\hat{t}) &= \begin{pmatrix} K_{00} & K_{01} \\ K_{10} & K_{11} \end{pmatrix} = \hat{Q}(\hat{t})^T \bar{K}(\hat{t}) \hat{Q}(\hat{t}) - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \dot{Q}(\hat{t})^T Q(\hat{t}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$\hat{U}(\hat{q}, \hat{t}) = \check{U}(C_1(\hat{t})G_1(\hat{t})\hat{Q}(\hat{t})\hat{q}, \hat{t}) \quad \text{und}$$

$$\hat{E} = \bar{E} + \hat{q}_1^T \dot{Q}(\hat{t})^T \bar{p}_1. \quad \square$$

Wir reskalieren nun die schnellen Positionen und Impulse.

Lemma 5 *Es existiert eine symplektische Transformation $\hat{q}_0 = \check{q}_0$, $\hat{q}_1 = \varepsilon^{\frac{1}{2}}\Omega(t)^{\frac{1}{2}}\check{q}_1$, $\hat{t} = \check{t}$, so dass die Hamiltonfunktion $\hat{H}(\hat{p}, \hat{E}, \hat{q}, \hat{t})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \check{H}(\check{p}, \check{E}, \check{q}, \check{t}) &= \frac{1}{2}\check{p}_0^T \check{M}_0(\check{t})^{-1}\check{p}_0 + \frac{1}{2\varepsilon}\check{p}_1^T \Omega(\check{t})\check{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon}\check{q}_1^T \Omega(\check{t})\check{q}_1 \\ &\quad + \check{q}^T \check{K}(\check{t})\check{p} + \check{U}(T(\check{t})\check{q}, \check{t}) + \check{E}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Beweis: Analog zu den vorigen Beweisen erweitern wir die Transformation durch

$$\begin{pmatrix} \check{p}_0 \\ \check{p}_1 \\ \check{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^{\frac{1}{2}}\Omega(\check{t})^{\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\varepsilon^{\frac{1}{2}}\check{q}_1^T \Omega(\check{t})^{-\frac{1}{2}}\dot{\Omega}(\check{t}) & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \\ \hat{E} \end{pmatrix}.$$

Wir setzen

$$T = (T_0 \mid \varepsilon^{\frac{1}{2}}T_1) = \begin{pmatrix} I & \varepsilon^{\frac{1}{2}}GQ\Omega^{\frac{1}{2}} \\ 0 & \varepsilon^{\frac{1}{2}}CQ\Omega^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix},$$

und erhalten die angegebene Hamiltonfunktion \check{H} mit

$$\check{M}_0(\check{t}) = \hat{M}_0(\check{t}),$$

$$\check{K}(\check{t}) = \begin{pmatrix} K_{00} & \varepsilon^{-\frac{1}{2}}K_{01}\Omega^{-\frac{1}{2}} \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}}\Omega^{\frac{1}{2}}K_{10} & \Omega^{\frac{1}{2}}K_{11}\Omega^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\Omega^{-1}\dot{\Omega} \end{pmatrix},$$

$$\check{U}(T(\check{t})\check{q}, \check{t}) = \check{U}(T(\check{t})\check{q}, \check{t}), \quad \text{und}$$

$$\check{E} = \hat{E} + \frac{1}{2}\varepsilon^{\frac{1}{2}}\check{q}_1^T \Omega(\check{t})^{-\frac{1}{2}}\dot{\Omega}(\check{t})\hat{p}_1. \quad \square$$

Mit der (vorerst) letzten kanonischen Transformation eliminieren wir den Block der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^{-\frac{1}{2}})$ in der Nebendiagonalen von \check{K} und sämtliche Haken, Tilden und sonstigen Unterscheidungszeichen...

Lemma 6 *Es existiert eine symplektische Transformation $-\check{p}_1 = -p_1 + \varepsilon^{\frac{1}{2}}\Omega^{-\frac{3}{2}}K_{01}^T\check{q}_0$, $\check{q}_0 = q_0$, $\check{t} = t$, so dass die Hamiltonfunktion $\check{H}(\check{p}, \check{E}, \check{q}, \check{t})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} H(p, E, q, t) &= \frac{1}{2}p_0^T M_0(t)^{-1}p_0 + \frac{1}{2\varepsilon}p_1^T \Omega(t)p_1 + \frac{1}{2\varepsilon}q_1^T \Omega(t)q_1 \\ &\quad + q^T L(t)p + \frac{1}{2}q^T S(t)q + U(B(t)T(t)q, t) + E. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Beweis: Wir transformieren die konjugierten Variablen durch

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ p_0 \\ E \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} K_{01} \Omega(t)^{-\frac{3}{2}} & I & 0 \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} q_0^T \frac{d}{dt} \left(K_{01} \Omega^{-\frac{3}{2}} \right) & 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \check{q}_1 \\ \check{p}_0 \\ \check{E} \end{pmatrix}.$$

In diesen Koordinaten hat die Hamiltonfunktion H obige Form mit der unteren Dreiecksmatrix

$$\begin{aligned} L &= \begin{pmatrix} L_{00} & 0 \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} L_{10} & L_{11} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} K_{00} & 0 \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} \Omega^{\frac{1}{2}} (K_{10} - \Omega^{-2} K_{01}^T M_0) & \Omega^{\frac{1}{2}} K_{11} \Omega^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \Omega^{-1} \dot{\Omega} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.19)$$

und der symmetrischen Matrix

$$S = \begin{pmatrix} S_{00} & \varepsilon^{\frac{1}{2}} S_{01} \\ \varepsilon^{\frac{1}{2}} S_{10} & \varepsilon S_{11} \end{pmatrix}, \quad (1.20)$$

wobei

$$\begin{aligned} S_{00} &= -K_{01} \Omega^{-2} K_{01}^T \\ S_{01} &= S_{10}^T = -K_{00} K_{01} \Omega^{-\frac{3}{2}} \\ &\quad - K_{01} \Omega^{-\frac{3}{2}} \left(\Omega^{-\frac{1}{2}} K_{11}^T \Omega^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{2} \Omega^{-1} \dot{\Omega} \right) - \frac{d}{dt} \left(K_{01} \Omega^{-\frac{3}{2}} \right) \\ S_{11} &= \Omega^{-\frac{3}{2}} \left(K_{01}^T M_0 K_{01} - \Omega^2 K_{10} K_{01} - K_{01}^T K_{10}^T \Omega^2 \right) \Omega^{-\frac{3}{2}} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} M_0(\check{t}) &= \check{M}_0(\check{t}), \\ E &= \check{E} + \varepsilon^{\frac{1}{2}} q_0^T \frac{d}{dt} \left(K_{01} \Omega^{-\frac{3}{2}} \right) \check{q}_1. \end{aligned} \quad \square$$

Da wir ausschließlich mechanische Systeme mit beschränkter Gesamtenergie $H \leq \text{Const.}$ betrachten, erhalten wir nun

$$p_1 = \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{1}{2}}\right), \quad q_1 = \mathcal{O}\left(\varepsilon^{\frac{1}{2}}\right). \quad (1.21)$$

In den neuen Koordinaten haben die Bewegungsgleichungen folgende Form

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= f_0(p, q, t) \\ \dot{q}_0 &= M_0(t)^{-1} p_0 + g_0(q, t) \end{aligned} \quad (1.22)$$

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_1 \\ \dot{q}_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 0 & -\Omega(t) \\ \Omega(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_1(p, q, t) \\ g_1(q, t) \end{pmatrix}$$

mit den gleichmäßig in ε beschränkten Funktionen

$$\begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \end{pmatrix} = -L(t)p - S(t)q - T(t)^T B(t)^T \nabla_q U(B(t)T(t)q, t), \quad \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \end{pmatrix} = L(t)^T q.$$

Mit Hilfe der konstanten unitären Matrix

$$\Gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} I & I \\ -iI & iI \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

können wir die schiefsymmetrische Matrix des Systems folgendermaßen diagonalisieren:

$$\begin{pmatrix} 0 & -\Omega(t) \\ \Omega(t) & 0 \end{pmatrix} = \Gamma \begin{pmatrix} i\Omega(t) & 0 \\ 0 & -i\Omega(t) \end{pmatrix} \Gamma^* \quad (1.24)$$

und damit das System ein letztes Mal transformieren.

Dazu definieren wir die diagonale Phasenmatrix $\Phi(t)$ als

$$\Phi(t) = \int_{t_0}^t \Lambda(s) ds \quad \text{mit} \quad \Lambda(s) = \begin{pmatrix} \Omega(s) & 0 \\ 0 & -\Omega(s) \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

und setzen

$$\eta(t) = \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \Phi(t)\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} p_1(t) \\ q_1(t) \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

η wird auch als “*adiabatische*” Variable bezeichnet, wobei wir für eine Erklärung des Begriffs adiabatisch auf Kapitel 1.5 verweisen. Jede Komponente des Vektors η entspricht einem Koeffizienten von $(p_1 \ q_1)^T$ in der Eigenbasis von $\begin{pmatrix} 0 & -\Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}$ und in der komplexen Ebene um die negative Phase gedreht.

Der Faktor $\varepsilon^{-\frac{1}{2}}$ in obiger Transformation gewährleistet zusammen mit (1.21), dass gilt

$$\eta = \mathcal{O}(1). \quad (1.27)$$

Dafür geben wir auch die Eigenschaft unserer bisherigen Transformationen auf, die alle invariant waren unter einer Reskalierung $\varepsilon \rightarrow \sigma\varepsilon$ und $A(t) \rightarrow \sigma^2 A(t)$. Die letzte Transformation erfüllt diese Invarianz auf Grund des Faktors $\varepsilon^{-\frac{1}{2}}$ nicht mehr; aber auch sie kann zu einer symplektischen Transformation auf die langsamen Positionen, Impulse und die Energie E erweitert werden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird auf eine explizite Ausführung dieser Erweiterung hier verzichtet, statt dessen führen wir folgende Schreibweise für die inverse Transformation ein:

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} = \varepsilon^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} P_1(t) \\ Q_1(t) \end{pmatrix} \eta \quad \text{mit} \quad \begin{pmatrix} P_1(t) \\ Q_1(t) \end{pmatrix} = \Gamma \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi(t)\right). \quad (1.28)$$

Die Bewegungsgleichungen werden nun zu

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= f_0(p, q, t) \\ \dot{q}_0 &= M_0(t)^{-1}p_0 + g_0(q, t) \\ \dot{\eta} &= \varepsilon^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi(t)\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} f_1(p, q, t) \\ g_1(q, t) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

wobei p_1 und q_1 via (1.28) durch η ausgedrückt werden. Ausgeschrieben lauten die Differentialgleichungen für die langsamen Variablen p_0 und q_0

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= -L_{00}p_0 - S_{00}q_0 - T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0, t) - \varepsilon S_{01} Q_1 \eta \\ &\quad - T_0^T B^T \left(\nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, t) - \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \right) \\ \dot{q}_0 &= M_0^{-1} p_0 + L_{00}^T q_0 + \varepsilon L_{10}^T Q_1 \eta. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Wir setzen auch die jeweiligen Ausdrücke für f_1 und g_1 in die Differentialgleichung der adiabatischen Variablen η ein und erhalten

$$\begin{aligned} \dot{\eta} &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi(t)\right) W(t) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi(t)\right) \eta \\ &\quad - P_1^* \left(L_{10} p_0 + S_{10} q_0 + T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, t) \right) \end{aligned} \quad (1.30)$$

mit

$$\begin{aligned}
W &= \Gamma^* \begin{pmatrix} -L_{11} & -\varepsilon S_{11} \\ 0 & L_{11}^T \end{pmatrix} \Gamma \\
&= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} L_{11} - L_{11}^T & L_{11} + L_{11}^T \\ L_{11} + L_{11}^T & L_{11} - L_{11}^T \end{pmatrix} - \frac{i\varepsilon}{2} \begin{pmatrix} -S_{11} & S_{11} \\ -S_{11} & S_{11} \end{pmatrix}. \quad (1.31)
\end{aligned}$$

Die Diagonaleinträge der Matrix W sind dabei von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$.

Nach unserer letzten Transformation stellt sich nun die Frage, was aus numerischer Sicht mit dieser neuen Darstellung des Hamiltonsystems gewonnen wurde. Abbildung 1.2 zeigt für das Testbeispiel aus Kapitel 1.2, dass $\eta(t)$ für die entsprechenden Werte von ε deutlich glatter ist als die Lösung der ursprünglichen Differentialgleichungen, numerisch also besser zu approximieren sein sollte. $\eta(t)$ zeigt allerdings immer noch Oszillationen, deren Amplitude nun für $\varepsilon \rightarrow 0$ kleiner wird.

Die Vorteile der transformierten Gleichungen sind im Einzelnen:

- Die langsamen und schnellen Variablen wurden annähernd separiert. Dabei sind wir nun in der Lage, die mathematisch etwas unpräzise Formulierung “annähernd” zu spezifizieren:
In den Differentialgleichungen für die langsamen Variablen p_0 und q_0 treten die schnellen Variablen η zwar noch auf, allerdings mit dem Vorfaktor ε , so dass die Kopplung zwischen schnellen und langsamen Variablen nur noch von dieser Größenordnung ist und sich nicht mehr auf einer Skala von $\mathcal{O}(1)$ abspielt.
- Die rechte Seite in den ursprünglichen Bewegungsgleichungen für die schnellen Variablen wird für $\varepsilon \rightarrow 0$ unbeschränkt, weil ε im Nenner auftritt. In der transformierten Differentialgleichung (1.30) tritt dieses $\frac{1}{\varepsilon}$ ausschließlich im Argument der komplexen Exponentialfunktion auf, weshalb die rechte Seite unabhängig von ε beschränkt bleibt. Die Oszillationen werden zwar immer noch schneller für $\varepsilon \rightarrow 0$, doch weil die Exponentialmatrizen unitär sind, bleibt die Ableitung von η gleichmäßig beschränkt. η ist also “glatter” als $(p_1 \ q_1)^T$, was für die numerische Implementierung von Vorteil ist.
- Falls die Diagonalisierung der Massematrix \bar{M}_1 glatt in der Zeit ist, bewegt sich die Lösung von (1.30) innerhalb einer Größenordnung von $\mathcal{O}(\varepsilon)$ um den Startwert, d.h. $\eta(t) = \eta(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon)$. Diese Gesetzmäßigkeit, die im nächsten

Abschnitt hergeleitet und näher betrachtet wird, führt dazu, dass die adiabatische Variable nur kleinere Korrekturen der Größenordnung ε um eine glatte Lösung beschreibt, während die ursprüngliche Lösung für $\varepsilon \rightarrow 0$ immer stärker oszilliert (vergleiche hierzu die Abbildungen 1.1 und 1.2).

- Alle durchgeführten Transformationen sind linear und können durch Standardroutinen der numerischen linearen Algebra ausgeführt werden. Der numerische Aufwand hierfür hält sich also in Grenzen.

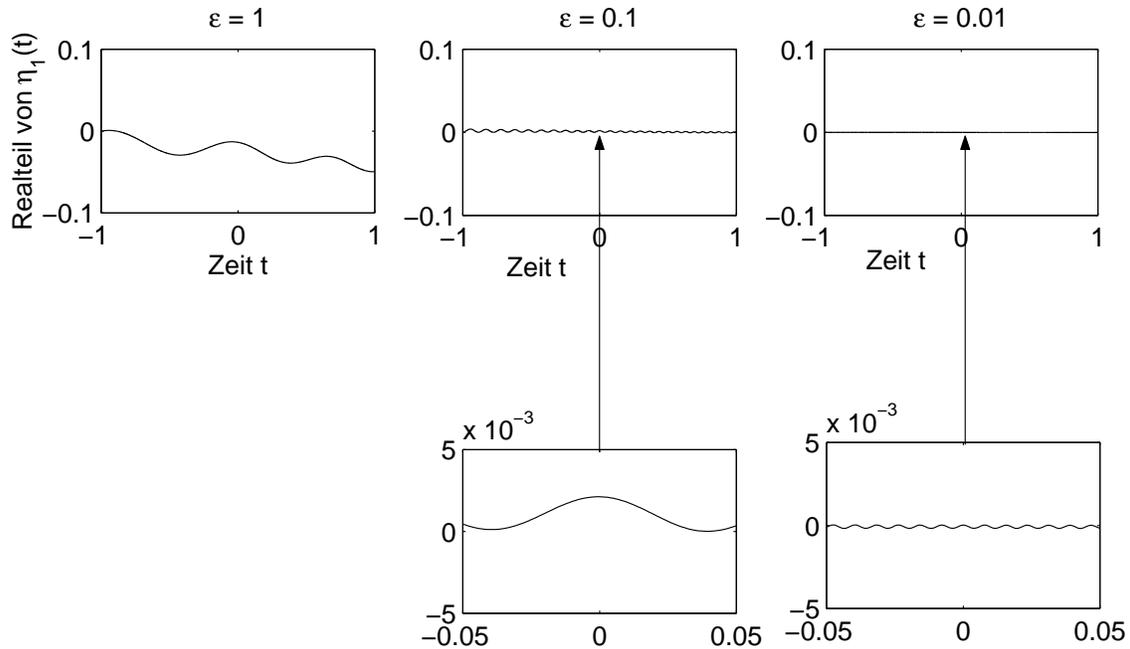


Abbildung 1.2: $\eta_1(t)$ für $\varepsilon = 1$ (links), 0.1 (Mitte) und 0.01 (rechts). Die Vergrößerungen (unten) zeigen Oszillationen in $\eta(t)$.

Mit den Transformationen sind allerdings keinesfalls alle auftretenden Schwierigkeiten verschwunden. Nach wie vor beschreibt die Differentialgleichung für η eine hochoszillatorische Funktion, die numerisch approximiert werden muss. Standardintegratoren müssen auch hierfür mit sehr kleinen Schrittweiten $h \ll \varepsilon$ arbeiten, so dass die Entwicklung von speziell auf diese Art von Problemen zugeschnittenen Verfahren uns in Kapitel 2 und 3 noch beschäftigen wird.

Auch die Diagonalisierung eventuell sehr großer Matrizen, wie sie hier in jedem Zeitschritt verlangt wird, ist eine numerisch nicht zu vernachlässigende Aufgabe.

Falls eine vollständige Diagonalisierung der jeweiligen Matrix nicht durchführbar ist, genügt es unter Umständen, den von den Eigenvektoren der wesentlichen Eigenwerte aufgespannten Teilraum zu betrachten, was auf ein zu (1.30) ähnliches Problem führt [19].

1.5 Adiabatische Invarianten und Dynamik von Fastkreuzungen

Der Begriff “adiabatisch” erfreut sich in Mathematik, Physik und Chemie großer Beliebtheit und häufigen Gebrauchs, leider mit zum Teil völlig verschiedenen Bedeutungen. Im Folgenden wollen wir zunächst klären, was in dieser Arbeit unter adiabatisch zu verstehen ist.

Der Ursprung dieses Adjektivs liegt im Griechischen; es bedeutet “was nicht gekreuzt werden kann” [11]. Im mathematischen Zusammenhang sind damit meist die Kreuzungen von Eigenwerten gemeint, wobei in dieser Arbeit die Eigenwerte $\pm \omega_j(t)$, $j = 1, \dots, m$, aus der Diagonalisierung der schiefssymmetrischen Matrix des schnellen Systems (1.24) im Fokus des Interesses stehen. Sie gehen zurück auf die Diagonalisierung der Massematrix $\bar{M}_1(t)$ in (1.15). Kreuzen sie sich nicht, verhalten sich also adiabatisch im ursprünglichen Sinne des Wortes, gibt es eine minimale Distanz $\delta > 0$ derart, dass für jedes Eigenwertpaar ω_k und ω_l mit $k \neq l$ gilt:

$$|\omega_k(t) - \omega_l(t)| \geq \delta \quad \forall t \in [t_0, t_{end}] \quad \text{und} \quad \omega_k(t) \geq \text{Const.} > 0. \quad (1.32)$$

Trotz dieser Forderung können sich je zwei Eigenwerte dieser Matrix aber noch beliebig nahe kommen und ohne Kreuzung wieder auseinandergehen. δ nimmt dann sehr kleine Werte an ($\delta \ll 1$) und wir sprechen von einer vermiedenen Kreuzung oder Fastkreuzung der Eigenwerte. Die Eigenwerte kreuzen sich zwar nicht, die Diagonalisierung an sich ist aber trotzdem nicht glatt, da die Ableitung der orthogonalen Matrix $Q(t)$ große Werte annimmt. \dot{Q} und damit W sind dann von der Größenordnung $\mathcal{O}(\delta^{-1})$ und die Beschränktheit der rechten Seite unserer Differentialgleichung ist nicht mehr gewährleistet, falls $\frac{1}{\delta}$ nicht unabhängig von ε beschränkt ist. Wir fordern deshalb von unserem System, wenn wir es als adiabatisch bezeichnen, nicht nur, dass sich die Eigenwerte nicht kreuzen, sondern auch, dass für $\delta > 0$ mit einer Konstanten C gilt:

$$\frac{1}{\delta} \leq C. \quad (1.33)$$

Die Matrizen $W(t)$, $\dot{W}(t)$ und $\dot{\Lambda}(t)$ besitzen dann eine von ε und δ unabhängige, nicht zu große Schranke C , d.h.

$$\|W(t)\| \leq C, \quad \|\dot{W}(t)\| \leq C, \quad \|\dot{\Lambda}(t)\| \leq C \quad \forall t \in [t_0, t_{end}]. \quad (1.34)$$

In Kapitel 1.5.2 werden wir an einem Modellproblem die Problematik und Dynamik von Fastkreuzungen veranschaulichen und näher untersuchen. Zunächst interessiert uns jedoch der adiabatische Fall, in dem die Eigenwerte ausreichend getrennt bleiben und die Diagonalisierung glatt ist.

1.5.1 Adiabatische Invarianten

In der adiabatischen Situation, in der (1.32) und (1.33) gelten, können wir folgenden Satz aufstellen und beweisen:

Satz 1 *Unter den Voraussetzungen (1.32) und (1.33) gilt für $\eta(t)$*

$$\eta(t) - \eta(t_0) = \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (1.35)$$

gleichmäßig auf beschränkten Zeitintervallen.

Beweis: Wir integrieren beide Seiten der Differentialgleichung (1.30) von t_0 bis t und betrachten den j -ten Eintrag des Vektors η

$$\eta_j(t) - \eta_j(t_0) = \sum_{k=1}^{2m} \int_{t_0}^t \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}(\phi_j(s) - \phi_k(s))\right) W_{jk}(s) \eta_k(s) ds - \int_{t_0}^t r_j(s) ds$$

mit

$$r(s) = P_1(s)^* \left(L_{10}(s) p_0(s) + S_{10}(s) q_0(s) + T_1(s)^T \nabla_q U(T_0(s) q_0(s) + \varepsilon T_1(s) Q_1(s) \eta(s), s) \right).$$

Wir schieben im ersten Integral den Term

$$1 = -\frac{i}{\varepsilon} (\lambda_j(s) - \lambda_k(s)) \cdot \frac{\varepsilon}{-i} \frac{1}{(\lambda_j(s) - \lambda_k(s))} \quad (j \neq k)$$

ein, integrieren partiell und erhalten

$$\begin{aligned}
\eta_j(t) - \eta_j(t_0) &= i\varepsilon \sum_{k=1}^{2m} \left[\exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}(\phi_j(s) - \phi_k(s))\right) \frac{W_{jk}(s)\eta_k(s)}{\lambda_j(s) - \lambda_k(s)} \right]_{s=t_0}^t \\
&\quad - i\varepsilon \sum_{k=1}^{2m} \int_{t_0}^t \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}(\phi_j(s) - \phi_k(s))\right) \frac{d}{d\theta} \left(\frac{W_{jk}(\theta)\eta_k(\theta)}{\lambda_j(\theta) - \lambda_k(\theta)} \right) \Big|_{\theta=s} ds \\
&\quad - \int_{t_0}^t r_j(s) ds.
\end{aligned}$$

Unter den Voraussetzungen (1.32) bis (1.34) können die ersten beiden Terme für $j \neq k$ durch $C \cdot \varepsilon$ abgeschätzt werden. Für $j = k$ nutzen wir aus, dass die Diagonaleinträge von W die Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ haben und erhalten die gleiche Abschätzung. In $r(s)$ verstecken sich mit $P_1(s)$ ebenfalls oszillatorische Exponentiale, die nach partieller Integration analog zum ersten Integral die Größenordnung ε liefern. Des Weiteren treten Ableitungen von p_0 , q_0 , L_{10} , S_{10} , T und U auf, welche in der adiabatischen Situation alle beschränkt sind. \square

Dieses Resultat ist ein Analogon zum quanten-adiabatischen Theorem von Born und Fock [1], einem Satz aus den Anfängen der Quantenmechanik, der besagt, dass die Wirkungen $|\eta_j|^2$ (die Energie in der j -ten Komponente geteilt durch die Frequenz λ_j) über Zeiten $t = \mathcal{O}(1)$ annähernd konstant bleiben. Ganz allgemein nennt man Funktionen, die entlang jeder beschränkten Lösung der Differentialgleichung nur um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ von ihrem Anfangswert abweichen, *adiabatische Invarianten*.

Im adiabatischen Fall ist η eine solche adiabatische Invariante, weshalb wir sie auch als adiabatische Variable bezeichnet haben.

Betrachten wir die Funktionen

$$I_j = |\eta_j|^2 \quad (j = 1, \dots, m), \quad (1.36)$$

so sind sie ebenfalls adiabatische Invarianten: $I_j(t) = I_j(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon)$ für $t \leq \text{Const.}$ Diese Invarianten I_j entsprechen tatsächlich den Wirkungen (Energie geteilt durch Frequenz), wenn wir von einem Hamiltonsystem (1.2) ausgehen, bei dem die Massematrix gleich der Identität ist und die Steifigkeitsmatrix bereits Diagonalgestalt hat; denn dann gilt

$$I_j(t) = \frac{1}{\omega_j(t)} \left(\frac{1}{2} p_j(t)^2 + \frac{\omega_j(t)^2}{2\varepsilon^2} q_j(t)^2 \right).$$

Ein wichtiges Beispiel dieser Form ist der harmonische Oszillator; eine Funktion, die folgender skalaren Differentialgleichung zweiter Ordnung genügt:

$$\ddot{q} + \frac{\omega(t)}{\varepsilon^2} q = 0. \quad (1.37)$$

Dabei ist $\omega(t)$ von der 0 weg beschränkt und hat unabhängig von ε beschränkte Ableitungen.

Die Hamiltonfunktion in den ursprünglichen Koordinaten hat bereits die Form

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^2 + \frac{1}{2} \frac{\omega(t)^2}{\varepsilon^2} q^2,$$

worauf sich die Transformationen erheblich reduzieren. Die Trennung in schnelle und langsame Variablen wird ebenso wenig benötigt, wie die ersten vier Transformationen. Letzten Endes bleibt nur die Reskalierung übrig und wir erhalten

$$\check{H}(\check{p}, \check{q}, \check{t}) = \frac{\omega(t)}{2\varepsilon} \check{p}^2 + \frac{\omega(t)}{2\varepsilon} \check{q}^2 + \frac{1}{2} \frac{\dot{\omega}(t)}{\omega(t)} \check{p} \check{q}.$$

Nach der adiabatischen Transformation (1.26) erhalten wir $\eta(t)$ als Lösung folgender Differentialgleichung

$$\dot{\eta}(t) = -\frac{1}{2} \frac{\dot{\omega}(t)}{\omega(t)} \begin{pmatrix} 0 & \exp\left(-\frac{2i}{\varepsilon} \int_{t_0}^t \omega(s) ds\right) \\ \exp\left(\frac{2i}{\varepsilon} \int_{t_0}^t \omega(s) ds\right) & 0 \end{pmatrix} \eta(t)$$

und die Wirkung $I(t)$ als adiabatische Invariante

$$I(t) = \frac{1}{\omega(t)} \left(\frac{1}{2} \dot{q}(t)^2 + \frac{\omega(t)^2}{2\varepsilon^2} q(t)^2 \right).$$

1.5.2 Dynamik von Fastkreuzungen

Im nichtadiabatischen Fall, wenn die Bedingungen (1.32) und (1.33) verletzt werden, kann es zu sogenannten Fastkreuzungen kommen, während derer sich die Eigenwerte der Matrix zu einem Zeitpunkt sehr nahe kommen und sich danach wieder voneinander entfernen. Um die Effekte einer solchen Fastkreuzung zu illustrieren, betrachten wir ein einfaches zweidimensionales Modellproblem.

Es sei $\bar{M}_1(t)^{-1}$ die von $\delta > 0$ abhängige 2×2 -Matrix

$$\bar{M}_1(t)^{-1} = \begin{pmatrix} (t+3)^2 + \delta^2 & 3\delta(t+2) \\ 3\delta(t+2) & (2t+3)^2 + \delta^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t+3 & \delta \\ \delta & 2t+3 \end{pmatrix}^2. \quad (1.38)$$

Die Diagonalisierung $\bar{M}_1(t)^{-1} = Q(t)\Omega(t)^2Q(t)^T$ ist gegeben durch

$$\Omega(t) = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}t + 3 + \frac{1}{2}\sqrt{t^2 + 4\delta^2} & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}t + 3 - \frac{1}{2}\sqrt{t^2 + 4\delta^2} \end{pmatrix}, \quad (1.39)$$

$$Q(t) = \begin{pmatrix} \cos(\xi(t)) & -\sin(\xi(t)) \\ \sin(\xi(t)) & \cos(\xi(t)) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad (1.40)$$

$$\xi(t) = \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{t}{2\delta}\right). \quad (1.41)$$

Für $t \in [-1, 1]$ ist (1.32) erfüllt, wobei wir der Diagonalisierung entnehmen können, dass die Eigenwerte von $\bar{M}_1(t)$ am Zeitpunkt $t = 0$ ihren minimalen Abstand von $\omega_1(0) - \omega_2(0) = 2\delta$ annehmen.

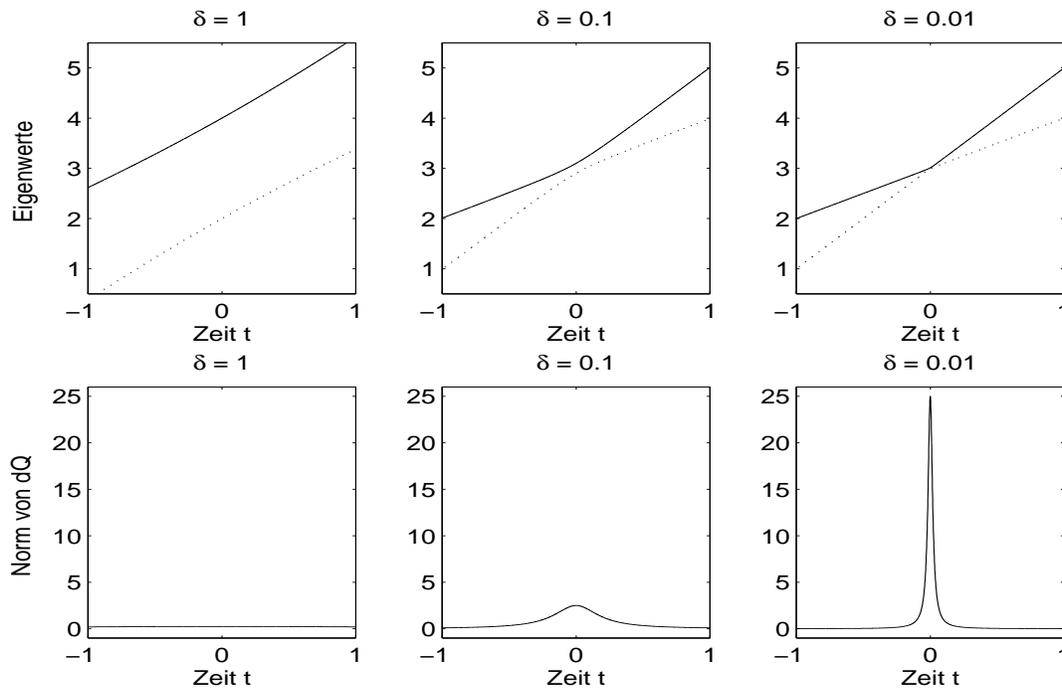


Abbildung 1.3: Eigenwerte $\omega_1(t)$ und $\omega_2(t)$ für $\delta = 1, 0.1$ und 0.01 (obere Reihe). Untere Reihe: $\|\dot{Q}(t)\|$ für dieselben Werte von δ .

Die obere Reihe in Abbildung 1.3 veranschaulicht, dass die Eigenwerte für große Werte von δ ($\delta = \mathcal{O}(1)$) immer deutlich getrennt bleiben. Ist δ klein, kommt es zu

einer Fastkreuzung der Eigenwerte. Eine Kreuzung wird dadurch vermieden, dass die Eigenwerte zur Asymptote des jeweils anderen Eigenwertes überwechseln. Die Tatsache, dass tatsächlich keine echte Kreuzung statt findet, ist in Abbildung 1.3 oben rechts mit bloßem Auge nur an Hand des Unterschieds in der Liniencharakteristik zu erkennen.

In der unteren Reihe von Abbildung 1.3 sehen wir, wie die Norm von \dot{Q} während einer solchen vermiedenen Kreuzung plötzlich auf $\frac{1}{4\delta}$ anwächst und direkt danach wieder abfällt. Bedingung (1.33) bzw. (1.34) wird also für kleine Werte von δ verletzt.

Dies hat deutliche Auswirkungen auf das Verhalten der Lösung der transformierten Differentialgleichung (1.30). Ab einem bestimmten Wert von δ zeigt $\eta(t)$ Sprünge auf einer $\mathcal{O}(1)$ -Skala, die innerhalb einer $\mathcal{O}(\delta)$ -Umgebung um $t = 0$ statt finden. Abbildung 1.4 zeigt einen solchen nichtadiabatischen Übergang für $\varepsilon = 0.01$. Für $\delta = 0.1$ erkennen wir eine deutliche Unruhe in der Wirkungsvariablen um $t \approx 0$. Bei kleineren Werten von δ verlässt die eigentlich adiabatische Invariante ihre $\mathcal{O}(\varepsilon)$ Umgebung, springt auf ein neues Niveau und bleibt dort, sobald sich die Eigenwerte nach der Fastkreuzung wieder getrennt haben. Im Gegensatz zu den winzigen Oszillationen in Abbildung 1.2 sind diese nichtadiabatischen Übergänge auf der großen Skala gut sichtbar.

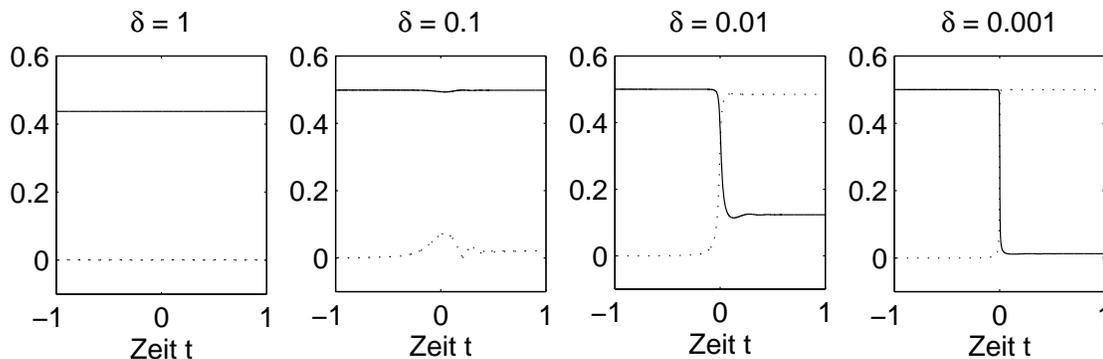


Abbildung 1.4: Nichtadiabatische Übergänge; $|\eta_1(t)|^2$ und $|\eta_2(t)|^2$ für $\delta = 1, 0.1, 0.01$ und 0.001 ; $\varepsilon = 0.01$.

Die Dynamik während einer solchen Fastkreuzung lässt sich am besten untersuchen, indem wir nahe $t = 0$ eine andere Zeitskala $\tau = \frac{t}{2\delta}$ wählen.

Die Diagonalisierung $\bar{M}_1(t)^{-1} = Q(t)\Omega(t)^2Q(t)^T$ der Matrix ergibt dann

$$\begin{aligned}\Omega(t)/2\delta &= \tilde{\Omega}(\tau) = \begin{pmatrix} 3\tau + \frac{3}{\delta} + \sqrt{\tau^2 + 1} & 0 \\ 0 & 3\tau + \frac{3}{\delta} - \sqrt{\tau^2 + 1} \end{pmatrix}, \\ Q(t) &= \tilde{Q}(\tau) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha(\tau)) & -\sin(\alpha(\tau)) \\ \sin(\alpha(\tau)) & \cos(\alpha(\tau)) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \\ \alpha(\tau) &= \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \arctan(\tau).\end{aligned}$$

Wir reskalieren auch die Matrizen

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}(\tau) &= \int_0^\tau \tilde{\Lambda}(\sigma) d\sigma = \Phi(t)/4\delta^2 \quad \text{mit} \quad \tilde{\Lambda} = \begin{pmatrix} \tilde{\Omega} & 0 \\ 0 & -\tilde{\Omega} \end{pmatrix}, \\ \frac{d}{d\tau} \tilde{Q}(\tau) &= \frac{1}{2(\tau^2 + 1)} \begin{pmatrix} -\sin(\alpha(\tau)) & -\cos(\alpha(\tau)) \\ \cos(\alpha(\tau)) & -\sin(\alpha(\tau)) \end{pmatrix} = 2\delta \cdot \dot{Q}(t).\end{aligned}$$

Die Darstellung $\dot{Q}(t) = \frac{\delta}{t^2 + 4\delta^2} \begin{pmatrix} -\sin(\xi(t)) & -\cos(\xi(t)) \\ \cos(\xi(t)) & -\sin(\xi(t)) \end{pmatrix}$ erklärt die scharfe Spitze der Höhe $(4\delta)^{-1}$ in $t = 0$.

Die reskalierte Funktion $\tilde{\eta}(\tau) = \eta(t)$ ist Lösung der Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{\eta}(\tau) = \exp\left(-\frac{4i\delta^2}{\varepsilon} \tilde{\Phi}(\tau)\right) \tilde{W}(\tau) \exp\left(\frac{4i\delta^2}{\varepsilon} \tilde{\Phi}(\tau)\right) \tilde{\eta}(\tau) - \tilde{r}(\tilde{\eta}, \tau),$$

wobei die Matrix auf der rechten Seite der Differentialgleichung mit $\tilde{W}(\tau)$ die Ableitung $\frac{d}{d\tau} \tilde{Q}(\tau)$ enthält.

So lange $4\delta^2 \leq \varepsilon$ und $|\tau| = |t/2\delta| \leq 1$ gilt, ist diese rechte Seite beschränkt mit Norm ~ 1 und besitzt ebenso beschränkte Ableitungen nach τ . Im Zeitintervall $|\tau| \leq 1$ ($|t| \leq 2\delta$) durchläuft die Funktion $\tilde{\eta}(\tau)$ also Veränderungen der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$, falls $4\delta^2 \leq \varepsilon$ bzw. $\delta \leq \frac{1}{2}\sqrt{\varepsilon}$. Dies erklärt das auf der größeren Zeitskala beobachtete Sprungverhalten der eigentlich adiabatischen Invarianten.

Hier wird schon klar, dass jedes numerische Verfahren, welches stückweise Polynome als Approximation an $W(t)$ bzw. $\tilde{W}(\tau)$ verwendet, Schrittweiten $\Delta\tau = h/2\delta \ll 1$ benutzen muss, d.h. $h \ll \delta$. Allerdings zeigt die Reskalierung auch, dass die Anzahl der erforderlichen Zeitschritte zum Erreichen einer bestimmten Genauigkeit innerhalb des Sprungbereichs $[-2\delta, 2\delta]$ unabhängig von δ ist.

Das Auftreten solcher nichtadiabatischen Übergänge ist nicht etwa als irrelevanter, zufällig auftretender Einzelfall zu verstehen, sondern spielt in Physik und Chemie eine große Rolle. Ein wichtiges Beispiel aus der Moleküldynamik ist die Modellierung plötzlicher Konformitätsänderungen von Molekülen wie dem Sehfärbstoff Rhodopsin [21, 29].

Die seit 1932 bekannte Landau-Zener-Formel [20, 30] beschreibt die Abweichung der Lösung $\eta(t)$ vom adiabatischen Limes für kleine Werte von ε und $\delta \rightarrow 0$ und gibt Grundlagen zur Berechnung einer Wahrscheinlichkeit, mit der nichtadiabatische Übergänge auftreten. Auf Grund der speziellen Form von \tilde{W} und \tilde{r} lässt sich diese Formel allerdings nicht ohne weiteres auf unser Modellproblem übertragen. Im Fall $\tilde{r} = 0$ und genügend kleinem ε können wir auf Grund der Landau-Zener-Formel allerdings erwarten, dass für $4\delta^2 < \varepsilon$ deutliche Übergänge auftreten.

Hier wird klar, dass die Begriffe einer adiabatischen und nichtadiabatischen Situation keine streng mathematischen Definitionen sind. Es gibt durchaus Werte von δ und ε , für die kleinere “Wackler” in den adiabatischen Invarianten auftreten, die nicht mehr von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ sind, aber auch noch nicht $\mathcal{O}(1)$. Wenn also im Folgenden von der adiabatischen Situation die Rede ist, sollen (1.32) und (1.33) mit solchen Konstanten erfüllt sein, dass (1.35) gilt, d.h. $\eta(t)$ eine adiabatische Invariante ist. Die nichtadiabatische Situation bezeichnet eine Situation, in der nichtadiabatische $\mathcal{O}(1)$ -Übergänge in $\eta(t)$ auftreten, wohl wissend, dass zwischen adiabatisch und nichtadiabatisch eine Grauzone existiert.

Kapitel 2

Adiabatische Integratoren I: lineare Phasenapproximation

In der adiabatischen Situation müssen wir nicht lange nach einem einfachen Integrator für das oszillatorische Problem mit zeitabhängiger Hamiltonfunktion (1.2) suchen. Wir lösen das langsame Grenzsystem ($\varepsilon \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned}\dot{p}_0 &= -L_{00}p_0 - S_{00}q_0 - T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \\ \dot{q}_0 &= M_0^{-1} p_0 + L_{00}^T q_0\end{aligned}\tag{2.1}$$

für p_0 und q_0 zum Beispiel mit dem Störmer-Verlet-Verfahren und belassen die adiabatische Variable η konstant auf ihrem Anfangswert. Danach transformieren wir die erhaltene Lösung zurück und bekommen eine Annäherung an die Lösung des ursprünglichen Problems (1.4).

Der Fehler in η ist über kompakte Zeitintervalle wegen (1.35) von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Die Differenz zwischen Lösungen des langsamen Grenzsystems (2.1) und Lösungen des eigentlichen langsamen Systems (1.29) ist beschränkt durch

$$\begin{aligned}& \left| \varepsilon \int_{t_0}^t S_{01}(s) Q_1(s) \eta(s) + T_0^T B^T \nabla_q^2 U(B T_0 q_0(s), s) B T_1(s) Q_1(s) \eta(s) ds \right| + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ & \text{und} \left| \varepsilon \int_{t_0}^t L_{10}(s)^T Q_1(s) \eta(s) ds \right| + \mathcal{O}(\varepsilon^2) .\end{aligned}$$

Durch partielle Integration können diese Integrale als $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ -Terme identifiziert werden, was mit Hilfe des Gronwall-Lemmas ebenfalls einen Fehler von $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ in p_0 und q_0 ergibt.

In den ursprünglichen Variablen p und q von (1.2) zeigt sich nach Rücktransformation ein Fehler von $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ in den Positionen und $\mathcal{O}(\varepsilon)$ in den Impulsen.

Für kleine ε also kein schlechtes Ergebnis in der adiabatischen Situation, wobei die Ordnung des Verfahrens (im Fall von Störmer-Verlet Ordnung 2) und damit die Größe der Zeitschrittweite noch in den endgültigen Fehler eingeht.

Um im adiabatischen Fall Approximationen höherer Ordnung zu erhalten, sind allerdings verbesserte Integratoren notwendig. Im nichtadiabatischen Fall kann mit obigem Verfahren auf keinen Fall gearbeitet werden, da die Sprünge in η von diesem einfachen Integrator nicht einmal erkannt, geschweige denn aufgelöst werden.

Bei der Entwicklung neuer Integratoren müssen zwei Dinge im Auge behalten werden: Vereinfacht man die transformierten Differentialgleichungen (1.29) und (1.30) an sich, indem man kleinere Terme bei der Integration nicht berücksichtigt, so nimmt man eine Veränderung des Modells vor, wodurch Potenzen von ε (und $\frac{1}{\delta}$) als Fehler in der Approximation erzeugt werden. Wendet man auf eine solchermaßen veränderte Differentialgleichung ein numerisches Verfahren mit Zeitschrittweite h an, so entstehen in der Approximation Fehler in Potenzen von h .

Ziel dieses Kapitels ist es also, die passenden Integratoren für das jeweilige Modell zu entwickeln.

Dabei können wir uns für die Behandlung von (1.30) Anregungen aus den Arbeiten von Tobias Jahnke und Christian Lubich holen, die numerische Integratoren für eine Differentialgleichung ähnlicher Gestalt wie (1.30) entwickeln und untersuchen [16, 17, 18, 19]. Die Struktur von (1.30) unterscheidet sich dennoch in ganz substantieller Art und Weise von den dort betrachteten Gleichungen, so ist die Kopplungsmatrix W dort eine rein schief-symmetrische Matrix und die Terme der zweiten Zeile treten dort überhaupt nicht auf.

Wir gehen zunächst von einem einfacheren Verfahren aus, welches wir dann nach und nach verfeinern.

2.1 Notation

Um die im Folgenden auftretenden Formeln etwas zu verkürzen, führen wir $E(\Phi)$ ein als $2m \times 2m$ -Matrix mit den Einträgen $e_{kl}(\Phi)$ definiert durch

$$e_{kl}(\Phi) = \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}(\phi_l - \phi_k)\right) & \text{für } k \neq l \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Weiter definieren wir durch $W_D(t)$ den Diagonalanteil von $W(t)$ aus (1.31), während $W_N(t) = W(t) - W_D(t)$ die Einträge ausserhalb der Diagonalen von $W(t)$ enthält; $W_N(t)$ ist also eine Matrix mit Hauptdiagonale Null, $W_D(t)$ eine Diagonalmatrix, deren Einträge von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ sind.

Schreibt man zusätzlich \bullet für die eintragsweise Multiplikation zweier Matrizen, so erhält die transformierte Differentialgleichung für η (1.30) folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \dot{\eta}(t) = & \left(E(\Phi(t)) \bullet W_N(t) \right) \eta(t) + W_D(t) \eta(t) \\ & - P_1^* \left(L_{10} p_0 + S_{10} q_0 + T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, t) \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Als nächstes schreiben wir $D(\Lambda)$ und $D^-(\Lambda)$ als Matrizen mit den Einträgen

$$d_{kl}(\Lambda) = \lambda_l - \lambda_k, \quad d_{kl}^-(\Lambda) = \begin{cases} (\lambda_l - \lambda_k)^{-1} & \text{für } k \neq l \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.4)$$

$D^-(\Lambda)$ ist nicht die Inverse von $D(\Lambda)$, aber es gilt $D(\Lambda) \bullet D^-(\Lambda) \bullet M = M$ für jede Matrix M mit $\text{diag}(M) = 0$ und $D(\Lambda) \bullet D^-(\Lambda) \bullet W = W + \mathcal{O}(\varepsilon)$ für jede Matrix W mit $\text{diag}(W) = \mathcal{O}(\varepsilon)$.

Die Definitionen für E , D und D^- können auch auf beliebige andere Diagonalmatrizen Φ oder Λ angewandt werden. Für die Funktion $\Phi(t)$ aus (1.25) gilt allerdings weiter

$$\frac{d}{dt} E(\Phi(t)) = E(\Phi(t)) \bullet \frac{i}{\varepsilon} D(\Lambda(t)). \quad (2.5)$$

2.2 Verfahren für ein vereinfachtes Modell

Zunächst werden wir einen Integrator 1. Ordnung für eine leicht vereinfachte Form der Differentialgleichung (2.3) konstruieren, der dann mit einem entsprechenden Verfahren für die langsame Differentialgleichung (1.29) gekoppelt wird.

Es sei dazu die Schrittweite h so gewählt, dass $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$ gilt und eine Zeit $t_n = t_0 + nh$ gegeben. Wir integrieren die Gleichung (2.3) von t_n bis t_{n+1} und erhalten

$$\begin{aligned} \eta(t_{n+1}) = & \eta(t_n) + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2})) \bullet W_N(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) + W_D(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) \right) \\ & \eta(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) d\theta - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 r(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) d\theta \end{aligned} \quad (2.6)$$

mit

$$r(s) = P_1(s)^* \left(L_{10}(s)p_0(s) + S_{10}(s)q_0(s) + T_1(s)^T B^T \nabla_q U(B T_0(s)q_0(s) + \varepsilon B T_1(s)Q_1(s)\eta(s), s) \right). \quad (2.7)$$

Falls das Potential U quadratisch ist ($U(q, t) = \frac{1}{2} q^T G(t)q$), vereinfacht sich der Ausdruck für $r(s)$ zu

$$r(s) = P_1(s)^* \left(L_{10}(s)p_0(s) + S_{10}(s)q_0(s) + T_1(s)^T B^T G(s) (B T_0(s)q_0(s) + \varepsilon B T_1(s)Q_1(s)\eta(s)) \right). \quad (2.8)$$

Dies wollen wir aber nicht generell annehmen und müssen deshalb (2.7) auf eine andere Weise günstig berechnen. Hierzu entwickeln wir $\nabla_q U$ um $B T_0 q_0$:

$$\begin{aligned} \nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, s) &= \nabla_q U(B T_0 q_0, s) \\ &\quad + \varepsilon \nabla_q^2 U(B T_0 q_0, s) B T_1 Q_1 \eta \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Gleichung (2.6) wird dann zu

$$\begin{aligned} \eta(t_{n+1}) &= \eta(t_n) + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2})) \bullet W_N(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) + W_D(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) \right) \\ &\quad \eta(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) d\theta - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \tilde{r}(t_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\theta h}{2}) d\theta + \mathcal{O}(h \varepsilon^2) \quad \text{mit} \quad (2.9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{r}(s) &= P_1(s)^* \left(L_{10}(s)p_0(s) + S_{10}(s)q_0(s) + T_1(s)^T B^T \nabla_q U(B T_0(s)q_0(s), s) \right. \\ &\quad \left. + \varepsilon T_1(s)^T B^T \nabla_q^2 U(B T_0(s)q_0(s), s) B T_1(s)Q_1(s)\eta(s) \right). \quad (2.10) \end{aligned}$$

Dies ist äquivalent zum quadratischen Fall; wir müssen nur den entsprechenden Gradienten $\nabla_q U(q, t) = G(t)q$ und die Hessematrix $\nabla_q^2 U(q, t) = G(t)$ einsetzen. Im quadratischen Fall tritt allerdings der Modellfehler in Höhe von $\mathcal{O}(h\varepsilon^2)$ nicht auf, da die dritte Ableitung von U verschwindet.

Aus der letzten Gleichung werden nun die numerischen Verfahren hergeleitet, indem wir die Funktionsauswertungen an $t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2$ durch numerisch berechenbare Größen ersetzen. Im ersten Verfahren geschieht dies meist durch Einfrieren der Funktionen am Intervallmittelpunkt $t_{n+\frac{1}{2}}$.

Eine Ausnahme bildet das Integral $\Phi(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2)$, welches zunächst linear durch den Beginn der Taylorreihe approximiert wird:

$$\Phi(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2) \approx \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \theta h/2 \cdot \Lambda(t_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.11)$$

$$W(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2) \approx W(t_{n+\frac{1}{2}}) \quad (2.12)$$

$$\eta(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2) \approx \eta(t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{\eta(t_{n+1}) + \eta(t_n)}{2}. \quad (2.13)$$

Die Matrizen L_{10} , S_{10} , T_0 und T_1 werden ebenfalls in $t_{n+\frac{1}{2}}$ ausgewertet, genau wie die langsamen Variablen p_0 und q_0 . In W , L und S treten die Ableitungen von Ω , G und vor allem Q auf, die jeweils durch einen entsprechenden symmetrischen Differenzenquotienten wie

$$\dot{Q}(t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{1}{h}(Q(t_{n+1}) - Q(t_n)) \quad (2.14)$$

approximiert werden. Das Integral $\Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) = \int_{t_0}^{t_{n+\frac{1}{2}}} \Lambda(s) ds$ kann durch die Trapezregel

$$\Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \Phi^{n+1/2} = \Phi^{n-1/2} + \frac{h}{2} (\Lambda(t_{n+1/2}) + \Lambda(t_{n-1/2})) \quad (2.15)$$

oder die Simpsonregel

$$\Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) \approx \Phi^{n+1/2} = \Phi^{n-3/2} + \frac{h}{6} (\Lambda(t_{n+1/2}) + 4\Lambda(t_{n-1/2}) + \Lambda(t_{n-3/2})) \quad (2.16)$$

angenähert werden.

Wir benötigen also bislang zwei Funktionsauswertungen pro Zeitschritt, eine im Zeitpunkt $t_{n+\frac{1}{2}}$, die zweite in t_{n+1} .

Die Gradienten von U müssen im nichtquadratischen Fall allerdings ebenfalls berechnet werden. Falls diese nicht analytisch exakt berechenbar sind, bilden wir dazu den Differenzenquotienten für den jeweiligen Eintrag:

$$\begin{aligned} \left\{ \nabla_q U(B T_0^{n+1/2} q_0(t_{n+1/2}), t_{n+1/2}) \right\}_j &\approx \left\{ \nabla_q U^{n+1/2} \right\}_j \quad (2.17) \\ &= \frac{1}{h} \left(U(B T_0^{n+1/2} (q_0(t_{n+1/2}) + h e_j), t_{n+1/2}) \right. \\ &\quad \left. - U(B T_0^{n+1/2} q_0(t_{n+1/2}), t_{n+1/2}) \right), \end{aligned}$$

$$\left\{ \nabla_q^2 U(B T_0^{n+1/2} q_0(t_{n+1/2}), t_{n+1/2}) \right\}_{ij} \approx \left\{ \nabla_q^2 U^{n+1/2} \right\}_{ij} \quad \text{mit} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \{\nabla_q^2 U^{n+1/2}\}_{ij} &= \frac{1}{h^2} \left(U(BT_0^{n+1/2}(q_0(t_{n+1/2}) + he_i + he_j), t_{n+1/2}) \right. \\ &\quad - U(BT_0^{n+1/2}(q_0(t_{n+1/2}) + he_i), t_{n+1/2}) \\ &\quad - U(BT_0^{n+1/2}(q_0(t_{n+1/2}) + he_j), t_{n+1/2}) \\ &\quad \left. + U(BT_0^{n+1/2}q_0(t_{n+1/2}), t_{n+1/2}) \right), \end{aligned}$$

wobei e_i und e_j die jeweiligen Einheitsvektoren bezeichnen. Zur Berechnung dieser Größen sind dann natürlich noch zusätzliche Auswertungen des Potentials U notwendig.

Schreiben wir den jeweiligen Zeitschritt als Hochindex, wird (2.9) zu

$$\begin{aligned} \eta^{n+1} &= \eta^n + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) \bullet W_N^{n+1/2} + W_D^{n+1/2} \right) \frac{\eta^{n+1} + \eta^n}{2} d\theta \\ &\quad - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 P_1(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2})^* \left(L_{10}^{n+1/2} p_0(t_{n+1/2}) + S_{10}^{n+1/2} q_0(t_{n+1/2}) \right. \\ &\quad \left. + (T_1^{n+1/2})^T B^T \nabla_q U^{n+1/2} + \varepsilon (T_1^{n+1/2})^T B^T \nabla_q^2 U^{n+1/2} \right. \\ &\quad \left. B T_1^{n+1/2} Q_1(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) \frac{\eta^{n+1} + \eta^n}{2} \right) d\theta, \quad (2.19) \end{aligned}$$

was wir weiter vereinfachen können, indem wir W um den letzten Term von (2.19) erweitern: $\tilde{W}^{n+1/2}$ entspricht dabei der ursprünglichen Gestalt von (1.31), wobei S_{11} ersetzt wird durch

$$\tilde{S}_{11} = S_{11} + (T_1^{n+1/2})^T B^T \nabla_q^2 U^{n+1/2} B T_1^{n+1/2}. \quad (2.20)$$

Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned} \eta^{n+1} &= \eta^n + \frac{h}{2} \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) d\theta \bullet \tilde{W}_N^{n+1/2} + \tilde{W}_D^{n+1/2} \right) \frac{\eta^{n+1} + \eta^n}{2} \\ &\quad - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 P_1(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2})^* d\theta \left(L_{10}^{n+1/2} p_0(t_{n+1/2}) + S_{10}^{n+1/2} q_0(t_{n+1/2}) \right. \\ &\quad \left. + (T_1^{n+1/2})^T B^T \nabla_q U^{n+1/2} \right) \quad (2.21) \end{aligned}$$

und es bleiben noch die Integrale über die oszillatorischen Funktionen E und P_1 zu berechnen. Eintragsweise gilt für $i \neq j$

$$\begin{aligned} \left\{ \int_{-1}^1 E(\theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) d\theta \right\}_{ij} &= 2 \frac{\sin \left(\frac{h}{2\varepsilon} (\lambda_j^{n+1/2} - \lambda_i^{n+1/2}) \right)}{\frac{h}{2\varepsilon} (\lambda_j^{n+1/2} - \lambda_i^{n+1/2})} \\ &= 2 \operatorname{sinc} \left(\frac{h}{2\varepsilon} (\lambda_j^{n+1/2} - \lambda_i^{n+1/2}) \right) =: 2\mathcal{I}(t_{n+1/2})_{ij} \quad (2.22) \end{aligned}$$

und analog für P_1 :

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 P_1(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) d\theta &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right), \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right) \right) \\
&\quad \bullet \int_{-1}^1 \left(\exp\left(\frac{i\theta h}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right), \exp\left(\frac{-i\theta h}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right) \right) d\theta \\
&= \frac{2}{\sqrt{2}} \left(\exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right), \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right) \right) \\
&\quad \bullet \left(\text{Sinc}^{n+1/2}, \text{Sinc}^{n+1/2} \right) =: 2 \mathcal{P}_1(t_{n+1/2}) \quad (2.23)
\end{aligned}$$

mit

$$\Phi_0^{n+1/2} = \int_{t_0}^{t_{n+1/2}} \Omega(s) ds \quad \text{und} \quad \text{Sinc}^{n+1/2} := \text{diag} \left(\text{sinc} \left(\frac{h}{2\varepsilon} \omega_j^{n+1/2} \right) \right)_{j=1}^m.$$

Ein solcher ‘‘adiabatischer’’ Integrator kann nun kombiniert werden mit einem symmetrischen Splitting (siehe auch Kapitel 2.3) zwischen den beiden schwach gekoppelten Systemen (1.29) und (2.3). Für das langsame System (1.29) empfiehlt sich das Störmer-Verlet-Verfahren auf Grund seiner guten Stabilitätseigenschaften, wobei im Falle eines nichtquadratischen Potentials U die Gleichung (1.29) wieder vereinfacht wird. Wir setzen das Verfahren hier ein in Gestalt des symplektischen Euler-Verfahrens und des adjungierten symplektischen Euler-Verfahrens. Die Komposition der beiden ergibt das Störmer-Verlet-Verfahren und erlaubt ein symmetrisches Splitting der beiden Systeme [9]:

Es sei wieder eine Zeit $t_n = t_0 + nh$ gegeben. Wir beginnen mit einem halben Schritt des symplektischen Euler-Verfahrens für p_0 und q_0 ,

$$\begin{aligned}
p_0^{n+1/2} &= p_0^n - \frac{h}{2} \left(L_{00} p_0^{n+1/2} + S_{00} q_0^n + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^n, t_{n+1/2}) \right. \\
&\quad \left. + \varepsilon (S_{01} + T_0^T B^T \nabla_q^2 U(B T_0 q_0^n, t_{n+1/2}) B T_1) \mathcal{Q}_1^- \eta^n \right) \quad (2.24) \\
q_0^{n+1/2} &= q_0^n + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^T q_0^n + \varepsilon L_{10}^T \mathcal{Q}_1^- \eta^n \right).
\end{aligned}$$

Dabei werden die Matrizen L_{00} , L_{10} , S_{00} , S_{01} , T_0 , T_1 und M_0 wieder in $t_{n+1/2} = t_n + h/2$ ausgewertet bzw. die Differenzenquotienten mit (2.14), (2.17) und (2.18) approximiert.

\mathcal{Q}_1^- bezeichnet das gemittelte Integral über die oszillatorische Funktion $Q_1(t)$ aus (1.28) entlang des ersten Halbschrittes,

$$\mathcal{Q}_1^- \approx \frac{2}{h} \int_{t_n}^{t_{n+1/2}} Q_1(t) dt,$$

wobei die Phase $\Phi(t)$ wieder linear approximiert und das Integral wie in (2.23) analytisch berechnet wird:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_1^- &= \int_{-1}^0 Q_1(\Phi^{n+1/2} + \theta h/2 \Lambda^{n+1/2}) d\theta \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right), \quad i \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right) \right) \\
&\quad \bullet \int_{-1}^0 \left(\exp\left(\frac{i\theta h}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right), \quad \exp\left(\frac{-i\theta h}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right) \right) d\theta \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right), \quad i \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right) \right) \\
&\quad \bullet \left(\frac{-2i\varepsilon}{h} (\Omega^{n+1/2})^{-1} (I - \exp\left(\frac{-ih}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right)) \quad , \right. \\
&\quad \quad \left. \frac{2i\varepsilon}{h} (\Omega^{n+1/2})^{-1} (I - \exp\left(\frac{ih}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right)) \right). \quad (2.25)
\end{aligned}$$

Anschliessend führen wir einen ganzen Zeitschritt in η wie in (2.21) aus,

$$\begin{aligned}
\eta^{n+1} &= \eta^n + h \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{n+1/2}) \bullet \tilde{W}_N^{n+1/2} + \tilde{W}_D^{n+1/2} \right) \frac{1}{2} (\eta^{n+1} + \eta^n) \\
&\quad - h \mathcal{P}_1^*(t_{n+1/2}) \left(L_{10} p_0^{n+1/2} + S_{10} q_0^{n+1/2} + T_1^T B^T \nabla_q U^{n+1/2} \right). \quad (2.26)
\end{aligned}$$

Auch hier werden alle Matrizen in $t_{n+1/2}$ ausgewertet bzw. durch den jeweiligen Differenzenquotienten ersetzt.

Der Zeitschritt wird durch einen halben Schritt mit dem adjungierten symplektischen Euler-Verfahren für p_0 und q_0 vervollständigt:

$$\begin{aligned}
p_0^{n+1} &= p_0^{n+1/2} - \frac{h}{2} \left(L_{00} p_0^{n+1/2} + S_{00} q_0^{n+1} + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^{n+1}, t_{n+1/2}) \right. \\
&\quad \left. + \varepsilon (S_{01} + T_0^T B^T \nabla_q^2 U(B T_0 q_0^{n+1}, t_{n+1/2}) B T_1) \mathcal{Q}_1^+ \eta^{n+1} \right) \quad (2.27) \\
q_0^{n+1} &= q_0^{n+1/2} + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^T q_0^{n+1} + \varepsilon L_{10}^T \mathcal{Q}_1^+ \eta^{n+1} \right).
\end{aligned}$$

Die Matrizen werden weiter in $t_{n+1/2}$ ausgewertet, \mathcal{Q}_1^+ bezeichnet nun aber das gemittelte Integral von $Q_1(t)$ über den zweiten Halbschritt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_1^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right), \quad i \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^{n+1/2}\right) \right) \\
&\quad \bullet \left(\frac{-2i\varepsilon}{h} (\Omega^{n+1/2})^{-1} (\exp\left(\frac{ih}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right) - I) \quad , \right. \\
&\quad \quad \left. \frac{2i\varepsilon}{h} (\Omega^{n+1/2})^{-1} (\exp\left(\frac{-ih}{2\varepsilon} \Omega^{n+1/2}\right) - I) \right). \quad (2.28)
\end{aligned}$$

Der Algorithmus dieses Einschrittverfahrens lautet demnach:

Algorithmus

Es seien $p_0^n, q_0^n, \eta^n, \Phi^{n-1/2}, \Phi^n, A(t_{n-1/2}), A(t_n), \Omega(t_{n-1/2}), \Omega(t_n), M(t_{n-1/2}), M(t_n), U(q_0^{n-1/2})$ und $U(q_0^n)$ bzw. die Gradienten von U aus vorigen Schritten oder den Startwerten bekannt.

1. Werte $A(t_{n+1/2}), A(t_{n+1}), M(t_{n+1/2})$ und $M(t_{n+1})$ aus.
2. Zerlege $A = B \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} B^T$; setze $M = B^T M B$.
3. Zerlege $A_1 = C^{-T} C^{-1}$, definiere $C_1 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & C \end{pmatrix}$, setze $M = C_1^T M C_1$ und berechne $K(t_{n+1/2})$ aus (1.10).
4. Zerlege M in die Blöcke M_{00}, M_{01}, M_{10} und M_{11} aus (1.12) und setze $M_0 = M_{00}, M_1 = M_{11} - M_{10} M_{00}^{-1} M_{01}$. Berechne $\bar{K}(t_{n+1/2})$ aus (1.13).
5. Diagonalisiere $M_1 = Q \Omega^{-2} Q^T$ und berechne $\hat{K}(t_{n+1/2})$ aus (1.16).
6. Zerlege $\hat{K} = \begin{pmatrix} K_{00} & K_{01} \\ K_{10} & K_{11} \end{pmatrix}$ und berechne damit $L(t_{n+1/2})$, sowie $S(t_{n+1/2})$ aus (1.19) bzw. (1.20).
7. Berechne $\Phi^{n+1/2}$ und Φ^{n+1} mit (2.15), sowie \mathcal{Q}_1^- mittels (2.25).
8. Aktualisiere die langsamen Variablen p_0 und q_0 bis zum ersten Halbschritt $t_{n+1/2}$ durch (2.24).
9. Berechne $E(\Phi^{n+1/2}), \mathcal{I}(t_{n+1/2}), W^{n+1/2}$ und \mathcal{P}_1 durch (2.2), (2.22), (1.31) und (2.23), ersetze S_{11} in W durch \tilde{S}_{11} aus (2.20) und werte ∇U , sowie $\nabla^2 U$ in $q_0^{n+1/2}$ aus.
10. Führe einen Zeitschritt in η durch mit (2.26).
11. Berechne \mathcal{Q}_1^+ mittels (2.28) und führe den zweiten Halbschritt in q_0 aus (2.27).
12. Werte ∇U , sowie $\nabla^2 U$ in q_0^{n+1} aus und aktualisiere abschliessend p_0 um den zweiten Halbschritt (2.27).

13. Führe an den gewünschten Ausgabepunkten eine Rücktransformation in die ursprünglichen Variablen durch; verwende dabei obige Funktionsauswertungen und Matrixzerlegungen.

Vorsicht ist bei der Diagonalisierung von $M_1(t)$ geboten, die nur eindeutig ist bis auf die Sortierung der Eigenwerte und die Vorzeichen der Eigenvektoren. Deshalb müssen wir darauf achten, dass die Reihenfolge der Eigenwerte in jedem Zeitschritt dieselbe bleibt und durch die Diagonalisierung keine künstlichen Vorzeichenwechsel der Eigenvektoren ins Spiel kommen. Insbesondere bei der Berechnung der Differenzenquotienten für \dot{Q} führen solche unerkannten Vorzeichenwechsel zu erheblichen Problemen und falschen Ergebnissen.

2.3 Splitting-Verfahren

In Abschnitt 2.2 haben wir einen numerischen Integrator entwickelt, der auf einer Vereinfachung der gegebenen Differentialgleichungen beruht. Dabei wurde der Gradient von U an der Stelle $BT_0q_0 + \varepsilon BT_1Q_1\eta$ durch eine abgebrochene Taylorentwicklung um BT_0q_0 ersetzt und ein Modellfehler von $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ begangen, falls das Potential U von höherer als quadratischer Ordnung ist. Unser Interesse gilt hochoszillatorischen Systemen, also Systemen mit kleinen Werten von ε , so dass wir diesen Modellfehler stehen lassen könnten.

Allerdings erhalten wir ausgehend von unserem ersten Integrator mit nur wenig Mehraufwand Integratoren, die ohne einen Modellfehler, also auf die vollständigen transformierten Differentialgleichungen, anwendbar sind. Zudem wird hierbei ein grundlegendes Prinzip der Konstruktion numerischer Verfahren, das bereits ange deutete Splitting, verwendet, so dass wir hier zwei solche Integratoren vorstellen.

2.3.1 Das Impuls-Verfahren

Bei einem Splitting-Verfahren wird die Hamiltonfunktion in zwei Summanden aufgeteilt, $H = H^1 + H^2$. Jeder solchermaßen abgesplittete Teil wird für sich als Hamiltonfunktion eines eigenen Subsystems betrachtet, deren Flüsse φ^1 und φ^2 dann zum Verfahren zusammengesetzt werden.

Das dabei entstehende sogenannte ‘‘Impuls-Verfahren’’ lautet:

$$\Phi_h = \varphi_{h/2}^2 \circ \varphi_h^1 \circ \varphi_{h/2}^2,$$

wobei wir wieder an Zeitschrittweiten $h > \varepsilon$ interessiert sind.

Die ursprüngliche Idee hinter den Impuls-Verfahren ist ein Splitting der Hamiltonfunktion in einen Teil mit langsamer Dynamik, H^{slow} , und einen Teil mit schneller Dynamik, H^{fast} . Der Fluss des langsamen Systems $\varphi_{h/2}^{\text{slow}}$ wird dann wie ein Impuls nur am Anfang und Ende eines Zeitschritts gesetzt, während mit dem Fluss des schnellen Systems $\varphi_{h/N}^{\text{fast}}$ eine zu wählende Anzahl N kleiner Schritte dazwischen gemacht werden [8], Kapitel VIII.

Hier werden wir den etwas umständlich auszuwertenden, aber in der Dynamik langsamen Teil des Potentials U als H^2 von der Hamiltonfunktion absplitten und im Mittelteil des Verfahrens den adiabatischen Integrator des vorigen Abschnitts einsetzen (vgl. [8], Kapitel XIV).

Wir zerlegen also

$$U(B(t)T_0q_0(t) + \varepsilon^{1/2}B(t)T_1(t)q_1(t), t) = U(B(t)T_0q_0(t), t) + R(q(t), t)$$

und definieren $R(q(t), t)$ als Differenz der beiden Potentiale. Das Splitting der Hamiltonfunktion erfolgt nun durch

$$\begin{aligned} H^1(p, E, q, t) &= \frac{1}{2} p_0^T M_0(t)^{-1} p_0 + \frac{1}{2\varepsilon} p_1^T \Omega(t) p_1 + \frac{1}{2\varepsilon} q_1^T \Omega(t) q_1 \\ &\quad + q^T L(t) p + \frac{1}{2} q^T S(t) q + U(B(t)T_0q_0(t), t) + E, \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$H^2(p, E, q, t) = R(q(t), t). \quad (2.30)$$

Die Bewegungsgleichungen des ersten Subsystems lauten demnach

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= -L_{00}p_0 - S_{00}q_0 - \varepsilon S_{01}Q_1\eta - T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \\ \dot{q}_0 &= M_0^{-1} p_0 + L_{00}^T q_0 + \varepsilon L_{10}^T Q_1 \eta \\ \dot{\eta} &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) W \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) \eta - P_1^* (L_{10}p_0 + S_{10}q_0) \\ \dot{t} &= 1 \end{aligned}$$

mit

$$W = \Gamma^* \begin{pmatrix} -L_{11} & -\varepsilon S_{11} \\ 0 & L_{11}^T \end{pmatrix} \Gamma.$$

Zur Approximation des exakten Flusses dieses Systems setzen wir unser adiabatisches Verfahren aus Kapitel 2.2 ein, wobei wir keinen Modellfehler mehr begehen und die Formeln erheblich vereinfachen können:

$$\begin{aligned}
& \tilde{\varphi}_h^1 : \\
p_0^{n+1/2} &= p_0^n - \frac{h}{2} \left(L_{00} p_0^{n+1/2} + S_{00} q_0^n + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^n, t_{n+1/2}) \right. \\
& \quad \left. + \varepsilon S_{01} \mathcal{Q}_1^- \eta^n \right) \\
q_0^{n+1/2} &= q_0^n + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^T q_0^n + \varepsilon L_{10}^T \mathcal{Q}_1^- \eta^n \right) \\
\eta^{n+1} &= \eta^n + h \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{n+1/2}) \bullet W_N^{n+1/2} + W_D^{n+1/2} \right) \frac{1}{2} (\eta^{n+1} + \eta^n) \\
& \quad - h \mathcal{P}_1^* \left(L_{10} p_0^{n+1/2} + S_{10} q_0^{n+1/2} \right) \\
p_0^{n+1} &= p_0^{n+1/2} - \frac{h}{2} \left(L_{00} p_0^{n+1/2} + S_{00} q_0^{n+1} + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^{n+1}, t_{n+1/2}) \right. \\
& \quad \left. + \varepsilon S_{01} \mathcal{Q}_1^+ \eta^{n+1} \right) \\
q_0^{n+1} &= q_0^{n+1/2} + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^T q_0^{n+1} + \varepsilon L_{10}^T \mathcal{Q}_1^+ \eta^{n+1} \right).
\end{aligned}$$

Die Matrizen werden wieder in $t_{n+1/2}$ ausgewertet bzw. entsprechend approximiert.

Die Bewegungsgleichungen des zweiten Subsystems ergeben sich als

$$\begin{aligned}
\dot{p} &= -\nabla_q R(q, t) \\
&= - \left(\begin{array}{c} T_0^T B^T \left(\nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon^{1/2} B T_1 q_1, t) - \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \right) \\ \varepsilon^{1/2} T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon^{1/2} B T_1 q_1, t) \end{array} \right) \quad (2.31) \\
\dot{q} &= 0 \\
\dot{t} &= 0.
\end{aligned}$$

Auch hier werden p_1 und q_1 wieder in η ausgedrückt und wir erhalten für (2.31)

$$\begin{aligned}
\dot{p}_0 &= -T_0^T B^T \left(\nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, t) - \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \right) \\
\dot{\eta} &= -P_1^* T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, t).
\end{aligned}$$

Zusammen mit $\dot{t} = 0$, sowie $\dot{q} = 0$ können wir die Argumente der Matrizen in der Zeit t_n bzw. in den Positionen q_0^n einfrieren. $P_1(t)$ und $Q_1(t)$ sind wieder definiert durch die oszillatorischen Matrixexponentialfunktionen (1.28). Dabei gilt $Q_1 P_1^* = 0$ und damit $Q_1 \dot{\eta} = 0$, also $Q_1 \eta = \text{Const.}$

Dies ermöglicht es uns, auch das Argument des Potentials U in η^n einzufrieren und das zweite System durch den exakten Fluss $\varphi_{h/2}^2$ zu lösen:

$$\varphi_{h/2}^2 : \tag{2.32}$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_0^n &= p_0^n - \frac{h}{2} T_0^T B^T \left(\nabla_q U(B T_0 q_0^n + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta^n, t_n) - \nabla_q U(B T_0 q_0^n, t_n) \right) \\ \hat{\eta}^n &= \eta^n - \frac{h}{2} P_1^* T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^n + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta^n, t_n). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Die hier berechneten Werte liefern zusammen mit $\hat{q}_0^n = q_0^n$ die Startwerte für den adiabatischen Integrator $\tilde{\varphi}_h^1$, worauf eine erneute Anwendung von $\varphi_{h/2}^2$ mit den Startwerten p_0^{n+1} , q_0^{n+1} und η^{n+1} folgt:

$$\Phi_h = \varphi_{h/2}^2 \circ \tilde{\varphi}_h^1 \circ \varphi_{h/2}^2.$$

2.3.2 Das gemittelte Impuls-Verfahren

Eine etwas störende Eigenschaft des Impuls-Verfahrens ist die Auswertung der hochoszillatorischen Funktionen P_1 und Q_1 in einem einzelnen Zeitwert t_n , wie sie in $\varphi_{h/2}^2$ auftritt. Auch wenn $\dot{t} = 0$ gilt, können wir uns hier doch etwas mehr Mühe geben und dadurch die Akkumulation oszillatorischer Fehlerterme, wie wir sie in Kapitel 2.4 und 2.5 beobachten werden, reduzieren.

Wir verwenden zu diesem Zweck das sogenannte “mollified” oder gemittelte Impuls-Verfahren (vgl. [8], Kapitel XIV).

Es unterscheidet sich von obigem Impuls-Verfahren ausschließlich dadurch, dass die Matrizen $P_1(t)$ und $Q_1(t)$ in $\varphi_{h/2}^2$ nicht mehr an einem Punkt des Intervalls ausgewertet werden, sondern durch die gemittelten Integrale

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1(t) &\approx \frac{1}{2h} \int_{t-h}^{t+h} P_1(s) ds \\ \mathcal{Q}_1(t) &\approx \frac{1}{2h} \int_{t-h}^{t+h} Q_1(s) ds \end{aligned}$$

ersetzt werden.

Diese werden wieder näherungsweise berechnet, indem wir die Phase $\Phi(s)$ im Argument von P_1 und Q_1 linear approximieren. Es ergibt sich also:

$$\mathcal{P}_1(t_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^n\right) \quad \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^n\right) \right) \bullet \left(\text{Sinc}^n, \quad \text{Sinc}^n \right)$$

$$\mathcal{Q}_1(t_n) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-i \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^n\right) \quad i \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^n\right) \right) \bullet \left(\text{Sinc}^n, \text{Sinc}^n \right)$$

mit

$$\Phi_0^n = \int_{t_0}^{t_n} \Omega(s) ds \quad \text{und} \quad \text{Sinc}^n := \text{diag} \left(\text{sinc} \left(\frac{h}{\varepsilon} \omega_j^n \right) \right)_{j=1}^m.$$

Die Mittelung der oszillatorischen Funktionen $P_1(t)$ und $Q_1(t)$ entspricht dem Ersetzen des Potentials $U(q, t)$ durch ein verändertes Potential $\bar{U}(q, t)$ mit

$$\bar{U}(q, t) = U(B T_0 q_0 + \varepsilon^{1/2} B T_1 \mathcal{S} q_1, t), \quad \mathcal{S}(t) = \text{Sinc}(t). \quad (2.34)$$

Mit dem derart veränderten Potential U wird $\varphi_{h/2}^2$ zu

$$\begin{aligned} \hat{p}_0^n &= p_0^n - \frac{h}{2} T_0^T B^T \left(\nabla_q U(B T_0 q_0^n + \varepsilon B T_1 \mathcal{Q}_1 \eta^n, t_n) - \nabla_q U(B T_0 q_0^n, t_n) \right) \\ \hat{\eta}^n &= \eta^n - \frac{h}{2} \mathcal{P}_1^* T_1^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^n + \varepsilon B T_1 \mathcal{Q}_1 \eta^n, t_n). \end{aligned}$$

Und wie gewünscht gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_1(t) &= \mathcal{S}(t) P_1(t) = \frac{1}{2h} \int_{t-h}^{t+h} P_1(s) ds + \mathcal{O}(h) \\ \mathcal{Q}_1(t) &= \mathcal{S}(t) Q_1(t) = \frac{1}{2h} \int_{t-h}^{t+h} Q_1(s) ds + \mathcal{O}(h). \end{aligned}$$

Diese Maßnahme eliminiert den ungewünschten Effekt von Schrittweitenresonanzen, wie wir in den Beweisen der Fehlerabschätzungen von Kapitel 2.4 sehen werden.

Wir haben nun drei Integratoren mit unterschiedlichen Eigenschaften entwickelt, basierend auf verschiedenen Ansätzen (Modellvereinfachung durch Weglassen kleiner Terme bzw. ein Splitting der Hamiltonfunktion). Allen gemeinsam ist der Ansatz, die Phase $\Phi(t)$ linear zu approximieren. In Kapitel 2.4 werden wir sehen, dass wir mit diesem Ansatz einen Fehler von $\mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h)$ in den Positionen und $\mathcal{O}(h)$ in den schnellen Impulsen erhalten, sofern die Eigenwerte einen ausreichenden Abstand zueinander haben. Verbesserungen können wir also in zwei Punkten anstreben:

- eine Erhöhung der Ordnung auf zwei auch in allen Impulsen,
- eine Schrittweitensteuerung, mit der wir das Verhalten von η durch nichtadiabatische Übergänge verfolgen können, ohne über das ganze Zeitintervall kleine Schritte verwenden zu müssen.

In Kapitel 3.1 und 3.2 werden wir uns dem ersten Punkt zuwenden; die Problematik von Fastkreuzungen wird Thema des Kapitels 2.6 sein.

2.4 Fehleranalyse: Resultate

Das typische Vorgehen in der Fehleranalyse von Verfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen erfordert zunächst die Untersuchung des lokalen Fehlers, das heißt des Fehlers nach einem Schritt des Verfahrens. Beträgt dieser lokale Fehler $\mathcal{O}(h^{p+1})$ mit $p \in \mathbb{N}$, so besitzt ein numerisch stabiles Verfahren einen globalen Fehler von $\mathcal{O}(h^p)$. Der globale Fehler, der nach $n \in \mathbb{N}$ Schritten berechnet wird, ist gegenüber dem lokalen Fehler um eine h -Potenz reduziert, da sich die lokalen Fehler im Fortschreiten des Verfahrens akkumulieren.

Die Fehleranalyse besteht hier also aus zwei Teilen: der Abschätzung des lokalen Fehlers und der Berechnung der Fehlerakkumulation.

Dabei erinnern wir uns zunächst an die in Kapitel 1.3 formulierten Ziele. Die adiabatischen Integratoren sind zeitsymmetrisch und benötigen zwei Funktionsauswertungen pro Zeitschritt; die letzten beiden Ziele sind also bereits erreicht. Wir wir bereits vermutet haben, wird die lineare Phasenapproximation allerdings nicht ausreichen, um in allen Variablen die gewünschte Genauigkeit von global $\mathcal{O}(h^2)$ zu erreichen. In welchen Variablen dieses Ziel erreicht wird, werden wir hier als Resultat angeben, die entsprechenden Beweise finden sich aus Gründen der Übersichtlichkeit in Kapitel 2.7 und 2.8.

Zunächst formulieren wir die Voraussetzungen, die für alle Lemmata, Sätze und Theoreme dieses Kapitels Grundlage sind:

- V1** Es gilt die Energiebeschränkung $H(p, q, t) \leq \text{Const.}$ für die Anfangswerte und die Funktionen in (1.2) sind ausreichend oft differenzierbar (C^3 mit unabhängig von ε beschränkten Ableitungen).
- V2** Die orthogonale Matrix $Q(t)$ aus (1.15) hat beschränkte Ableitungen mit $\dot{Q}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1})$ und $\ddot{Q}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-2})$.
- V3** Die Frequenzen $\omega_k(t)$ erfüllen für alle Zeiten $t \in [t_0, t_{end}]$ die Ungleichungen $|\omega_k(t) - \omega_l(t)| \geq \delta$ und $\omega_k(t) \geq \text{Const.} > 0 \quad \forall k, l = 1, \dots, m$ mit $k \neq l$.
- V4** Die Schrittweite h erfüllt $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$.

In einigen Sätzen bzw. allen Theoremen betrachten wir zudem ausschließlich die adiabatische Situation mit $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$

V4 bedeutet dabei nicht, dass die Verfahren für Schrittweiten $h < \varepsilon$ keine guten Resultate liefern bzw. wir nicht in der Lage sind, für diesen Fall eine Fehleranalyse durchzuführen. Im Gegenteil: mit Zeitschritten unterhalb der Oszillationswellenlänge kann das Verfahren die Oszillationen auflösen und damit deutlich kleinere Fehler und bessere Fehlerabschätzungen erreichen. Unser in Kapitel 1.3 formuliertes Ziel war es aber, Integratoren zu entwickeln, die auch mit Schrittweiten $h > \varepsilon$ eine akzeptable Genauigkeit erreichen. Deshalb liegt unser eigentliches Interesse an einer Fehlerabschätzung für diesen Schrittweitenbereich und wir beschränken uns in der Fehleranalyse auf eine Argumentation für $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$.

Satz 2 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 gelten für den lokalen Fehler des adiabatischen Verfahrens mit linearer Phasenapproximation für ein vereinfachtes Modell (Kapitel 2.2) folgende Abschätzungen:*

$$\|p_0^1 - p_0(t_0 + h)\| = \mathcal{O}(h^3/\delta^3) , \quad (2.35)$$

$$\|q_0^1 - q_0(t_0 + h)\| = \mathcal{O}(h^3/\delta^2) , \quad (2.36)$$

$$\|\eta^1 - \eta(t_0 + h)\| = \mathcal{O}(h^2/\delta^3) . \quad (2.37)$$

Die durch \mathcal{O} symbolisierten Konstanten hängen dabei nicht von ε , δ und h ab, die Koordinaten bezeichnen die transformierten Koordinaten von (1.29) und (1.30).

Beweis: Siehe Kapitel 2.7.

Wir haben bei diesem Verfahren exemplarisch das Auftreten der Potenzen von δ im Nenner verfolgt, um das Verhalten der Verfahren beim Durchlaufen von Fastkreuzungen zu untersuchen. An Hand der Fehlerabschätzungen erkennen wir, dass kleine Werte von δ , insbesondere $\delta < \sqrt{\varepsilon}$ bzw. $\delta < h$, die Fehleranalyse und Konvergenz des Verfahrens derart untergraben können, dass wir nur noch bis zur Sprungstelle von η bzw. der Fastkreuzungsstelle eine gute Approximation erwarten können.

Um trotz kleiner Werte von δ ein gutes Gesamtergebnis zu erzielen, müssten wir die Schrittweite h deutlich kleiner wählen und damit die Potenzen von δ im Nenner kompensieren. Über das gesamte Zeitintervall wird ein solches Vorgehen zum einen teuer und steht zum anderen im Gegensatz zu unserem Ziel, Schrittweiten $h > \varepsilon$ verwenden zu können.

Der Parameter δ ist allerdings nur in dem kleinen Bereich wirksam, in dem der Sprung statt findet. Danach würde das Verfahren auch mit größeren Schrittweiten wieder gute Approximationen liefern, so dass wir in Kapitel 2.6 nach einer Möglichkeit suchen werden, ausschließlich im Sprungbereich mit kleinen Schritten voran zu gehen und auf dem restlichen Intervall Schrittweiten $h > \varepsilon$ zu verwenden.

Aufgrund der Tatsache, dass die von δ verursachten Effekte ausschließlich auf einem Intervall der Länge δ wirksam sind, gehen wir bei der Untersuchung des globalen Fehlers von der adiabatischen Situation mit $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ aus. In dieser Situation lässt sich der globale Fehler in den ursprünglichen Variablen von (1.6) aus den Abschätzungen von Satz 2 durch Untersuchung der Fehlerakkumulation und Rücktransformation herleiten:

Theorem 2 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 und $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ gelten für den globalen Fehler des adiabatischen Verfahrens mit linearer Phasenapproximation für ein vereinfachtes Modell (Kapitel 2.2) nach Rücktransformation folgende Abschätzungen:*

$$\|p_0^n - p_0(t_n)\| = \mathcal{O}(h^2) , \quad (2.38)$$

$$\|q_0^n - q_0(t_n)\| = \mathcal{O}(h^2) , \quad (2.39)$$

$$\|p_1^n - p_1(t_n)\| = \mathcal{O}(h) , \quad (2.40)$$

$$\|q_1^n - q_1(t_n)\| = \mathcal{O}(\varepsilon h) , \quad (2.41)$$

mit von ε und h unabhängigen Konstanten.

Beweis: Siehe Kapitel 2.7.

Für $h > \varepsilon$ erreichen wir also tatsächlich zweite Ordnung in den Positionen und langsamen Impulsen, nur die schnellen Impulse sind durch $\mathcal{O}(h)$ beschränkt. Durch den begangenen Modellfehler sind Fehlerterme verschiedener Potenzen von ε entstanden, welche eine Stagnation der Fehlerkurve ab einem bestimmten Punkt ($h < \varepsilon$) bewirken. Bei einer Untersuchung von Schrittweiten $h > \varepsilon$ fällt dies nicht weiter ins Gewicht; wir werden jedoch sehen, dass sich dieses Verhalten durch Anwendung der Splitting-Verfahren in eine dauerhaft fallende Fehlerkurve verändern lässt.

Die Fehleranalyse der Splitting-Verfahren unterscheidet sich von der vorigen Analyse dadurch, dass wir zunächst einen diskreten Adiabatensatz zeigen und von diesem aus zum globalen Fehler übergehen. Dabei geht auch ein, dass wir den globalen Fehler unseres ersten Verfahrens bereits analysiert haben.

Der diskrete Adiabatensatz ist allerdings auch unabhängig von der Untersuchung des Fehlers von Interesse. Wann immer ein System in Physik, Chemie, Biologie o.ä. ein bestimmtes Verhalten zeigt, ist es natürlich wünschenswert, dieses Verhalten auch im Verhalten des numerischen Verfahrens wieder zu finden. Man spricht auch von geometrischer numerischer Integration [8].

In der Situation dieser Arbeit existiert mit der transformierten Variablen η eine adiabatische Invariante, für die gilt: $\eta(t) = \eta(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon)$ (vgl. Kapitel 1.5). Wir wünschen uns also für die numerische Lösung η^n , dass diese sich ebenfalls nur in einem kleinen Wertebereich um eine Konstante bewegt. Aufgrund von Schrittweitenresonanzen erhalten wir zunächst allerdings nur (vgl. [8], Kap. XIV)

Satz 3 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 und $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ gilt nach n Schritten des Impuls-Verfahrens für $nh \leq T \leq \text{Const.}$,*

$$\eta^n = \eta^0 + \sigma_n + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (2.42)$$

Dabei ist σ_n eine Summe über die rechte Seite von (2.33):

$$\sigma_n = -h \sum_{j=0}^n {}'P_1(t_j) {}^*T_1(t_j)^T B(t_j)^T \nabla_q U(B(t_j)T_0q_0^j + \varepsilon B(t_j)T_1(t_j)Q_1(t_j)\eta^j, t_j). \quad (2.43)$$

Der Strich am Summenzeichen zeigt an, dass der erste und letzte Summand jeweils mit dem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert werden.

Weiter gilt

$$\|\sigma_n\| \leq C\kappa \quad \text{mit} \quad \kappa = \max_{0 \leq nh \leq T} \max_k \left\| h \sum_{j=0}^n \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \phi_k(t_j)\right) \right\|. \quad (2.44)$$

Beweis: Siehe Kapitel 2.8.

Die Größe von κ in (2.44) wird durch Resonanzen zwischen der Schrittweite h und den Frequenzen bestimmt, weshalb κ auch als Resonanzindikator bezeichnet wird [8]. Typischerweise gilt $\kappa = \mathcal{O}(h)$, in resonanten Situationen kann κ allerdings auch Werte der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ annehmen.

In Kapitel 2.5 können wir das Auftreten dieser Resonanzen direkt an den Fehlerkurven beobachten, hier widmen wir uns zunächst dem globalen Fehler des Verfahrens:

Theorem 3 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 und $\frac{1}{8} < \text{Const.}$ gilt nach n Schritten des Impuls-Verfahrens für die rücktransformierten Koordinaten*

$$\begin{aligned} p_0^n - p_0(t_n) &= \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\varepsilon\kappa) \\ q_0^n - q_0(t_n) &= \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\varepsilon\kappa) \\ p_1^n - p_1(t_n) &= \mathcal{O}(\kappa) \\ q_1^n - q_1(t_n) &= \mathcal{O}(\varepsilon\kappa). \end{aligned}$$

Die durch \mathcal{O} symbolisierten Konstanten hängen dabei nicht von ε , n und h ab, solange $nh \leq \text{Const.}$ gilt.

Beweis: Siehe Kapitel 2.8.

Dem Problem der Schrittweitenresonanzen können wir durch eine Erhöhung der Ordnung begegnen, was allerdings eine Erhöhung des Aufwandes mit sich bringt. Wie wir in den folgenden Fehlerabschätzungen sehen werden, erzielen wir bereits eine große Verbesserung, indem wir das gemittelte Impulsverfahren verwenden. Am Anfang steht wieder ein diskreter Adiabatenatz:

Satz 4 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 und $\frac{1}{8} < \text{Const.}$ gilt nach n Schritten des gemittelten Impuls-Verfahrens für $nh \leq T \leq \text{Const.}$,*

$$\eta^n = \eta^0 + \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (2.45)$$

Beweis: Siehe Kapitel 2.8.

Damit haben wir den Effekt von Schrittweitenresonanzen durch Elimination des Resonanzindikators κ in dem Verfahren für η und damit im Fehler der schnellen Variablen reduziert. Auch in den langsamen Variablen erhalten wir nun $\mathcal{O}(\varepsilon h)$ anstatt $\mathcal{O}(\varepsilon\kappa)$ und fassen zusammen:

Theorem 4 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 und $\frac{1}{8} < \text{Const.}$ gilt nach n Schritten des gemittelten Impuls-Verfahrens für die rücktransformierten Koordinaten*

$$\begin{aligned} p_0^n - p_0(t_n) &= \mathcal{O}(h^2) \\ q_0^n - q_0(t_n) &= \mathcal{O}(h^2) \\ p_1^n - p_1(t_n) &= \mathcal{O}(h) \\ q_1^n - q_1(t_n) &= \mathcal{O}(\varepsilon h). \end{aligned}$$

Die durch \mathcal{O} symbolisierten Konstanten hängen wieder nicht von ε , n und h ab, solange $nh \leq \text{Const.}$ gilt.

Beweis: Siehe Kapitel 2.8.

Da dieses Verfahren dieselben Funktionsauswertungen verwendet, wie wir sie auch für den ersten Integrator oder das Impulsverfahren benötigen, erscheint es auf Grund der Fehleranalyse sinnvoll, Modellfehler und Schrittweitenresonanzen durch die Anwendung des gemittelten Impuls-Verfahrens zu umgehen.

Im nächsten Kapitel werden wir alle drei Verfahren auf verschiedene Beispiele anwenden und sie dadurch einem Praxistest unterziehen.

2.5 Numerische Beispiele

Zunächst betrachten wir ein in der Mechanik sehr gebräuchliches Beispiel, das Problem von Fermi, Pasta & Ulam [4]. Wir untersuchen hier die in [8], Kapitel I.4, betrachtete Modifikation und wenden die drei Verfahren des vorigen Abschnitts an. Im zweiten Teil dieses Abschnitts verwenden wir die Verfahren dann für das Fastkreuzungsbeispiel aus Kapitel 1.5.2, um die Auswirkungen der Fastkreuzungsdynamik auf das Verhalten der adiabatischen Integratoren zu untersuchen.

2.5.1 Ein Fermi-Pasta-Ulam Problem

Wir betrachten eine Kette von $2m$ Massepunkten, die abwechselnd mit weichen, nichtlinearen und harten, linearen Federn verbunden sind; die Kette ist an den Endpunkten fixiert. Abbildung 2.1 illustriert diese Situation.

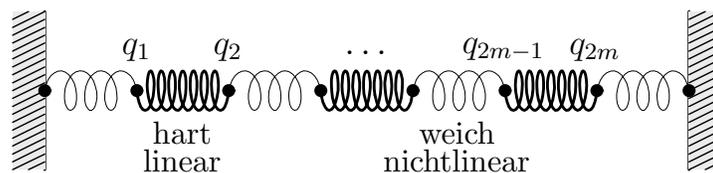


Abbildung 2.1: Kette mit alternierenden weichen, nichtlinearen und harten, linearen Federn.

Die Variablen q_1, \dots, q_{2m} ($q_0 = q_{2m+1} = 0$) stehen dabei für die Auslenkung der jeweiligen Massepunkte, $p_i = \dot{q}_i$ für deren Geschwindigkeiten.

Die Bewegung wird durch ein Hamiltonsystem mit Gesamtenergie

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m (p_{2i-1}^2 + p_{2i}^2) + \frac{\omega(t)^2}{4} \sum_{i=1}^m (q_{2i} - q_{2i-1})^2 + \sum_{i=0}^m (q_{2i+1} - q_{2i})^4$$

beschrieben, wobei $\omega(t)$ groß ist, also $\omega(t) = \alpha(t)/\varepsilon$.

Wir führen neue Variablen ein (vgl. [8], Kapitel I.5), indem wir mit dem Spaltenvektor $x_{0,i}$, $i = 1, \dots, m$, die skalierte Auslenkung der i -ten steifen Feder bezeichnen, mit $x_{1,i}$ deren skalierte Dehnung oder Kompression und mit $y_{0,i}$ bzw. $y_{1,i}$ die jeweiligen Geschwindigkeiten oder Impulse:

$$\begin{aligned} x_{0,i} &= (q_{2i} + q_{2i-1})/\sqrt{2}, & x_{1,i} &= (q_{2i} - q_{2i-1})/\sqrt{2}, \\ y_{0,i} &= (p_{2i} + p_{2i-1})/\sqrt{2}, & y_{1,i} &= (p_{2i} - p_{2i-1})/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Es entsteht wieder ein Hamiltonsystem mit Hamiltonfunktion

$$H(x, y, t) = \frac{1}{2} y^T M^{-1} y + \frac{1}{2\varepsilon^2} x^T A(t) x + U(x),$$

dabei ist

$$x = \begin{pmatrix} x_{0,i} \\ x_{1,i} \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_{0,i} \\ y_{1,i} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, m,$$

$M = I_{2m}$ die $2m$ -dimensionale Identität,

$$A(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \alpha(t)^2 A_1 \end{pmatrix} \quad \text{eine } 2m \times 2m\text{-Matrix mit Diagonalmatrix } A_1 \text{ und}$$

$$U(x) = \frac{1}{4} \left((x_{0,1} - x_{1,1})^4 + \sum_{i=1}^{m-1} (x_{0,i+1} - x_{1,i+1} - x_{0,i} - x_{1,i})^4 + (x_{0,m} + x_{1,m})^4 \right).$$

$A(t)$ ist dabei symmetrisch und positiv definit, falls $\alpha(t) \neq 0$ und A_1 eine Diagonalmatrix mit positiven Einträgen ist.

Wir können also unsere Verfahren aus dem vorigen Abschnitt anwenden, wobei eine Umbenennung von x in q und y in p den gewohnten Formalismus liefert. q_0 ($= x_0$) spielt wieder die Rolle der langsamen Positionen, q_1 ($= x_1$) die der schnellen und p_0 bzw. p_1 sind die zugehörigen Impulse.

Wir wählen $m = 3$, $\varepsilon = 0.01$, $\alpha(t) = 1 + \frac{1}{2} \sin t$ und $A_1 = \text{diag}(1, 2, 4)$; als Startwerte verwenden wir $q(0) = (1, 0, 0, \varepsilon, 0, 0)^T$ und $p(0) = (1, 0, 0, 1, 0, 0)^T$.

In Abbildung 2.2 sehen wir den über $t \in [0, 5]$ gemittelten Fehler, logarithmisch geplottet gegen die jeweils verwendete Schrittweite.

Wir können dabei unterschiedliche, bereits angesprochene Eigenschaften der Verfahren erkennen.

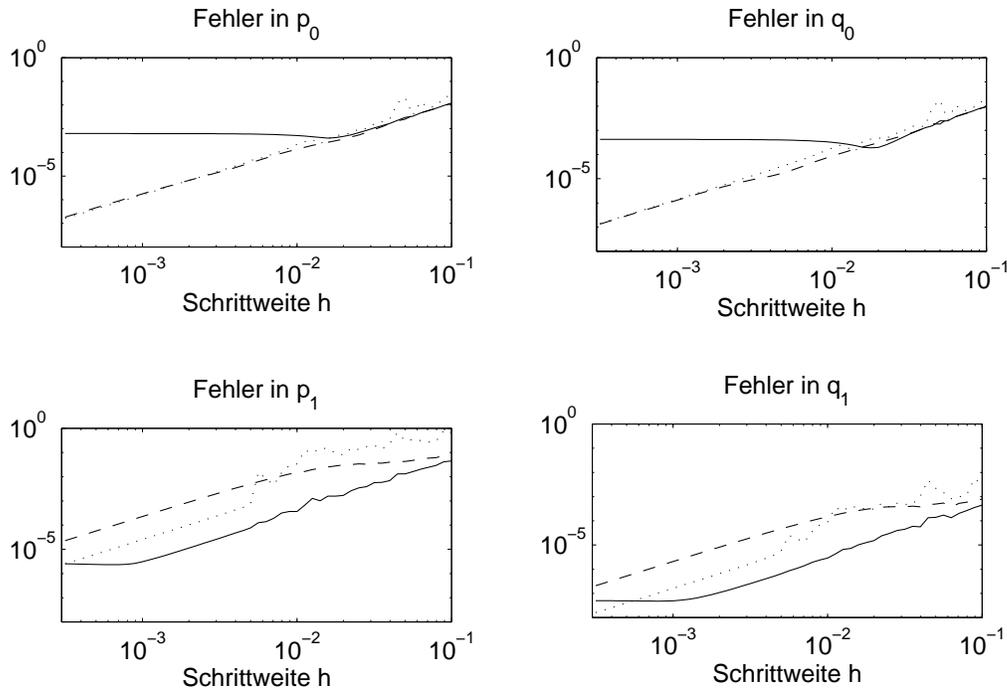


Abbildung 2.2: Gemittelter Fehler des 1. Verfahrens (durchgezogen), des Impuls-Verfahrens (gepunktet) und des gemittelten Impuls-Verfahrens (gestrichelt), geplottet gegen die Schrittweite für $\varepsilon = 0.01$.

In der oberen Reihe wurde der Fehler in den langsamen Variablen p_0 und q_0 geplottet. Klar erkennbar ist dabei der vom ersten Verfahren begangene Modellfehler. Er bewirkt, dass die Fehlerkurve für $h < \varepsilon$ nicht weiter fällt, sondern bei einem Fehler der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ stagniert. Auch in den schnellen Variablen ist diese Stagnation erkennbar, allerdings tritt sie auf Grund der Transformation nach η erst für $h < \varepsilon^{3/2}$ auf. Wir erkennen außerdem einen Unterschied in der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ zwischen p_1 und q_1 , der durch die Rücktransformation und Reskalierung entstanden ist und uns bereits durch die Fehlerabschätzungen begleitet hat.

Der Vergleich der beiden Splitting-Verfahren zeigt die Auswirkungen des Resonanzindicators κ . Während das Impuls-Verfahren im interessanten Schrittweitenbereich $h > \varepsilon$ durch sich aufsummierende Oszillationen einen unruhigen Fehlerverlauf zeigt, bewegt sich der Fehler des gemittelten Impuls-Verfahrens entlang einer glatten Kurve.

An den Steigungen der doppeltlogarithmisch aufgetragenen Fehlerkurven können wir die Ordnung der Verfahren ablesen. Diese Steigungen bewegen sich für alle Variablen in der Größenordnung von 2, was den Aussagen der Theoreme aus Kapitel 2.4 für p_0 , q_0 und q_1 entspricht. Die theoretisch reduzierte Ordnung der Verfahren in den schnellen Impulsen p_1 findet sich für dieses Beispiel in unserem Experiment nicht wieder. Die Verfahren bewähren sich also zumindest in diesem Praxistest besser als ihre theoretisch nachprüfaren Eigenschaften.

Eine weitere interessante Fragestellung ist die Überprüfung des Nutzens unseres theoretischen Aufwandes. Verhalten sich die durch die Transformationen und Integration entstandenen Verfahren deutlich besser als wohlbekannte Algorithmen? Wir haben einen Test gemacht und das Störmer-Verlet-Verfahren auf das ursprüngliche Hamiltonsystem (1.2) bzw. (1.4) angewandt. Die logarithmischen Fehlerkurven der verschiedenen Variablen sind in Abbildung 2.3 dargestellt.

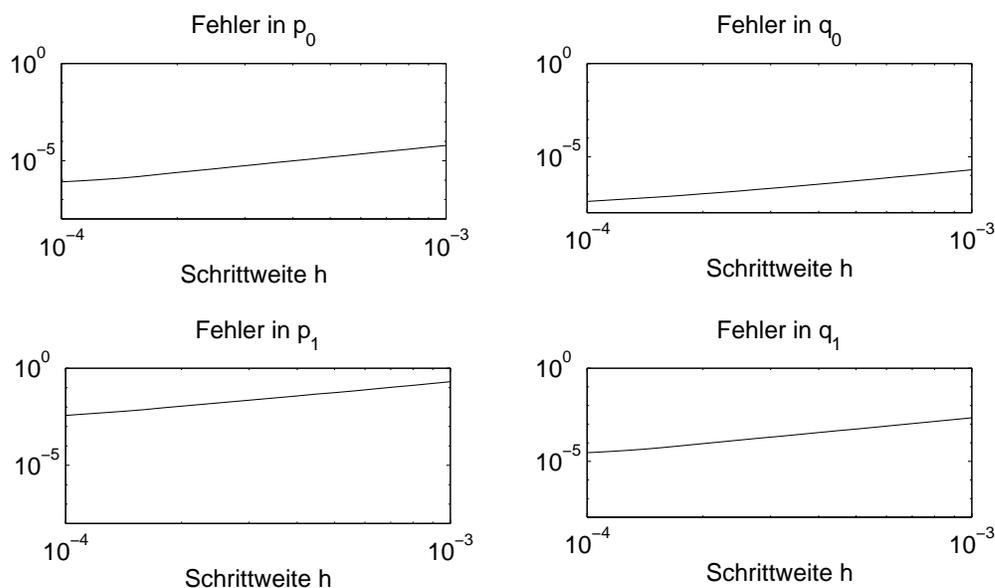


Abbildung 2.3: Gemittelter Fehler des Störmer-Verlet-Verfahrens, geplottet gegen die Schrittweite für $\varepsilon = 0.01$.

Zunächst fällt auf, dass das Störmer-Verlet-Verfahren erst für $h \leq 10^{-3}$ zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Dies liegt insbesondere an den Problemen, die durch die Schwierigkeiten in der Approximation der hochoszillatorischen Variablen p_1 bzw. q_1 entstehen. Für $h = 10^{-3}$ erhalten wir in p_1 gerade mal einen Fehler in der Größenordnung von 10^{-1} . Die adiabatischen Integratoren liegen da schon bei $\mathcal{O}(10^{-4})$. Für $h > 10^{-3}$ bzw. $h > \varepsilon$ liefert das Störmer-Verlet-Verfahren kein akzeptables Ergebnis. Das Störmer-Verlet-Verfahren ist ein ubiquitäres Verfahren in Mathematik, Physik und vor allem Chemie und Biologie, dessen gute Langzeiteigenschaften man seit Jahrzehnten schätzt und nutzt [8]. Allerdings muss es, wie die meisten anderen Verfahren auch, bei hochoszillatorischen Problemen sehr kleine Schritte verwenden, um diese Oszillationen aufzulösen. Mit den speziell auf diese Problematik zugeschnittenen adiabatischen Integratoren haben wir also tatsächlich unser Ziel erreicht, Integratoren mit Schrittweiten $h > \varepsilon$ stabil auf Probleme dieser Art anwenden zu können.

Doch wie verändert sich die Situation, wenn Fastkreuzungen der Eigenfrequenzen ins Spiel kommen? Im nächsten Abschnitt werden wir dies an einem Beispiel illustrieren.

2.5.2 Ein Problem mit Fastkreuzung

Wir wollen in diesem Kapitel exemplarisch die Auswirkungen von Fastkreuzungen der Eigenfrequenzen auf das Verhalten der numerischen Lösungen veranschaulichen. Dazu bedienen wir uns wieder des in Kapitel 1.5.1 verwendeten Modellproblems, hier in Form von

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T M(t)^{-1} p + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^T A(t) q + U(q, t)$$

mit

$$M(t) \equiv \text{Id.}, U(q, t) \equiv 0 \text{ und } A(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_1(t) \end{pmatrix}, \quad A_1(t) = \begin{pmatrix} t+3 & \delta \\ \delta & 2t+3 \end{pmatrix}^2.$$

Dadurch, dass das Potential U konstant ist, verschwinden die Unterschiede zwischen den drei Verfahren und wir beschränken uns auf die Untersuchung des ersten Verfahrens. Ein Modellfehler tritt nicht auf.

Die langsamen Variablen p_0 und q_0 verhalten sich ebenfalls in besonderer Art und Weise: p_0 bleibt konstant, während q_0 eine lineare Bewegung durchführt. Auf Grund der besonderen Wahl des Beispiels belässt der adiabatische Integrator p_0 ebenfalls

auf dem Startwert und berechnet q_0 mit einem durchschnittlichen Fehler von nur 10^{-13} , so dass wir uns hier auf die schnellen Variablen konzentrieren. Wir sind ohnedies vor allem am Verhalten des Verfahrens beim Auftreten von Sprüngen in η interessiert, so dass wir mit einem Fokus auf die schnellen Variablen gerade die interessantesten Bewegungen verfolgen können.

Abbildung 2.4 zeigt in der oberen Reihe den über $t \in [-1, 1]$ gemittelten Fehler in den schnellen Impulsen p_1 und in der unteren Reihe den der schnellen Positionen q_1 . Dabei werden vom linken zum rechten Diagramm kleiner werdende Werte von δ verwendet und der jeweilige Fehler logarithmisch gegen die Schrittweite geplottet.

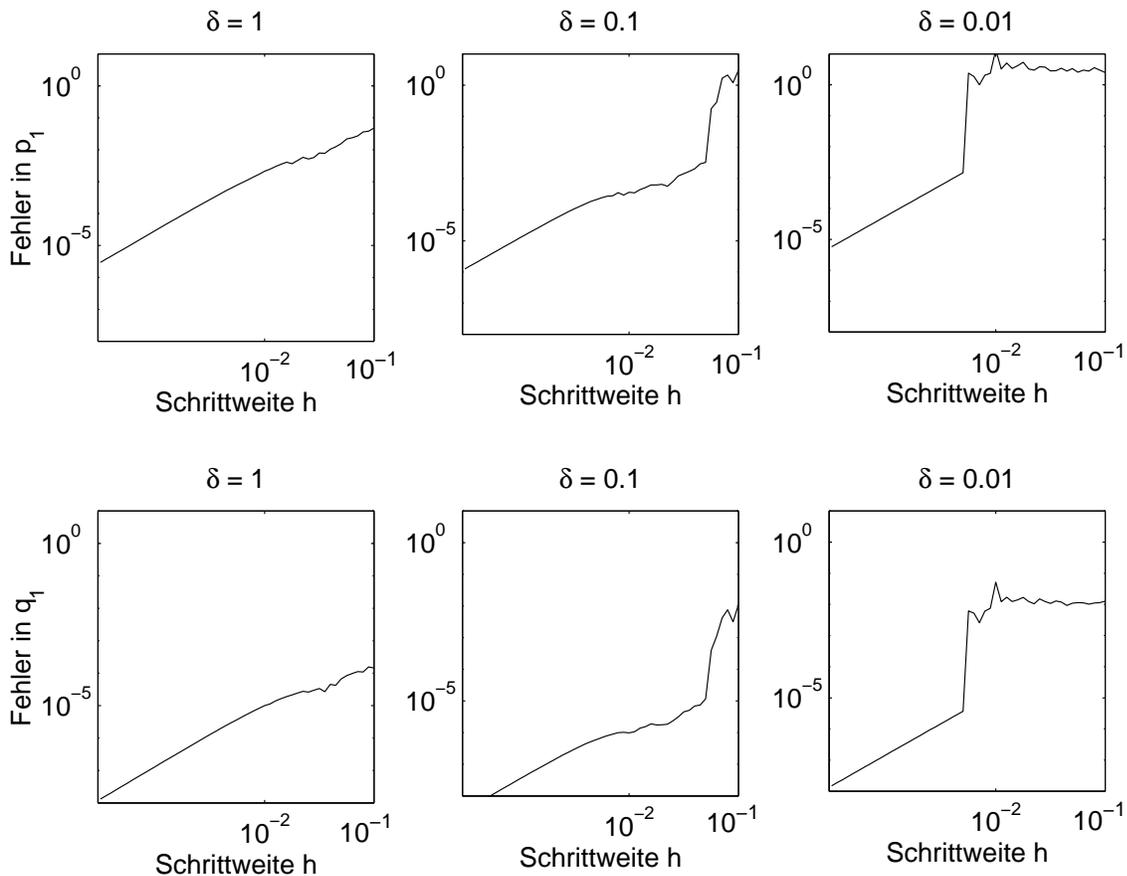


Abbildung 2.4: Fehler in den schnellen Variablen, geplottet gegen die Schrittweite für $\varepsilon = 0.01$, $\delta = 1, 0.1, 0.01$.

Wir bemerken zunächst wieder den durch die Rücktransformation entstandenen Unterschied zwischen p_1 und q_1 in der Größenordnung von $\varepsilon = 0.01$.

In Kapitel 1.5.2 haben wir dieses Beispiel theoretisch untersucht und festgestellt, dass die Eigenfrequenzen ϕ_j für $\delta = 1$ getrennt bleiben und wir für das Verfahren ein Verhalten wie im vorigen Abschnitt erwarten können. Dies zeigt die linke Spalte mit einer konvergenten Fehlerkurve (-geraden). Nimmt δ kleinere Werte an, verliert die adiabatische Invariante η ihre charakteristische Eigenschaft, beginnt zu wackeln und zeigt für $\delta \approx 0.05$ schließlich einen Sprung auf einer $\mathcal{O}(1)$ -Skala. Mit diesem Sprung bekommen unsere Integratoren Probleme, wenn die Schrittweite nicht klein genug ist, wie wir im mittleren und rechten Teil von Abbildung 2.4 ablesen können. Der lokale Fehler in η , den wir in Abschnitt 2.4, Satz 2 untersucht haben, hat die Größenordnung $\mathcal{O}(h^2/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h/\delta^3)$. Wir können also nur dann einen kleinen Fehler und Konvergenz erwarten, wenn wir mit der Schrittweite h deutlich unter dem Wert von δ bleiben. Dieses theoretische Ergebnis bestätigt sich hier im Experiment. Für Schrittweiten $h > \delta$ bzw. $h \approx \delta$ erhalten wir weder Konvergenz noch einen akzeptablen Fehler. Erst für $h < \delta$ konvergiert das Verfahren mit der vertrauten Ordnung. Das ganze Intervall mit solch kleinen Schritten zu durchmessen, nur wegen eines Sprunges auf einem kleinen Teilintervall, verursacht allerdings hohe Kosten und dauert gegebenenfalls recht lange.

Im nächsten Abschnitt stellen wir dafür eine günstigere Lösung vor, die auf der Wahl adaptiver Schrittweiten im Sprungbereich beruht.

2.6 Schrittweitensteuerung

Bereits mehrfach sind wir der Problematik von Fastkreuzungen der Eigenfrequenzen ϕ_j begegnet, die zu Sprüngen in der adiabatischen Variablen η führen. Wesentlicher Parameter ist hier die minimale Distanz δ der Eigenfrequenzen, die in der Diagonalisierung mittels Q mit $\|\dot{Q}\| = \mathcal{O}(\delta^{-1})$ zu großen Termen und Problemen führt. Der Parameter ist allerdings nur über den kleinen Zeitbereich der Länge δ wirksam, in dem auch der Sprung in η auftritt. Wir suchen deshalb nach einer Möglichkeit, nur in diesen isolierten Sprungbereichen kleine Schritte machen zu können und damit den Fehler der Verfahren zu reduzieren, ansonsten aber mit Zeitschritten $h > \varepsilon$ voran zu gehen. In [19] bzw. [16] wurden bereits Möglichkeiten zur adaptiven Wahl von Schrittweiten vorgeschlagen.

Wir verfolgen hier allerdings einen Ansatz aus [8], Kapitel VIII und XIV, der es uns ermöglicht, die Zeitschrittweite reversibel zu kontrollieren. Dies respektiert in

besonderer Art und Weise die geometrischen Eigenschaften des Systems.

Dazu wird eine Transformation $t \leftrightarrow \tau$ in der Zeit vorgenommen, mit $\frac{dt}{d\tau} = \sigma(t)$. In Abschnitt 1.5.2 haben wir bereits für die Untersuchung des Testbeispiels eine Transformation $\tau = \frac{t}{2\delta}$ vorgenommen, also $\frac{dt}{d\tau} = 2\delta$. Diese war ausschließlich für die δ -Umgebung der Sprungstelle definiert worden. Hier soll eine solche Transformation nun automatisch durch das Programm geschehen, wenn wir uns der Sprungstelle nähern. Deshalb definieren wir

$$\sigma(t) = \left(\|W(t)\|^2 + \alpha^2 \right)^{-1/2},$$

mit einer vereinfachten Matrix $W(t) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} L_{11} - L_{11}^T & L_{11} + L_{11}^T \\ L_{11} + L_{11}^T & L_{11} - L_{11}^T \end{pmatrix}$, die den für das Sprungverhalten wesentlichen Anteil \dot{Q} enthält, und einem Parameter α , der interpretiert werden kann, als das Verhältnis von einem noch zu definierenden Genauigkeitsparameter μ zur maximal zulässigen Schrittweite. Um $\sigma(t)$ besser differenzieren zu können, wählen wir die Frobenius-Norm, $\|W(t)\| = (\text{trace}(W(t)^T W(t)))^{1/2}$. Ohne den Parameter α entspräche diese Transformation im Sprungbereich genau der in 1.5.2 angewandten Transformation $\tau = \frac{t}{2\delta}$, im Gegensatz zu der dortigen schrumpft und wächst hier die Schrittweite allerdings mit den vom System gestellten Anforderungen. Der Parameter α garantiert uns im Wesentlichen, dass die Schritte immer klein genug bleiben, um den Sprung nicht gänzlich zu übersehen.

Zur kürzeren Darstellung des Formalismus fassen wir nun die transformierten Differentialgleichungen (1.29) und (1.30) zu $\dot{y} = f(y)$ zusammen mit $y^T = (p_0^T, q_0^T, \eta^T)$. Die Transformation in der Zeit führt zu

$$y'(\tau) = \frac{d}{dt} y(t) \frac{dt}{d\tau} = f(y) \sigma(t) = \frac{1}{z} f(y) \quad \text{mit} \quad z\sigma(t) = 1, \quad (2.47)$$

\dot{y} bezeichnet dabei die Differentiation von y nach t , y' die nach τ .

Wir differenzieren die zweite Gleichung von (2.47) nach τ und erhalten $z'\sigma(t) + z\dot{\sigma}(t)\sigma(t) = 0$, also

$$z' = G(t) \quad \text{mit} \quad G(t) = -\frac{\dot{\sigma}(t)}{\sigma(t)} = \left(\|W(t)\|^2 + \alpha^2 \right)^{-1} \text{trace}(\dot{W}(t)^T W(t)). \quad (2.48)$$

Nach [10] entwickeln wir den folgenden Algorithmus, der zunächst den Fluss von (2.48) über einen Halbschritt $\mu/2$ approximiert, dann einen Schritt mit einem der

adiabatischen Integratoren Φ_μ , angewandt auf $y' = f(y)/z$, macht und mit einem zweiten Halbschritt für $z' = G(t)$ endet:

$$\begin{aligned} z_{n+1/2} &= z_n + \frac{\mu}{2} G(t_n) \\ h_{n+1/2} &= \mu / z_{n+1/2} \\ t_{n+1} &= t_n + h_{n+1/2} \\ y^{n+1} &= \Phi_{h_{n+1/2}}(y^n) \\ z_{n+1} &= z_{n+1/2} + \frac{\mu}{2} G(t_{n+1}). \end{aligned}$$

Der Genauigkeitsparameter μ entspricht dabei der für τ verwendeten Schrittweite, $\tau_n = n\mu$, und wir gehen von Startwerten $y(t_0) = y_0$ bzw. $z_0 = \frac{1}{\sigma(t_0)}$ aus.

Der Algorithmus kann aufgefasst werden als Strang-Splitting-Verfahren für die Lösung des gekoppelten Systems $y' = \frac{1}{z}f(y)$, $z' = G(t)$ und ist symmetrisch, falls Φ_h symmetrisch ist und ebenso reversibel. Auch erhält dieses Verfahren die Invariante $I(t, z) = z\sigma(t)$. Wir müssen die auftretenden Größen also nur noch berechnen können, um ein adäquates Verfahren zur adaptiven Schrittweitensteuerung zu erhalten.

Für die adiabatischen Integratoren, die sich hinter $\Phi_h(y)$ verbergen, benötigen wir Funktionsauswertungen in $t_{n+1} = t_n + h_{n+1/2}$ und $t_{n+1/2} = t_n + \frac{1}{2} h_{n+1/2}$; dafür muss allerdings zunächst $h_{n+1/2}$ und damit $G(t_n)$ berechnet werden. $G(t_n)$ enthält mit $L_{11}(t_n)$ und $\dot{L}_{11}(t_n)$ erste und zweite Ableitungen von Ω , Q , G , C und B , die wir bislang mit Differenzenquotienten approximiert haben. Dafür benötigen wir eine Auswertung in t_{n+1} , welches wir zu diesem Zeitpunkt allerdings noch nicht kennen. Wir berechnen deshalb zunächst $\tilde{t}_{n+1} = t_n + h_{n-1/2}$, werten die Funktionen A , M und U dort aus, berechnen damit die Differenzenquotienten in $G(t_n)$, sowie $h_{n+1/2}$ und dann $t_{n+1} = t_n + h_{n+1/2}$ bzw. $t_{n+1/2} = t_n + \frac{1}{2} h_{n+1/2}$.

So benötigen wir drei Funktionsauswertungen pro Zeitschritt, was immer noch günstiger ist, als das ganze Zeitintervall mit kleinen Schritten zu durchmessen.

In Abbildung 2.5 haben wir die Lösung $\eta(t)$ des Beispiels aus Kapitel 1.5.2 und die numerische Approximation ohne (links) und mit Schrittweitensteuerung (rechts) für $\varepsilon = 0.01$ und $\delta = 0.02$ geplottet. Wir erkennen in der linken Graphik deutlich die Probleme, die der Integrator ohne Schrittweitensteuerung nach dem Durchlaufen einer Sprungstelle hat. Der Fehler am Ende liegt in der Größenordnung von 10^{-1} . Verwenden wir adaptive Schrittweiten, so beträgt der Fehler am Endzeitpunkt 10^{-3} und ist in der Grafik mit bloßem Auge nicht mehr zu erkennen. Ohne die Schritt-

weitensteuerung wäre eine akzeptable Genauigkeit hier also nicht erreicht worden.

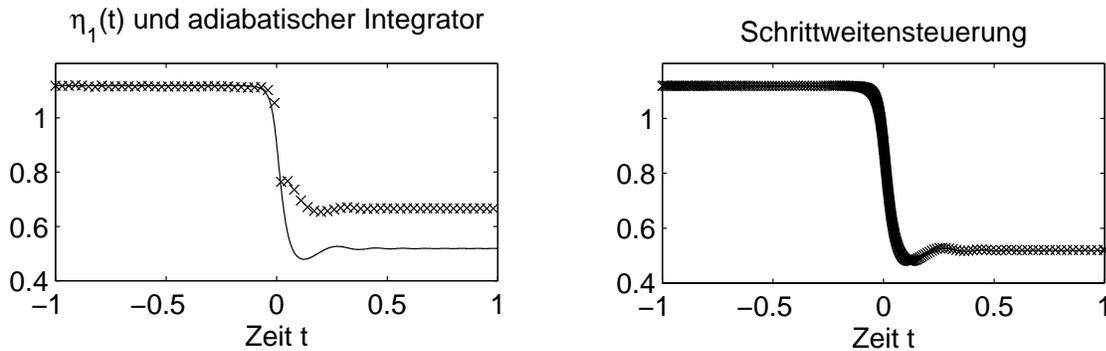


Abbildung 2.5: $\eta(t)$ (Linie) und numerische Approximation (Kreuze) ohne und mit Schrittweitensteuerung für $\varepsilon = 0.01$, $\delta = 0.02$ und Ausgangsschrittweite $h = 0.03$.

Allerdings erscheint das Intervall mit Schrittweitensteuerung beim groben Hinsehen dicht besetzt mit Funktionsauswertungen. Ob die Schrittweiten vor allem im Sprungbereich verkleinert worden sind, oder ob das ganze Intervall mit kleinen Schritten durchmessen wurde, lässt sich so nicht genau erkennen.

Dies können wir allerdings aus Abbildung 2.6 ablesen, wo wir die Schrittweiten für das Beispiel aus Kapitel 1.5.2 als Funktion der Zeit darstellen. Die verwendeten Parameter sind $\mu = 0.01$, $\alpha = 0.1$, $\varepsilon = 0.01$ und $\delta = 1, 2^{-2}, 2^{-4}, 2^{-6}$. In Abschnitt 1.5.2 haben wir gesehen, dass bei $t = 0$ eine Fastkreuzung der Eigenfrequenzen auftritt, die sich umso stärker auswirkt, je kleiner der Parameter δ im Vergleich zu ε wird. Wie Abbildung 2.6 zeigt, verringert sich die Schrittweite umso stärker, je kleiner δ wird. Dies geschieht dabei ausschließlich in dem kleinen zeitlichen Bereich, in dem sich das Sprungverhalten abspielt und wir haben unser Ziel erreicht, nur in einem kleinen Teilintervall kleinere Schrittweiten zu verwenden. Das restliche Intervall wird dann mit der größeren Ausgangsschrittweite durchmessen.

Betrachten wir den Fehler am Endpunkt $t = 1$, so erhalten wir in den Positionen in allen Fällen eine Größenordnung des Fehlers von nur $4 \cdot 10^{-4}$ bis $1 \cdot 10^{-5}$.

Im vorigen Abschnitt haben wir gesehen, dass wir zum Erreichen einer solchen Fehlerordnung eine konstante Schrittweite von ca. $5 \cdot 10^{-3}$ verwenden müssten. In Abbildung 2.6 können wir dagegen ablesen, dass wir mit Hilfe der adaptiven Schrittweitensteuerung über weite Teile des Intervalls mit deutlich größeren Schrittweiten arbeiten können und somit Rechenzeit und -aufwand sparen.

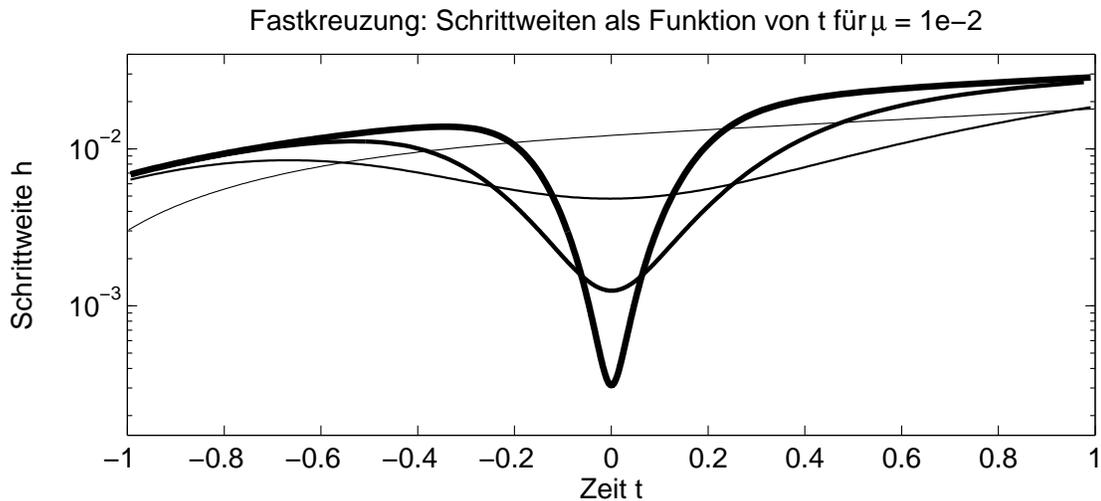


Abbildung 2.6: Schrittweiten als Funktion der Zeit t für $\varepsilon = 0.01$ und $\delta = 1, 2^{-2}, 2^{-4}, 2^{-6}$ (dicker werdende Linien).

2.7 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 2 (1. Verfahren)

In der üblichen numerischen Fehleranalyse legen am Ende die Potenzen von h die Ordnung des Verfahrens fest. Bei den Beweisen dieses Kapitels müssen wir allerdings nicht nur die Potenzen von h beachten, wir haben mit ε einen weiteren kleinen Parameter im Auge zu behalten. Bei Termen der Größenordnung $\mathcal{O}(h^2/\varepsilon)$ zum Beispiel können wir nicht von h^2 -Fehlertermen sprechen, da für $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$ der kleine Parameter im Nenner h -Potenzen im Zähler “auffressen“ kann. Im Nenner auftretende Potenzen von ε können uns also h -Potenzen kosten.

Beim ersten Verfahren wollen wir zusätzlich verfolgen, wie sich kleine Werte von δ , also Fastkreuzungen der Eigenfrequenzen, auf den lokalen Fehler auswirken. Dadurch wird die Problematik der Verfahren im Durchlaufen von nichtadiabatischen Übergängen erkennbar. Dieses Sprungverhalten spielt sich allerdings in sehr kleinen Zeitintervallen ab, der Parameter δ ist also nur über einen sehr kleinen zeitlichen Bereich wirksam, weshalb wir ihn bei der Abschätzung des globalen Fehlers nicht mehr berücksichtigen werden. Dort gehen wir von der adiabatischen Situation mit $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ aus. Zur Vereinfachung fassen wir mit C oder \mathcal{O} auftretende, von ε und h unabhängige Konstanten zusammen.

2.7.1 Lokaler Fehler: Beweis von Satz 2

Die Strategie beim Beweis der Abschätzungen (2.35)-(2.37) verläuft ähnlich wie bei einem Puzzlespiel. Zunächst zerlegen wir den lokalen Fehler in handliche Teile, die wir genau betrachten und abschätzen können. Dann setzen wir diese wieder zusammen, bis ein komplettes Bild des Fehlers entstanden ist.

1. Schritt: Vorbereitungen

Zur Vorbereitung schätzen wir einige mehrfach auftretende Matrizen und Terme ab, die uns dann später jederzeit als "Randteile" unseres Puzzles zur Verfügung stehen werden.

Dabei erhalten wir unter den gegebenen Voraussetzungen durch Identifikation der Größenordnung der enthaltenen Matrizen :

$$K_{00}(t) = \mathcal{O}(1), \quad K_{01}(t) = \mathcal{O}(1), \quad K_{10}(t) = \mathcal{O}(1), \quad (2.49)$$

ebenso die Ableitung $\dot{K}_{00}(t) = \mathcal{O}(1)$, aber

$$\dot{K}_{01}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}), \quad \dot{K}_{10}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}) \quad \text{und} \quad K_{11}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}), \quad \dot{K}_{11}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-2}). \quad (2.50)$$

Daraus ergeben sich folgende Schranken für die Blöcke von $L(t)$ und $S(t)$ bzw. deren Ableitungen

$$L_{00}, \dot{L}_{00}, L_{10}, S_{00}, S_{11} = \mathcal{O}(1), \quad \dot{L}_{10}, \dot{S}_{00}, \dot{S}_{11} = \mathcal{O}(\delta^{-1}), \quad (2.51)$$

$$L_{11}, S_{01}, S_{10} = \mathcal{O}(\delta^{-1}), \quad \dot{L}_{11}, \dot{S}_{01}, \dot{S}_{10} = \mathcal{O}(\delta^{-2}), \quad (2.52)$$

und folglich auch

$$W(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}), \quad \dot{W}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-2}). \quad (2.53)$$

Aus der Beschränkung der Gesamtenergie H und der Differentialgleichung (1.30) für η haben wir

$$\eta(t) = \mathcal{O}(1), \quad \dot{\eta}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}). \quad (2.54)$$

Wir schließen weiter aus den Differentialgleichungen (1.29) für p_0 und q_0

$$\ddot{p}_0(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1}) + \mathcal{O}(\varepsilon\delta^{-2}), \quad \ddot{q}_0(t) = \mathcal{O}(1) + \mathcal{O}(\varepsilon\delta^{-1}), \quad (2.55)$$

und bei jeder weiterer Ableitung von p_0 und q_0 wächst die Größenordnung dieser Ableitungen um δ^{-1} .

2. Schritt: Der Modellfehler

Der begangene Modellfehler entsteht beim Ersetzen von $\nabla_q U(B T_0 q_0 + \varepsilon B T_1 Q_1 \eta, s)$ durch $\nabla_q U(B T_0 q_0, s) + \varepsilon \nabla_q^2 U(B T_0 q_0, s) B T_1 Q_1 \eta$ unter dem Integral und beträgt demnach nach einem Schritt des Verfahrens ($s = t_{1/2} + \frac{\theta h}{2}$)

$$\frac{\varepsilon^2 h}{2} \int_{-1}^1 \eta(s)^* Q_1(s)^* N(s) Q_1(s) \eta(s) d\theta$$

plus Terme höherer Ordnung in ε . Dabei ist der $m \times 2m \times m$ -Tensor $N(s)$ definiert durch $N(s) = T_1(s)^* B(s)^* \nabla_q^3 U(B(s) T_0(s) q_0(s), s) B(s) T_1(s)$.

Die Multiplikation von links mit Q_1^* und von rechts mit Q_1 bewirkt, dass jeder der $m \times m$ -Blöcke von $N(s)$, hier bezeichnet mit $N_k(s)$, $k = 1, \dots, 2m$, mit oszillatorischen Exponentialen multipliziert wird. Dabei entstehen $2m \times 2m$ -Blöcke der Gestalt

$$\begin{aligned} & Q_1(s)^* N_k(s) Q_1(s) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) N_k(s) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) & -\exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) N_k(s) \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) \\ -\exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) N_k(s) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) & \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) N_k(s) \exp\left(\frac{-i}{\varepsilon} \Phi_0^s\right) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Integrieren wir hierüber, gewinnen wir in den Einträgen der Nebendiagonalen durch die oszillatorischen Exponentialfunktionen einen Faktor der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon/h)$. Auf der Diagonalen heben sich die Einträge der Exponentialfunktionen aber gegeneinander weg, so dass der lokale Gesamtfehler, der durch die Vereinfachung des Modells entstanden ist, für $j = 1, \dots, m$ bestimmt wird durch

$$\frac{\varepsilon^2 h}{4} \int_{-1}^1 \eta_j(s)^* N_k^{jj}(s) \eta_j(s) d\theta = \mathcal{O}(\varepsilon^2 h). \quad (2.56)$$

3. Schritt: Der Fehler durch lineare Phasenapproximation

Bei der linearen Phasenapproximation wird $\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)$ im Argument der komplexen Exponentialfunktion ersetzt durch $\Phi(t_{1/2}) + \theta h/2 \Lambda(t_{1/2})$, also dem linearen Beginn der Taylorreihe. Wir führen nun für die Differenz

$$E(\Phi(t + \theta h/2)) - E(\Phi(t) + \theta h/2 \Lambda(t))$$

eine neue Schreibweise ein (vgl. [16]).

Dafür bezeichnen wir mit $R = \text{diag}(r_j)$ das Restglied der Taylorentwicklung

$$\Phi(t + \mu) = \Phi(t) + \mu \Lambda(t) + \mu^2 R(t, \mu)$$

und definieren damit die matrixwertige Funktion

$$F(t, x, R) = D(R(t, x)) \bullet \int_0^1 E(\theta x^2 R(t, x)) d\theta. \quad (2.57)$$

Nach Voraussetzung V1 aus Kapitel 2.4 ist F auf kompakten Intervallen beschränkt und bezüglich t stetig differenzierbar. $\dot{F}(t, x, R)$ bleibt dabei unabhängig von ε beschränkt.

Für $x \neq 0$ gilt:

$$F(t, x, R) = \frac{\varepsilon}{ix^2} (E(x^2 R(t, x)) - E(0))$$

und damit für die Differenz

$$\begin{aligned} E(\Phi(t + \theta h/2)) - E(\Phi(t) + \theta h/2 \Lambda(t)) \\ = \frac{i\theta^2 h^2}{4\varepsilon} E(\Phi(t) + \theta h/2 \Lambda(t)) \bullet F(t, \theta h/2, R). \end{aligned}$$

Der Fehler, der durch die lineare Phasenapproximation in den unterschiedlichen Teilen des Verfahrens entsteht, ist gegeben durch das Integral über diese Differenz. Wir betrachten nun also ganz allgemein Ausdrücke vom Typ

$$\int_{\tau_1}^{\tau_2} E(\theta h/2 \Lambda) \bullet G(\theta) d\theta$$

mit einer matrixwertigen, stetig differenzierbaren Funktion G , deren Ableitung unabhängig von h und ε auf kompakten Intervallen beschränkt bleibt. Im obigen Fall ist $G(\theta) = \theta^2 F(t, \theta h/2, R)$. Nun fügen wir im Integranden den Faktor $\frac{ih}{2\varepsilon} D(\Lambda) \bullet \frac{2\varepsilon}{ih} D^-(\Lambda)$ als ‐nahrhafte Eins‐ ein und integrieren partiell:

$$\begin{aligned} & \int_{\tau_1}^{\tau_2} E(\theta h/2 \Lambda) \bullet \frac{ih}{2\varepsilon} D(\Lambda) \bullet \frac{2\varepsilon}{ih} D^-(\Lambda) \bullet G(\theta) d\theta \\ &= \frac{2\varepsilon}{ih} E(\theta h/2 \Lambda) \bullet D^-(\Lambda) \bullet G(\theta) \Big|_{\theta=\tau_1}^{\tau_2} - \frac{2\varepsilon}{ih} \int_{\tau_1}^{\tau_2} E(\theta h/2 \Lambda) \bullet D^-(\Lambda) \bullet G'(\theta) d\theta. \end{aligned}$$

Mit $D^-(\Lambda) = \mathcal{O}(\delta^{-1})$ und den Beschränkungen von $F(t, \theta h/2, R)$ erhalten wir für den durch die lineare Phasenapproximation entstehenden Fehlerterm die Abschätzung

$$\int_{-1}^1 E(\Phi(t + \theta h/2)) - E(\Phi(t) + \theta h/2 \Lambda(t)) d\theta \quad (2.58)$$

$$= \frac{ih^2}{4\varepsilon} E(\Phi(t)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h/2 \Lambda) \bullet \theta^2 F(t, \theta h/2, R) d\theta = \mathcal{O}\left(\frac{h}{\delta}\right). \quad (2.59)$$

4. Schritt: Der Fehler in p_0 und q_0

(a) Zeige zunächst $\eta^1 = \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)$ und

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^{t_0+h/2} \varepsilon \left(S_{01}(t) + T_0^T B^T \nabla_q^2 U(B(t)T_0 q_0(t), t) T_1(t) \right) Q_1(t) \eta(t) dt \\ &= \frac{h}{2} \varepsilon \left(S_{01}^{1/2} + T_0^T B(t_{1/2})^T \nabla_q^2 U(B(t_{1/2})T_0 q_0^0, t_{1/2}) T_1(t_{1/2}) \right) Q_1^- \eta^0 \\ & \quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h / \delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2 / \delta). \end{aligned}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \eta^1 &= \eta^0 + h \left(E(\Phi^{1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{1/2}) \bullet \tilde{W}_N^{1/2} + \tilde{W}_D^{1/2} \right) \frac{1}{2} (\eta^1 + \eta^0) \\ & \quad - h \mathcal{P}_1^*(t_{1/2}) \left(L_{10} p_0^{1/2} + S_{10} q_0^{1/2} + T_1^T B^T \nabla_q U^{1/2} \right), \end{aligned}$$

und wir können nach den Vorbereitungen aus dem ersten Schritt abschätzen

$$(1 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)) \eta^1 = (1 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)) \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)$$

bzw.

$$\eta^1 = \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2).$$

Zum Beweis der zweiten Abschätzung schreiben wir das Integral $\int_{t_0}^{t_0+h/2} X(t) dt$ als $\frac{h}{2} \int_{-1}^0 X(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta$ und zerlegen die Differenz der beiden langen Terme in handlichere Differenzen. Die erste entsteht durch das Einfrieren von $t_{1/2} + \theta h/2$ in der Zeit $t_{1/2}$ bzw. $q_0(t_{1/2} + \theta h/2)$ in $q_0(t_0)$ in allen Argumenten bis auf das der komplexen Exponentialfunktion, die sich in Q_1 versteckt.

Der größte Fehlerterm entsteht dabei durch $S_{01}(t_{1/2} + \theta h/2) = S_{01}(t_{1/2}) + \mathcal{O}(h/\delta^2)$, was zusammen mit $\int_{-1}^0 Q_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) \eta(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta = \mathcal{O}(\varepsilon/h)$ einen Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^2 h / \delta^2)$ ergibt.

Die zweite Differenz entsteht durch das näherungsweise Berechnen der Ableitungen in $S_{01}(t_{1/2})$ durch die symmetrischen Differenzenquotienten bzw. durch die Annäherung des Gradienten von U . Der hierbei entstehende Fehler hat die gleiche Größenordnung: $\mathcal{O}(\varepsilon^2 h / \delta^2)$.

Zuletzt bleibt der Fehler abzuschätzen, der durch die lineare Phasenapproximation von Φ in $Q_1(\Phi(t))$ entstanden ist. Dabei können wir auf den dritten Schritt dieses Beweises zurückgreifen und erhalten

$$\begin{aligned} & \frac{h}{2} \varepsilon (S_{01}^{1/2} + T_0^T B^T \nabla_q^2 U(B(t_{1/2}) T_0 q_0^0, t_{1/2}) T_1(t_{1/2})) \\ & \left(\int_{-1}^0 Q_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) d\theta - \mathcal{Q}_1^- \right) \eta^0 = \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta). \end{aligned}$$

Zusammen mit $\eta^1 = \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)$ können wir eine analoge Abschätzung für den zweiten Halbschritt zeigen:

$$\begin{aligned} & \int_{t_0+h/2}^{t_0+h} \varepsilon \left(S_{01}(t) + T_0^T B(t)^T \nabla_q^2 U(B(t) T_0 q_0(t), t) T_1(t) \right) Q_1(t) \eta(t) dt \\ & = \frac{h}{2} \varepsilon \left(S_{01}^{1/2} + T_0^T B(t_{1/2})^T \nabla_q^2 U(B(t_{1/2}) T_0 q_0^1, t_{1/2}) T_1(t_{1/2}) \right) \mathcal{Q}_1^+ \eta^0 \\ & \quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3/\delta^3). \end{aligned}$$

Für das Integral $\int_{t_0}^{t_0+h} \varepsilon L_{10}(t)^T Q_1(t) \eta(t) dt$ aus dem Verfahrensteil für q_0 erhalten wir mit der gleichen Technik

$$\int_{t_0}^{t_0+h/2} \varepsilon L_{10}(t)^T Q_1(t) \eta(t) dt = \frac{h}{2} \varepsilon L_{10}^{1/2} \mathcal{Q}_1^- \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta),$$

bzw.

$$\int_{t_0+h/2}^{t_0+h} \varepsilon L_{10}(t)^T Q_1(t) \eta(t) dt = \frac{h}{2} \varepsilon L_{10}^{1/2} \mathcal{Q}_1^+ \eta^0 + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3/\delta^2).$$

Damit können wir den ersten Schritt in den langsamen Variablen p_0 und q_0 folgendermaßen darstellen:

$$\begin{aligned} p_0^1 &= p_0^0 - h f_1 \left(p_0^{1/2}, \frac{q_0^0 + q_0^1}{2}, t_{1/2} \right) - \varepsilon \int_{t_0}^{t_1} g_1(t) dt \\ & \quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3/\delta^3) \\ q_0^1 &= q_0^0 + h f_2 \left(p_0^{1/2}, \frac{q_0^0 + q_0^1}{2}, t_{1/2} \right) + \varepsilon \int_{t_0}^{t_1} g_2(t) dt \\ & \quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3/\delta^2) \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} f_1 \left(p_0^{1/2}, \frac{q_0^0 + q_0^1}{2}, t_{1/2} \right) &= L_{00}^{1/2} p_0^{1/2} + S_{00}^{1/2} \frac{q_0^0 + q_0^1}{2} \\ & \quad + T_0^T B(t_{1/2})^T \nabla_q U \left(B(t_{1/2}) T_0 \frac{q_0^0 + q_0^1}{2}, t_{1/2} \right) \end{aligned}$$

und

$$g_1(t) = \left(S_{01}(t) + T_0^T B(t)^T \nabla_q^2 U(B(t)T_0 q_0(t), t) T_1(t) \right) Q_1(t) \eta(t),$$

sowie

$$f_2 \left(p_0^{1/2}, \frac{q_0^0 + q_0^1}{2}, t_{1/2} \right) = M_0(t_{1/2})^{-1} p_0^{1/2} + L_{00}^T \frac{q_0^0 + q_0^1}{2} \quad \text{und}$$

$$g_2(t) = L_{10}(t)^T Q_1(t) \eta(t).$$

Weiter gilt

$$\dot{p}_0 = -f_1(p_0(t), q_0(t), t) - \varepsilon g_1(t) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (\text{Modellfehler}),$$

$$\dot{q}_0 = f_2(p_0(t), q_0(t), t) + \varepsilon g_2(t),$$

sowie die Abschätzungen

$$f_1, f_2, g_2 = \mathcal{O}(1), \quad \dot{f}_1, \dot{f}_2, \dot{g}_2 = \mathcal{O}(1/\delta), \quad g_1 = \mathcal{O}(1/\delta), \quad \dot{g}_1 = \mathcal{O}(1/\delta^2),$$

die für jede weitere Zeitableitung um $\mathcal{O}(\delta^{-1})$ wachsen.

(b) Wir betrachten die modifizierte Mittelpunktsregel

$$y_1 = y_0 + hf \left(\frac{y_0 + y_1}{2} \right) + \int_{t_0}^{t_1} g(t) dt$$

angewandt auf die Differentialgleichung $\dot{y} = f(y) + g(t)$ mit einer ausreichend glatten Funktion $f(y)$ und $g(t) = \mathcal{O}(1)$, $\dot{g}(t) = \mathcal{O}(1/\delta)$, $\ddot{g}(t) = \mathcal{O}(1/\delta^2)$ (vgl. Ex. 7 aus Kapitel XIV,[8]). Wir zeigen für den lokalen Fehler

$$y_1 - y(t_1) = \mathcal{O}(h^3/\delta^2).$$

Dazu vergleichen wir die Taylorentwicklungen

$$\begin{aligned} y(t_1) &= y(t_0) + h\dot{y}(t_0) + \frac{h^2}{2}\ddot{y}(t_0) + \mathcal{O}(h^3\ddot{y}) \\ &= y_0 + hf(y_0) + hg(t_0) + \frac{h^2}{2}f'(y_0)f(y_0) + \frac{h^2}{2}f'(y_0)g(t_0) + \frac{h^2}{2}\dot{g}(t_0) + \mathcal{O}(h^3\ddot{y}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(y_0) + \frac{h^2}{2}f'(y_0)f(y_0) + \frac{h}{2}f'(y_0) \int_{t_0}^{t_1} g(t) dt + \int_{t_0}^{t_1} g(t) dt + \mathcal{O}(h^3g) \\ &= y_0 + hf(y_0) + \frac{h^2}{2}f'(y_0)f(y_0) + \frac{h^2}{2}f'(y_0)g(t_0) + \frac{h^3}{4}f'(y_0)\dot{g}(t_0) \\ &\quad + hg(t_0) + \frac{h^2}{2}\dot{g}(t_0) + \mathcal{O}(h^3\ddot{y}). \end{aligned}$$

Es folgt

$$y_1 - y(t_1) = \mathcal{O}(h^3 \ddot{g}) + \mathcal{O}(h^3 f' \dot{g}) = \mathcal{O}(h^3 / \delta^2)$$

in obigem Fall.

(c) Fügen wir (a) und (b) zusammen, so erhalten wir für den lokalen Fehler in p_0 und q_0

$$\|p_0^1 - p_0(t_1)\| = \mathcal{O}(h^3 / \delta^3) + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h / \delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2 / \delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3 / \delta^3) \quad (2.60)$$

$$\|q_0^1 - q_0(t_1)\| = \mathcal{O}(h^3 / \delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon^2 h / \delta) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2 / \delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^3 / \delta^2). \quad (2.61)$$

Unter der Voraussetzung $\varepsilon < h$ können wir den lokalen Fehler in den langsamen Komponenten auf den h^3 -Term verkürzen und haben die Abschätzung für die langsamen Komponenten gezeigt.

5. Schritt: Der Fehler in η

Der lokale Fehler in η ist gegeben durch die Differenz

$$\begin{aligned} \eta(t_0 + h) - \eta^1 &= \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) \bullet W_N(t_{1/2} + \theta h/2) \right. \\ &\quad \left. + W_D(t_{1/2} + \theta h/2) \right) \eta(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta \\ &\quad - \frac{h}{2} \left(E(\Phi^{1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{1/2}) \bullet \tilde{W}_N^{1/2} + \tilde{W}_D^{1/2} \right) (\eta^1 + \eta^0) \quad (2.62) \\ &\quad - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 r(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta \\ &\quad + h \mathcal{P}_1^*(t_{1/2}) \left(L_{10} p_0^{1/2} + S_{10} q_0^{1/2} + T_1^T B^T \nabla_q U^{1/2} \right). \quad (2.63) \end{aligned}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} r(s) &= P_1(s)^* \left(L_{10}(s) p_0(s) + S_{10}(s) q_0(s) \right. \\ &\quad \left. + T_1(s)^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0(s) + \varepsilon B T_1(s) Q_1(s) \eta(s), s) \right). \end{aligned}$$

Wir spalten diese Differenz zunächst auf in die Differenz der ersten beiden Terme (2.62) und die Differenz der letzten beiden Terme (2.63).

(a) Wir untersuchen zunächst (2.62).

Auch hier fügen wir Zwischenterme ein, so dass leichter abschätzbare Differenzen entstehen. Der erste Zwischenterm entsteht aus dem exakten Integral für $\eta(t_0 + h)$, indem wir $W(t_{1/2} + \theta h/2)$ durch $W^{1/2}$ ersetzen und $\eta(t_{1/2} + \theta h/2)$ durch $\frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0)$.

Aus

$$W(t_{1/2} + \theta h/2) = W^{1/2} + \theta \frac{h}{2} \dot{W}(t_{1/2}) = W^{1/2} + \mathcal{O}(h/\delta^2)$$

und

$$\eta(t_{1/2} + \theta h/2) = \eta(t_{1/2}) + \frac{h}{2} \int_0^\theta \dot{\eta}(t_{1/2} + \sigma h/2) d\sigma = \frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0) + \mathcal{O}(h/\delta)$$

folgt mit $\int_{-1}^1 E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) d\theta = \mathcal{O}(\varepsilon/h\delta)$ direkt

$$\begin{aligned} & \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) \bullet W_N(t_{1/2} + \theta h/2) \right. \\ & \quad \left. + W_D(t_{1/2} + \theta h/2) \right) \eta(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta \\ & - \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) \bullet W_N^{1/2} + W_D^{1/2} \right) \frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0) d\theta = \mathcal{O}(\varepsilon h/\delta^3). \end{aligned}$$

Im zweiten Zwischenschritt ersetzen wir die Phase $\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)$ durch die lineare Approximation $\Phi(t_{1/2}) + \theta h/2 \Lambda(t_{1/2})$. Den dabei entstehenden Fehler haben wir bereits im 3. Schritt dieses Beweises untersucht und verwenden dieses Ergebnis hier:

$$\begin{aligned} & \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \left(\left(E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) - E(\Phi(t_{1/2})) \bullet E(\theta h/2 \Lambda(t_{1/2})) \right) \bullet W_N^{1/2} + W_D^{1/2} \right) \\ & \quad \frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0) d\theta = \mathcal{O}(h^2/\delta^2). \end{aligned}$$

Der letzte Fehler von (2.62) entsteht durch die Verwendung der Trapez- bzw. Simpsonregel bei der Berechnung des Integrals $\Phi(t_{1/2})$. Hierfür gilt

$$\Phi(t_{1/2}) - \Phi^{1/2} = \mathcal{O}(h^2),$$

und die durch \mathcal{O} symbolisierten Konstanten hängen dabei weder von ε noch von δ , sondern ausschließlich von der Ableitung $\dot{\Lambda}$ ab, die unabhängig von δ beschränkt ist.

Wir erhalten

$$\frac{h}{2} \left((E(\Phi(t_{1/2})) - E(\Phi^{1/2})) \bullet \mathcal{I}(t_{1/2}) \bullet W_N^{1/2} + W_D^{1/2} \right) (\eta^1 + \eta^0) = \mathcal{O}(h^2/\delta^2)$$

Die drei Teile zusammengenommen ergeben für die Differenz (2.62) mit W anstatt \tilde{W} eine Größenordnung von $\mathcal{O}(h^2/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h/\delta^3)$.

(b) Die zweite Differenz (2.63) wird ebenfalls durch Einfügen von Zwischentermen in handlichere Teile zerlegt. Dazu vergleichen wir zunächst

$$-\frac{h}{2} \int_{-1}^1 r(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 \tilde{r}(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta,$$

wobei $\tilde{r}(t_{1/2} + \theta h/2)$ durch (2.10) gegeben ist.

Diese Differenz entspricht dem Modellfehler, den wir im zweiten Schritt dieses Beweises bereits untersucht haben und durch $\mathcal{O}(\varepsilon^2 h)$ abschätzen können.

Der zweite Zwischenterm entsteht aus $\tilde{r}(t_{1/2} + \theta h/2)$, indem das Argument $t_{1/2} + \theta h/2$ von L_{10} , S_{10} , T_1 , B , p_0 , q_0 und U in $t_{1/2}$ eingefroren wird und $\eta(t_{1/2} + \theta h/2)$ durch $\frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0)$ ersetzt wird. Mit Hilfe der Abschätzungen $\dot{S}_{10} = \mathcal{O}(\delta^{-2})$, $\eta(t_{1/2} + \theta h/2) = \frac{1}{2}(\eta^1 + \eta^0) + \mathcal{O}(h/\delta)$ und $\int_{-1}^1 P_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2))^* d\theta = \mathcal{O}(\varepsilon/h)$ erhalten wir

$$\begin{aligned} & -\frac{h}{2} \int_{-1}^1 \tilde{r}(t_{1/2} + \theta h/2) d\theta \\ & + \frac{h}{2} \int_{-1}^1 P_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2))^* \left(L_{10}^{1/2} p_0(t_{1/2}) + S_{10}^{1/2} q_0(t_{1/2}) \right. \\ & \quad + T_1(t_{1/2})^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0(t_{1/2}), t_{1/2}) \\ & \quad + \varepsilon T_1(t_{1/2})^T B^T \nabla_q^2 U(B T_0 q_0(t_{1/2}), t_{1/2}) B T_1(t_{1/2}) Q_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) \\ & \quad \left. \frac{1}{2} (\eta^1 + \eta^0) \right) d\theta \\ & = \mathcal{O}(\varepsilon h/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta). \end{aligned}$$

Als nächstes untersuchen wir den Fehler, der durch die Approximation von $p_0(t_{1/2})$ und $q_0(t_{1/2})$ mit dem symplektischen Euler-Verfahren entsteht. Im 4. Schritt dieses Beweises haben wir den Fehler zum Zeitpunkt t_1 betrachtet, der durch die Anwendung des symplektischen Euler und des adjungierten symplektischen Euler-Verfahrens aufgetreten ist. Der Fehler nach einem halben Zeitschritt mit dem symplektischen Euler-Verfahren lässt sich genauso analysieren und beträgt

$$p_0^{1/2} - p_0(t_{1/2}) = \mathcal{O}(h^2/\delta), \quad \text{bzw.} \quad q_0^{1/2} - q_0(t_{1/2}) = \mathcal{O}(h^2/\delta).$$

Diese Fehlerterme stehen unter obigem Integral mit Vorfaktor h und werden daher noch einmal mit ε multipliziert. So entstehen durch das symplektische Euler-Verfahren keine größeren Fehler als die bisher entstandenen und sie werden in den

bisherigen Differenzen subsummiert.

Das Potential U bzw. seine Gradienten werden in unserem Verfahren entweder exakt übergeben oder durch die jeweiligen Differenzenquotienten ersetzt. Da U als ausreichend glatt (C^3) vorausgesetzt worden war, lässt sich der dabei entstehende Fehler als $\mathcal{O}(\varepsilon h)$ angeben.

Den letzten Schritt bildet die Untersuchung des durch die lineare Phasenapproximation und Annäherung des Integrals $\Phi(t_{1/2})$ entstandenen Fehlers in P_1 und Q_1 :

$$\begin{aligned} & -\frac{h}{2} \left(\int_{-1}^1 P_1(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) d\theta - 2\mathcal{P}_1(t_{1/2}) \right)^* \\ & \quad \left(L_{10}^{1/2} p_0^{1/2} + S_{10}^{1/2} q_0^{1/2} + T_1(t_{1/2})^T B^T \nabla_q U^{1/2} \right) \\ & + \frac{h}{2} \left(\int_{-1}^1 E(\Phi(t_{1/2} + \theta h/2)) d\theta - E(\Phi^{1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{1/2}) \right) \bullet \left(\tilde{W}_N^{1/2} - W_N^{1/2} \right) (\eta^1 + \eta^0). \end{aligned}$$

Auch hier können wir wieder auf unsere geleisteten Vorarbeiten zurückgreifen und erhalten für den ersten Term eine Größenordnung von $\mathcal{O}(h^2/\delta)$. Im zweiten Term verwenden wir $\tilde{W}_N^{1/2} - W_N^{1/2} = \mathcal{O}(\varepsilon)$ und können ihn durch $\mathcal{O}(\varepsilon h^2/\delta)$ abschätzen. Der Fehler durch die verwendete Trapez- bzw. Simpsonregel subsummiert sich dabei.

(c) Fassen wir (a) und (b) zusammen und verwenden $\varepsilon < h$, so erhalten wir für den lokalen Fehler in η folgende Abschätzung

$$\|\eta^1 - \eta(t_1)\| = \mathcal{O}(h^2/\delta^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h/\delta^3) = \mathcal{O}(h^2/\delta^3) \quad (2.64)$$

und Satz 2 ist bewiesen. \square

2.7.2 Fehlerakkumulation: Beweis von Theorem 2

Eine wichtige Voraussetzung für die Untersuchung der Stabilität eines Verfahrens ist eine Aussage über dessen Lipschitzstetigkeit. Wir untersuchen unser Verfahren also zunächst auf diese Eigenschaft, wobei wir die Notation weiter verkürzen.

Es sei

$$y^n = \left(p_0^{nT}, q_0^{nT}, h\eta^{nT} \right) \quad \text{und} \quad F_h : y^n \rightarrow y^{n+1}$$

unser erstes Verfahren.

Es gilt $F_h = F_h^3 \circ F_h^2 \circ F_h^1$ mit

$$\begin{aligned} F_h^1 &: \left(p_0^{n^T}, q_0^{n^T}, h\eta^{n^T} \right) \rightarrow \left(p_0^{n+1/2^T}, q_0^{n+1/2^T}, h\eta^{n^T} \right), \\ F_h^2 &: \left(p_0^{n+1/2^T}, q_0^{n+1/2^T}, h\eta^{n^T} \right) \rightarrow \left(p_0^{n+1/2^T}, q_0^{n+1/2^T}, h\eta^{n+1^T} \right) \\ F_h^3 &: \left(p_0^{n+1/2^T}, q_0^{n+1/2^T}, h\eta^{n+1^T} \right) \rightarrow \left(p_0^{n+1^T}, q_0^{n+1^T}, h\eta^{n+1^T} \right). \end{aligned}$$

Wir zeigen nun, dass F_h^1 , F_h^2 und F_h^3 Lipschitzstetig sind mit Konstanten $(1 + hL_1)$, $(1 + hL_2)$ und $(1 + hL_3)$; damit ist dann auch F_h als Verkettung dieser Verfahren Lipschitzstetig mit Konstante $1 + hL$, $L = L_1 + L_2 + L_3 + \mathcal{O}(h)$.

Für F_h^1 gilt mit zwei Variablen y^n und \tilde{y}^n

$$\begin{aligned} \left(I + \frac{h}{2} L_{00} \right) \left(p_0^{n+1/2} - \tilde{p}_0^{n+1/2} \right) &= p_0^n - \tilde{p}_0^n - \frac{h}{2} S_{00} (q_0 - \tilde{q}_0^n) \\ &\quad - \frac{h}{2} T_0^T B^T \left(\nabla_q U(BT_0 q_0^n, t_{n+1/2}) - \nabla_q U(BT_0 \tilde{q}_0^n, t_{n+1/2}) \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(\varepsilon^2/h) (q_0^n - \tilde{q}_0^n) + \mathcal{O}(\varepsilon^2/h) (h\eta^n - h\tilde{\eta}^n), \\ q_0^{n+1/2} - \tilde{q}_0^{n+1/2} &= \left(I + \frac{h}{2} L_{00}^T \right) (q_0^n - \tilde{q}_0^n) + \frac{h}{2} M_0^{-1} \left(p_0^{n+1/2} - \tilde{p}_0^{n+1/2} \right) \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{2} L_{10}^T \mathcal{Q}_1^- (h\eta^n - h\tilde{\eta}^n), \\ h\eta^n - h\tilde{\eta}^n &= h\eta^n - h\tilde{\eta}^n. \end{aligned}$$

Mit $\varepsilon < h$ schließen wir

$$\|F_h^1(y^n) - F_h^1(\tilde{y}^n)\| \leq (1 + hL_1) \|y^n - \tilde{y}^n\|.$$

Für F_h^2 müssen wir unser Augenmerk ausschließlich auf η richten und erhalten

$$\begin{aligned} &\left(I - \frac{h}{2} \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{n+1/2}) \bullet \tilde{W}_N^{n+1/2} + \tilde{W}_D^{n+1/2} \right) \right) (h\eta^{n+1} - h\tilde{\eta}^{n+1}) \\ &= \left(I + \frac{h}{2} \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \mathcal{I}(t_{n+1/2}) \bullet \tilde{W}_N^{n+1/2} + \tilde{W}_D^{n+1/2} \right) \right) (h\eta^n - h\tilde{\eta}^n) \\ &\quad + \mathcal{O}(h^2) \left(p_0^{n+1/2} - \tilde{p}_0^{n+1/2} + q_0^{n+1/2} - \tilde{q}_0^{n+1/2} \right), \end{aligned}$$

also

$$\|F_h^2(y^n) - F_h^2(\tilde{y}^n)\| \leq (1 + hL_2) \|y^n - \tilde{y}^n\|.$$

Analog zu F_h^1 verläuft die Abschätzung von F_h^3 , so dass wir die Formeln hier im Einzelnen nicht ausführen. Insgesamt erhalten wir

$$\|F_h(y^n) - F_h(\tilde{y}^n)\| \leq (1 + hL) \|y^n - \tilde{y}^n\|. \quad (2.65)$$

Sei nun $F_k^n(y) = \left(p_0^{n^T}, q_0^{n^T}, h\eta^{n^T} \right)$ die Approximation nach $(n - k)$ Schritten des Verfahrens, welches bei dem exakten Wert $y(t_k)$ gestartet ist ($n \geq k \geq 1$). Es gilt $F_k^n(y) = F_j^n(F_k^j(y))$, $F_n^n(y) = y$ und damit für den globalen Fehler des Verfahrens:

$$\begin{aligned} y^n - y(t_n) &= F_0^n(y(t_0)) - F_n^n(y(t_n)) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} (F_k^n(y(t_k)) - F_{k+1}^n(y(t_{k+1}))) \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \left(F_{k+1}^n (F_k^{k+1}(y(t_k))) - F_{k+1}^n(y(t_{k+1})) \right). \end{aligned}$$

Mit $F_{k+1}^n = \underbrace{F_h \circ F_h \circ \dots \circ F_h}_{n-(k+1)}$ und der Lipschitzstetigkeit von F_h aus (2.65) erhalten wir

$$\|F_{k+1}^n (F_k^{k+1}(y(t_k))) - F_{k+1}^n(y(t_{k+1}))\| \leq (1 + hL)^{n-(k+1)} \|F_k^{k+1}(y(t_k)) - y(t_{k+1})\|.$$

Dabei entspricht $\|F_k^{k+1}(y(t_k)) - y(t_{k+1})\|$ dem lokalen Fehler, den wir in Satz 2 bereits abgeschätzt haben. Wir setzen die entsprechenden Abschätzungen hier ein, wobei wir den nur lokal wirksamen Parameter δ vernachlässigen und betrachten zunächst die langsamen Koordinaten p_0 und q_0 :

$$\begin{aligned} \left\| \begin{pmatrix} p_0^n \\ q_0^n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} p_0(t_n) \\ q_0(t_n) \end{pmatrix} \right\| &\leq C \sum_{k=0}^{n-1} (1 + hL)^{n-(k+1)} h^3 = C h^3 \sum_{k=0}^{n-1} (1 + hL)^k \\ &= C h^3 \frac{(1 + hL)^n - 1}{hL} \leq C h^2 \frac{e^{(t_{end}-t_0)L} - 1}{L}. \end{aligned}$$

Wir haben dabei $\varepsilon < h$ verwendet und die Tatsache, dass die im lokalen Fehler mit \mathcal{O} bezeichneten Konstanten nicht weiter von ε abhängen. So verbergen sich auch keine Faktoren $1/\varepsilon$ in unserer neuen Konstanten C und wir erhalten zunächst für die transformierten Variablen p_0 und q_0 einen globalen Fehler der Größenordnung h^2 .

Analog zeigen wir

$$\|h\eta^n - h\eta(t_n)\| \leq C h^2$$

bzw.

$$\|\eta^n - \eta(t_n)\| \leq C h.$$

Die Rücktransformation in die Variablen von (1.6) beschert uns für die schnellen Positionen q_1^n den Gewinn einer Potenz von ε gegenüber η , während die schnellen Momente p_1^n bei einem Fehler der Größenordnung h verbleiben. Bei den langsamen Variablen ergeben sich durch die Rücktransformation keine Veränderungen und die Abschätzungen von Theorem 2 sind bewiesen. \square

2.8 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 3 & 4 (Splitting-Verfahren)

Um den globalen Fehler des Impuls-Verfahrens abschätzen zu können, müssen wir zunächst eine Aussage über das Verhalten von η^n machen. Wir widmen uns also nun dem ersten diskreten Adiabatensatz (vgl. [8], Kap. XIV).

2.8.1 Beweis von Satz 3

Auch dieser Beweis verläuft über einen Zwischenschritt. Dazu führen wir \tilde{p}_0^n , \tilde{q}_0^n und $\tilde{\eta}^n$ ein als diejenigen Variablen, die entstehen, wenn wir mit dem exakten Fluss des Systems von H^1 aus (2.29) vorgehen und nicht mit der Approximation, die durch die Verwendung des 1. Verfahrens dort entstanden ist. Im zweiten Subsystem verwenden wir ohnedies den exakten Fluss als Verfahren.

Den Fehler zwischen der Approximation des 1. Verfahrens und dem Fluss des ersten Subsystem haben wir bereits in Kapitel 2.7 abgeschätzt und können das Ergebnis von Theorem 2 hier für die Differenz $\eta^n - \tilde{\eta}^n$ verwenden. Dabei müssen Modellfehler nicht betrachtet werden, da für unser gesplittetes System kein solcher entsteht.

Wir halten zunächst fest, dass $\tilde{\eta}^n = \eta_h(t_n)$ gilt, wobei $\eta_h(t_n)$ die Differentialgleichung

$$\dot{\eta}_h = \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) W \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) \eta_h + r + \sum_{j=0}^n \Delta\eta^j \delta_j$$

erfüllt mit $W(t)$ aus (1.31) und

$$r(t) = -P_1(t)^* \left(L_{10}(t) p_0^h(t) + S_{10}(t) q_0^h(t) \right).$$

Wir schreiben dabei $p_0^h(t)$ und $q_0^h(t)$ für die stückweise konstanten Funktionen, die die jeweiligen Werte der numerischen Lösung annehmen.

Weiter gilt

$$\Delta\eta^j = -hP_1(t_j)^*T_1(t_j)^T B(t_j)^T \nabla_q U (B(t_j)T_0q_0^j + \varepsilon B(t_j)T_1(t_j)Q_1(t_j)\eta^j, t_j),$$

$\Delta\eta^j$ entspricht also dem Ausdruck auf der rechten Seite von (2.33) und δ_j ist der in t_j lokalisierte Dirac-Impuls.

Aus

$$\tilde{\eta}^n - \tilde{\eta}^0 = \int_{t_0}^{t_n} \dot{\eta}_h(s) ds \quad \text{und} \quad \eta^n - \eta^0 = \int_{t_0}^{t_n} \dot{\eta}_h(s) ds + \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\varepsilon)$$

folgt direkt

$$\eta^n - \tilde{\eta}^n = \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (2.66)$$

und es bleibt die Differenz $\tilde{\eta}^n - \tilde{\eta}^0$ zu untersuchen.

Mit

$$\int_{t_j-h/2}^{t_j+h/2} \delta_j(s) ds = 1 \quad \text{und} \quad \int_{t_j}^{t_j+h/2} \delta_j(s) ds = \int_{t_j-h/2}^{t_j} \delta_j(s) ds = \frac{1}{2}$$

schreiben wir für $t_n = nh$,

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}^n - \tilde{\eta}^0 &= \eta_h(t_n) - \eta_h(t_0) \\ &= \int_{t_0}^{t_n} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi(s)\right) W(s) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi(s)\right) \eta_h(s) ds + \int_{t_0}^{t_n} r(s) ds + \sigma_n. \end{aligned}$$

Diese Integrale haben wir aber bereits untersucht und wir erhalten durch partielle Integration analog zum kontinuierlichen Adiabatensatz (1.35)

$$\int_{t_0}^{t_n} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi(s)\right) W(s) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi(s)\right) \eta_h(s) ds = \mathcal{O}(\varepsilon),$$

sowie die gleiche Abschätzung für $\int_{t_0}^{t_n} r(s) ds$.

Mit $ch \leq \|\sigma_n\| \leq C$ und $\varepsilon < h$ wäre die erste Abschätzung (2.42) gezeigt; die Untersuchung von σ_n bedarf allerdings noch etwas Arbeit.

Wir verwenden dafür die Technik der partiellen Summation, ein diskretes Analogon zur partiellen Integration. Durch Induktion lässt sich zeigen, dass für eine Summe von Produkten gilt

$$\sum_{k=0}^m x_k y_k = \left(\sum_{j=0}^m x_j \right) y_m - \sum_{k=0}^{m-1} \left(\sum_{j=0}^k x_j \right) (y_{k+1} - y_k). \quad (2.67)$$

Wenden wir diese Formel nun an auf die Summe σ_n mit $x_j = P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T$ und $y_j = \nabla_q U (B(t_j) T_0 q_0^j + \varepsilon B(t_j) T_1(t_j) Q_1(t_j) \eta^j, t_j)$, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\sigma_n\| &\leq Ch \left\| \sum_{j=0}^n P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T \right\| \\ &\quad + h \sum_{k=1}^{n-1} \left\| \sum_{j=0}^k P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T \right\| \cdot \|y_{k+1} - y_k\| \\ &\leq Ch \left\| \sum_{j=0}^n P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T \right\|. \end{aligned}$$

Dabei haben wir die weitere stetige Differenzierbarkeit des Potentials U ausgenutzt, mit der $\|y_{k+1} - y_k\| \leq Ch$ gilt, sowie die Tatsache, dass wir nur beschränkte Zeiten $nh < \text{Const.}$ betrachten.

Mit dieser Technik schreiten wir sukzessive fort (unser nächstes x_j ist $P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T$, $y_j = B(t_j)^T$), wobei wir die stetige Differenzierbarkeit von $B(t)$ und $T_1(t)$ verwenden:

$$\begin{aligned} \|\sigma_n\| &\leq Ch \left\| \sum_{j=0}^n P_1(t_j)^* T_1(t_j)^T \right\| \\ &\leq Ch \left\| \sum_{j=0}^n P_1(t_j)^* \right\| \\ &\leq C\kappa. \end{aligned}$$

□

2.8.2 Beweis von Theorem 3

Der Fehler der Größenordnung $\mathcal{O}(\kappa)$ in $\eta^n - \eta^0$ impliziert sofort einen gleich großen globalen Fehler $\eta^n - \eta(t_n)$ mittels

$$\eta^n - \eta(t_n) = \eta^n - \eta^0 + \eta^0 - \eta(t_n) = \mathcal{O}(\kappa) + \mathcal{O}(\varepsilon),$$

und ebenso einen Fehler von $\mathcal{O}(\kappa)$ in den schnellen Impulsen p_1^n . Durch die Rücktransformation gewinnen wir in den schnellen Positionen einen Faktor ε und erhalten damit die Abschätzungen für p_1^n und q_1^n .

Für die langsamen Variablen p_0 und q_0 verwenden wir folgendes Lemma:

Lemma 7 *Es sei $\Phi_h(y) = y + hF_h(y)$ ein Einschrittverfahren, wobei F_h Lipschitzstetig ist mit Lipschitzkonstante L . Wir vergleichen das Verfahren mit einer gestörten Version,*

$$y_{n+1} = \Phi_h(y_n) \quad \text{und} \quad \tilde{y}_{n+1} = \Phi_h(\tilde{y}_n) + d_n,$$

wobei beide Verfahren von den gleichen Startwerten $y_0 = \tilde{y}_0$ ausgehen. Die Differenz nach n Schritten ist dann beschränkt durch

$$\|\tilde{y}_n - y_n\| \leq e^{nhL} \cdot \max_{0 \leq k \leq n-1} \left\| \sum_{j=0}^k d_j \right\|.$$

Beweis: Es gilt

$$\tilde{y}_n - y_n = h \sum_{j=0}^{n-1} (F_h(\tilde{y}_j) - F_h(y_j)) + \sum_{j=0}^{n-1} d_j,$$

also

$$\|\tilde{y}_n - y_n\| \leq Lh \sum_{j=0}^{n-1} \|\tilde{y}_j - y_j\| + \alpha$$

mit $\alpha = \max_{0 \leq k \leq n-1} \left\| \sum_{j=0}^k d_j \right\|$.

Die Aussage dieses Lemmas folgt dann durch Anwendung des diskreten Gronwall-Lemmas. □

Ignorieren wir bei unserem Splitting-Verfahren nun alle Terme, die ε enthalten und verfolgen nur den Weg der langsamen Variablen, so erhalten wir

$$\begin{aligned} p_0^{n+1/2} &= p_0^n - \frac{h}{2} \left(L_{00}^{n+1/2} p_0^{n+1/2} + S_{00}^{n+1/2} q_0^n + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^n, t_n) \right) \\ q_0^{n+1/2} &= q_0^n + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^{n+1/2 T} q_0^n \right) \\ p_0^{n+1} &= p_0^{n+1/2} - \frac{h}{2} \left(L_{00}^{n+1/2} p_0^{n+1/2} + S_{00}^{n+1/2} q_0^{n+1} + T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0^{n+1}, t_{n+1}) \right) \\ q_0^{n+1} &= q_0^{n+1/2} + \frac{h}{2} \left(M_0^{-1} p_0^{n+1/2} + L_{00}^{n+1/2 T} q_0^{n+1} \right) \end{aligned}$$

und bezeichnen diese Approximation mit $Y^{n+1} := \begin{pmatrix} p_0^{n+1} \\ q_0^{n+1} \end{pmatrix}$.

Dieses Verfahren ist eine Variante des Störmer-Verlet-Verfahrens, angewandt auf

$$\dot{p}_0 = -L_{00} p_0 - S_{00} q_0 - T_0^T B^T \nabla_q U(B T_0 q_0, t) \quad (2.68)$$

$$\dot{q}_0 = M_0^{-1} p_0 + L_{00} q_0. \quad (2.69)$$

Es sei $Y(t_n) := \begin{pmatrix} p_0(t_n) \\ q_0(t_n) \end{pmatrix}$ die exakte Lösung dieses Systems und $y_n := \begin{pmatrix} p_0^n \\ q_0^n \end{pmatrix}$ die numerische Annäherung an die langsamen Variablen, die durch das Impuls-Verfahren gegeben ist. Wir können den globalen Fehler in den langsamen Variablen nun wie folgt aufteilen

$$\|y_n - y(t_n)\| \leq \|y_n - Y_n\| + \|Y_n - Y(t_n)\| + \|Y(t_n) - y(t_n)\|$$

und untersuchen die einzelnen Differenzen.

Das Impuls-Verfahren y_n entspricht dabei einer Störung des Störmer-Verlet-Verfahrens Y_n , angewandt auf (2.68) und 2.69), mit

$$d_n = h\varepsilon \begin{pmatrix} -\left(T_0^T B(t_n)^T \nabla_q^2 U(B(t_n)T_0 q_0^n, t_n) B(t_n)T_1(t_n)Q_1(t_n) + S_{01}^{n+1/2} Q_1(t_n)\right) \eta^n \\ L_{10}^T Q_1(t_n) \eta^n \end{pmatrix} + \mathcal{O}(h^2\varepsilon).$$

Mit obigem Lemma und partieller Summation schließen wir daraus

$$\|y_n - Y_n\| \leq e^{nhL} \cdot \max_{0 \leq k \leq n-1} \left\| \sum_{j=0}^k d_j \right\| \leq C e^{nhL} \cdot \varepsilon \kappa.$$

Dabei werden wieder die oszillatorischen Matrizen $Q_1(t_j)$ aufsummiert und von den glatt differenzierbaren Matrizen S_{01} , L_{10}^T , T_1 , B usw. sukzessive die Differenzen gebildet.

Die zweite Differenz $\|Y_n - Y(t_n)\|$ entspricht dem globalen Fehler des Störmer-Verlet-Verfahrens. Mit den Schranken an die zweite Ableitung von p_0 bzw. q_0 hat dieser Fehler die Größenordnung $\mathcal{O}(h^2)$ und wir haben als letztes die Differenz $\|Y(t_n) - y(t_n)\|$ zu untersuchen. Diese Differenz ist von der Form

$$Y(t_n) - y(t_n) = \varepsilon \int_{t_0}^{t_n} X(s) Q_1(s) \eta(s) ds,$$

wobei $X(s)$ eine stetig differenzierbare und im adiabatischen Fall beschränkte Matrixfunktion ist ($X(s)$ ist zum Beispiel $-S_{01}(s)$, $L_{10}^T(s)$ oder der Gradient zweiter Ordnung von U). Auch die Ableitung von $X(s)$ ist beschränkt.

Mittels partieller Integration wie oben gewinnen wir eine Potenz von ε und erhalten

$$\|Y(t_n) - y(t_n)\| \leq C\varepsilon^2.$$

Zusammengesetzt ergibt sich

$$\|y_n - y(t_n)\| = \mathcal{O}(h^2) + \mathcal{O}(\varepsilon\kappa)$$

und die Aussage des Theorems ist bewiesen. \square

2.8.3 Beweis von Satz 4

Für die verbesserte Aussage des zweiten diskreten Adiabatensatzes greifen wir auf den Beweis des ersten zurück. In Abschnitt 2.8.1 haben wir zunächst den exakten Fluss für das erste Subsystem (2.29) eingefügt und dann die Bewegung des Flusses in η abgeschätzt.

Wir können den Beweis hier zunächst ganz analog führen, wozu wir nur die oszillatorischen Matrizen $P_1(t_j)$ und $Q_1(t_j)$ durch die gemittelten Werte $\mathcal{P}_1(t_j)$ und $\mathcal{Q}_1(t_j)$ ersetzen müssen.

Dadurch erhalten wir die Abschätzungen (2.42) und (2.43), jeweils mit $\mathcal{P}_1(t_j)$ und $\mathcal{Q}_1(t_j)$. Mittels sukzessiver partieller Summation schließen wir zunächst

$$\begin{aligned} \|\sigma_n\| &\leq h \left\| \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T \nabla_q U (B(t_j) T_0 q_0^j + B(t_j) T_1(t_j) \mathcal{Q}_1(t_j) \eta^j, t_j) \right\| \\ &\leq Ch \left\| \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_1(t_j)^* T_1(t_j)^T B(t_j)^T \right\| \\ &\leq Ch \left\| \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_1(t_j)^* T_1(t_j)^T \right\| \\ &\leq Ch \left\| \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_1(t_j) \right\|. \end{aligned}$$

Nun gilt $\mathcal{P}_1(t_j) = \frac{1}{2h} \int_{t_j-h}^{t_j+h} P_1(s) ds + \mathcal{O}(h)$, also für $t_n = nh \leq \text{Const.}$

$$\left\| h \sum_{j=1}^n \mathcal{P}_1(t_j) \right\| = \left\| \int_{t_0}^{t_n} P_1(s) ds \right\| + \mathcal{O}(h) = \mathcal{O}(\varepsilon) + \mathcal{O}(h).$$

Anstatt von $\|\sigma_n\| \leq C\kappa$ erhalten wir also eine Abschätzung $\|\sigma_n\| \leq Ch + C\varepsilon$ und damit

$$\eta^n = \eta^0 + \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

\square

2.8.4 Beweis von Theorem 4

Analog zum Beweis von Theorem 3 erhalten wir aus $\eta^n = \eta^0 + \mathcal{O}(h) + \mathcal{O}(\varepsilon)$ die Abschätzung $\eta^n - \eta(t_n) = \mathcal{O}(h)$ bzw. nach Rücktransformation und Reskalierung $p_1^n - p_1(t_n) = \mathcal{O}(h)$ und $q_1^n - q_1(t_n) = \mathcal{O}(\varepsilon h)$.

Für die langsamen Variablen gehen wir ebenfalls analog zum Beweis von Theorem 3 vor und erhalten wieder die gleichen Formeln, allerdings mit den Integralen \mathcal{P}_1 und \mathcal{Q}_1 anstatt der Punktauswertungen P_1 bzw. Q_1 . Wir benennen unsere numerische Lösung wieder mit y_n , die exakte Lösung mit $y(t_n)$, die exakte Lösung des Systems ohne ε -Terme (2.68) bzw. (2.69) mit $Y(t_n)$ und deren Approximation mittels Störmer-Verlet mit Y_n und erhalten

$$\|y_n - Y_n\| \leq e^{nhL} \cdot \max_{0 \leq k \leq n-1} \left\| \sum_{j=0}^k d_j \right\|$$

mit

$$d_j = \varepsilon h X(t_j) \mathcal{Q}_1(t_j) \eta^j,$$

wobei $X(t_j)$ wieder für eine stetig differenzierbare Matrix mit beschränkter Ableitung steht. Damit können wir partiell summieren und erhalten für $t_n = nh \leq \text{Const.}$

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq k \leq n-1} \left\| \sum_{j=0}^k d_j \right\| &\leq \max_{0 \leq k \leq n-1} C\varepsilon h \left\| \sum_{j=0}^k X(t_j) \mathcal{Q}_1(t_j) \right\| \leq \max_{0 \leq k \leq n-1} C\varepsilon h \left\| \sum_{j=0}^k \mathcal{Q}_1(t_j) \right\| \\ &\leq C\varepsilon \left\| \int_{t_0}^{t_n} \mathcal{Q}_1(s) ds \right\| + \mathcal{O}(\varepsilon h) = \mathcal{O}(\varepsilon^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h). \end{aligned}$$

Die Integration am Schluss beschert uns also einen zusätzlichen Faktor ε .

Der Fehler des Störmer-Verlet-Verfahrens bleibt bei $\mathcal{O}(h^2)$ und die Differenz zwischen den exakten Lösungen von ursprünglicher und vereinfachter Gleichung ist ebenfalls von gleicher Größenordnung wie zuvor.

Wir erhalten mit $\varepsilon < h$

$$\|y^n - y(t_n)\| = \mathcal{O}(\varepsilon^2) + \mathcal{O}(\varepsilon h) + \mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(h^2),$$

und haben den globalen Fehler für die langsamen Variablen gezeigt.

□

Kapitel 3

Adiabatische Integratoren II: quadratische Phasenapproximation

3.1 Die adiabatische Mittelpunktsregel

Unser Ziel ist hier die Entwicklung eines Verfahrens globaler zweiter Ordnung in allen Positionen und Impulsen. Dafür reicht eine lineare Approximation der Phase $\Phi(t)$ nicht mehr aus; auch mit dem Ersetzen von $W(t_{n+1/2} + \theta h/2)$ durch $W(t_{n+1/2})$ bzw. den entsprechend vorgenommenen Vereinfachungen in den Blöcken von S und L können wir die höhere Ordnung nicht erreichen. Die Ausdrücke müssen statt dessen ersetzt werden durch:

$$\begin{aligned}\Phi(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2) &\approx \Phi(t_{n+\frac{1}{2}}) + \theta h/2 \cdot \Lambda(t_{n+\frac{1}{2}}) + \theta^2 h^2/8 \cdot \dot{\Lambda}(t_{n+\frac{1}{2}}) \\ W(t_{n+\frac{1}{2}} + \theta h/2) &\approx W(t_{n+\frac{1}{2}}) + \theta h/2 \cdot \dot{W}(t_{n+\frac{1}{2}})\end{aligned}$$

und einer genaueren Approximation an S und L .

Dadurch verkomplizieren sich nicht nur die Ausdrücke in (2.6), auch $\Phi(t)$ als Argument von P_1 und Q_1 in (2.7) und die entsprechenden Ausdrücke in der langsamen Differentialgleichung müssen durch die genaueren Approximationen ersetzt werden. Wir legen im Folgenden Wert auf die Grundideen und Techniken, die insbesondere im Umgang mit den auftretenden Integralen über oszillatorische Exponentiale entwickelt wurden. In [22] beschränken wir uns deshalb mit unseren Ausführungen auf

den speziellen Fall von Differentialgleichungen zweiter Ordnung

$$\ddot{q} + \frac{1}{\varepsilon^2} A(t) q = 0 \quad (3.1)$$

mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix $A(t)$. Im Hamiltonschen Formalismus entspricht dies dem Fall $M(t) \equiv \text{Id.}$ und $U(q, t) = 0$. Wir gehen hier von einer etwas allgemeineren Situation aus, in der ausschließlich $U(q, t) = 0$ gesetzt wird, also

$$H(p, q, t) = \frac{1}{2} p^T M(t)^{-1} p + \frac{1}{2\varepsilon^2} q^T A(t) q \quad (3.2)$$

mit symmetrisch positiv definiten Matrizen $M(t)$ und $A(t)$.

Die Techniken lassen sich analog auf das ganz allgemeine Hamiltonsystem (1.2) anwenden, aus Gründen der Übersichtlichkeit werden wir die expliziten Formeln hier allerdings nur für den Spezialfall (3.2) ausführen.

In diesem Fall erhalten wir ausschließlich eine schnelle, transformierte Differentialgleichung

$$\dot{\eta}(t) = (E(\Phi(t)) \bullet W(t)) \eta(t), \quad (3.3)$$

mit einer Matrix $W(t) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} L - L^T & L + L^T \\ L + L^T & L - L^T \end{pmatrix}$, deren Diagonale Null ist.

$L(t)$ entsteht dabei aus den Transformationen

$$L(t) = -\Omega(t)^{1/2} \left(Q(t)^T \dot{C}(t)^T C(t)^{-T} Q(t) + \dot{Q}(t)^T Q(t) \right) \Omega(t)^{-1/2} - \frac{1}{2} \Omega(t)^{-1} \dot{\Omega}(t). \quad (3.4)$$

Die Übertragung des Formalismus auf eine Situation, in der $W(t)$ Nichtnullelemente auf der Diagonalen trägt, findet sich explizit in [22], wo auch die Behandlung inhomogener Differentialgleichungen dieses Typs erläutert wird.

Wir entwickeln nun ein Verfahren mit einem lokalen Fehler von $\mathcal{O}(h^3)$, dabei sei wie zuvor h eine Zeitschrittweite mit $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$ und eine Zeit $t_n = t_0 + nh$ fixiert.

Die Konstruktion geht von zwei Gleichungen aus, dafür integrieren wir (3.3) von t_{n-1} bis t_{n+1} und von t_n bis $t_n + \theta h$, und erhalten

$$\eta(t_{n+1}) = \eta(t_{n-1}) + h \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t_n + \theta h)) \bullet W(t_n + \theta h) \right) \eta(t_n + \theta h) d\theta \quad (3.5)$$

bzw.

$$\eta(t_n + \theta h) = \eta(t_n) + h \int_0^\theta \left(E(\Phi(t_n + \sigma h)) \bullet W(t_n + \sigma h) \right) \eta(t_n + \sigma h) d\sigma. \quad (3.6)$$

In dieser Situation ersetzen wir den Ausdruck $\eta(t_n + \theta h)$ in (3.5) durch die rechte Seite von (3.6) und den Zwischenwert $W(t_n + \theta h)$ durch die Taylorentwicklung

$$W(t_n + \theta h) = W(t_n) + \theta h \dot{W}(t_n) + \mathcal{O}(\theta^2 h^2). \quad (3.7)$$

Mit $\eta(t_n + \sigma h) = \eta(t_n) + \mathcal{O}(\sigma h)$ und $W(t_n + \sigma h) = W(t_n) + \mathcal{O}(\sigma h)$ in (3.6) erhalten wir

$$\eta(t_{n+1}) = \eta(t_{n-1}) + h\mathcal{A}(t_n)\eta(t_n) + h^2\mathcal{B}(t_n)\eta(t_n) + h^2\mathcal{C}(t_n)\eta(t_n) + \mathcal{O}(h^3)$$

mit den Matrizen

$$\mathcal{A}(t) = \int_{-1}^1 E(\Phi(t + \theta h)) d\theta \bullet W(t), \quad (3.8)$$

$$\mathcal{B}(t) = \int_{-1}^1 \theta E(\Phi(t + \theta h)) d\theta \bullet \dot{W}(t), \quad (3.9)$$

$$\mathcal{C}(t) = \int_{-1}^1 \left(E(\Phi(t + \theta h)) \bullet W(t) \right) \int_0^\theta E(\Phi(t + \sigma h)) \bullet W(t) d\sigma d\theta. \quad (3.10)$$

Dies sind die Grundgleichungen zur Konstruktion des numerischen Verfahrens, für welches wir nun ausreichend genaue Annäherungen an $\mathcal{A}(t_n)$, $\mathcal{B}(t_n)$ und $\mathcal{C}(t_n)$ benötigen. Dazu ersetzen wir zunächst $W(t_n)$ bzw. $L(t_n)$ durch W_n bzw. L_n , indem wir die entsprechenden symmetrischen Differenzenquotienten verwenden:

$$\begin{aligned} \dot{C}_n &= \frac{1}{2h}(C(t_{n+1}) - C(t_{n-1})), & \dot{Q}_n &= \frac{1}{2h}(Q(t_{n+1}) - Q(t_{n-1})) \text{ und} \\ \dot{\Omega}_n &= \frac{1}{2h}(\Omega(t_{n+1}) - \Omega(t_{n-1})). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Die zugehörigen Ableitungen werden durch

$$\dot{W}_n = \frac{1}{h}(W_{n+1/2} - W_{n-1/2}) \quad (3.12)$$

angenähert, mit

$$Q_{n+1/2} = \frac{1}{2}(Q(t_{n+1}) + Q(t_n)) \text{ und } \dot{Q}_{n+1/2} = \frac{1}{h}(Q(t_{n+1}) - Q(t_n))$$

sowie den entsprechenden Ausdrücken für $C_{n+1/2}$, $\dot{C}_{n+1/2}$, $\Omega_{n+1/2}$ und $\dot{\Omega}_{n+1/2}$.

Wie bereits angesprochen, genügt es zum Erreichen eines lokalen Fehlers von $\mathcal{O}(h^3)$ nicht, in jedem Argument von $E(\Phi)$ die lineare Phasenapproximation zu verwenden.

Allerdings werden wir in der Fehleranalyse (Kapitel 3.5) sehen, dass wir auch nicht überall den relativ großen Aufwand einer quadratischen Annäherung investieren müssen. In einer Weiterentwicklung von [22] nähern wir die in $\mathcal{B}(t_n)$ und $\mathcal{C}(t_n)$ auftretenden Phasen Φ wie bisher linear an und verwenden in $\mathcal{A}(t_n)$ die quadratische Approximation der Phase:

$$\Phi(t_n + \theta h) \approx \Phi(t_n) + \theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n). \quad (3.13)$$

Die Ableitung $\dot{\Lambda}(t_n)$ wird wieder durch einen symmetrischen Differenzenquotienten approximiert,

$$\dot{\Lambda}_n = \frac{1}{2h} (\Lambda(t_{n+1}) - \Lambda(t_{n-1})), \quad (3.14)$$

und das Integral $\Phi(t_n) = \int_{t_0}^{t_n} \Lambda(s) ds$ in der Näherung Φ_n rekursiv durch die Simpsonregel berechnet

$$\Phi_{n+1} = \Phi_{n-1} + \frac{h}{3} (\Lambda(t_{n+1}) + 4\Lambda(t_n) + \Lambda(t_{n-1})). \quad (3.15)$$

Mit diesen Approximationen können wir die hochoszillatorische matrixwertige Funktion $E(\Phi(t_n + \theta h))$ ersetzen durch

$$\begin{aligned} E_n^A(\theta) &= E(\Phi_n + \theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \\ &= E(\Phi_n) \bullet E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet E(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n), \quad \text{bzw.} \\ E_n(\theta) &= E(\Phi_n + \theta h \Lambda(t_n)) = E(\Phi_n) \bullet E(\theta h \Lambda(t_n)) \end{aligned} \quad (3.16)$$

und erhalten folgende Darstellung:

$$\eta_{n+1} = \eta_{n-1} + h \tilde{\mathcal{A}}_n \eta_n + h^2 \tilde{\mathcal{B}}_n \eta_n + h^2 \tilde{\mathcal{C}}_n \eta_n. \quad (3.17)$$

Dabei werden die Matrizen $\mathcal{A}(t_n)$, $\mathcal{B}(t_n)$, $\mathcal{C}(t_n)$ aus (3.8)–(3.10) folgendermaßen approximiert:

$$\tilde{\mathcal{A}}_n = \int_{-1}^1 E_n^A(\theta) d\theta \bullet W_n, \quad (3.18)$$

$$\tilde{\mathcal{B}}_n = \int_{-1}^1 \theta E_n(\theta) d\theta \bullet \dot{W}_n, \quad (3.19)$$

$$\tilde{\mathcal{C}}_n = \int_{-1}^1 (E_n(\theta) \bullet W_n) \left(\int_0^\theta E_n(\sigma) d\sigma \bullet W_n \right) d\theta. \quad (3.20)$$

Die oszillatorischen Integrale in (3.18)–(3.20) bedürfen einer gesonderten Betrachtung. In [15] werden spezielle Quadraturformeln zur Berechnung von hochoszillatorischen Integralen vorgeschlagen, die allerdings zum Teil viele Funktionsauswertungen pro Zeitschritt benötigen. Wir wollen hier die besondere Gestalt obiger Integrale ausnutzen und diese durch sukzessive partielle Integration entwickeln, wie bereits in [16], [17] und [22] angeregt. Es gibt aber auch die Möglichkeit, alle Integrale analytisch zu berechnen.

Während $\tilde{\mathcal{B}}_n$ und $\tilde{\mathcal{C}}_n$ analytisch, sozusagen mit der Hand am Arm, integriert werden können und im Folgenden auch auf diese Weise behandelt werden, gibt es auch für das kompliziertere Integral in $\tilde{\mathcal{A}}_n$ eine Möglichkeit, es exakt zu berechnen. Dafür betrachten wir einen Nebendiagonaleintrag der Matrix:

$$\begin{aligned} & \left(\int_{-1}^1 E \left(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n \right) d\theta \right)_{kl} \\ &= \int_{-1}^1 \exp \left(\frac{i}{\varepsilon} \left(\theta h (\Lambda_l(t_n) - \Lambda_k(t_n)) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k}) \right) \right) d\theta \text{ für } k \neq l. \end{aligned}$$

Für $k = l$ sind nach Definition die Einträge von E und damit auch das Integral Null. Mittels quadratischer Ergänzung erhalten wir

$$\begin{aligned} & \left(\int_{-1}^1 E \left(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n \right) d\theta \right)_{kl} \\ &= -i \sqrt{\frac{2\varepsilon}{ih^2}} (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{-1/2} \exp \left(-\frac{i}{2\varepsilon} (\Lambda_l(t_n) - \Lambda_k(t_n))^2 (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{-1} \right) \\ & \quad \int_u^v \exp(-t^2) dt, \quad \text{für } k \neq l, \end{aligned}$$

wobei die Substitution

$$t = i \sqrt{\frac{i}{2\varepsilon}} \left((\Lambda_l(t_n) - \Lambda_k(t_n)) (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{-1/2} + \theta h (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{1/2} \right)$$

verwendet wurde. Die neuen Integrationsgrenzen u bzw. v lauten:

$$\begin{aligned} u &= i \sqrt{\frac{i}{2\varepsilon}} \left((\Lambda_l(t_n) - \Lambda_k(t_n)) (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{-1/2} - h (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{1/2} \right) \text{ und} \\ v &= i \sqrt{\frac{i}{2\varepsilon}} \left((\Lambda_l(t_n) - \Lambda_k(t_n)) (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{-1/2} + h (\dot{\Lambda}_{n_l} - \dot{\Lambda}_{n_k})^{1/2} \right). \end{aligned}$$

Das Integral $\int_u^v \exp(-t^2) dt$ kann nun mittels einer komplexwertigen Fehlerfunktion als

$$\int_u^v \exp(-t^2) dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(u, v)$$

dargestellt und berechnet werden. Dabei ist $\operatorname{erf}(u, v) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_u^v \exp(-t^2) dt$ über das Gaußsche Fehlerintegral berechenbar.

Wir können $\exp(-t^2)$ als Exponentialfunktion mit imaginärem Argument jedoch auch als Summe von Sinus- und Cosinusfunktionen darstellen und die Integrale darüber mittels Fresnel-Integralen analytisch berechnen.

Ob dieser Weg nun eleganter ist als die im Folgenden ausgeführte, sukzessive partielle Integration, bleibt dem Geschmack des Lesers überlassen; analytisch exakt ist der erste dabei zumindest bis zur Auswertung der Fehlerfunktionen.

Für den zweiten Weg beginnen wir mit dem Integral in $\tilde{\mathcal{A}}_n$ und integrieren partiell

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n\right) d\theta \quad (3.21) \\ &= E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \bullet \frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \Big|_{\theta=-1}^1 \\ & - \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \bullet \frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \bullet \theta \frac{i\hbar^2}{\epsilon} D(\dot{\Lambda}_n) d\theta, \end{aligned}$$

mit den durch (2.4) definierten Matrizen $D(\Lambda)$ und $D^-(\Lambda)$.

Das neu entstandene oszillatorische Integral kann ebenfalls partiell integriert werden:

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \theta E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n\right) d\theta \quad (3.22) \\ &= E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \bullet \left(\theta \frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) - \left(\frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \right)^{\bullet 2} \right) \Big|_{\theta=-1}^1 \\ & - \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \bullet \left(\theta \frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) - \left(\frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \right)^{\bullet 2} \right) \\ & \bullet \theta \frac{i\hbar^2}{\epsilon} D(\dot{\Lambda}_n) d\theta, \end{aligned}$$

dabei bezeichnet $X^{\bullet 2}$ die eintragsweise Potenz, das heißt $X^{\bullet 2} = X \bullet X$.

Das letzte Integral ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(\hbar)$ und folglich

$$\int_{-1}^1 \theta E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) d\theta = \mathcal{I}_1^A + \mathcal{O}(\hbar) \quad \text{mit} \quad (3.23)$$

$$\mathcal{I}_1^A = \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_1^A - \mathcal{J} \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0^A, \quad (3.24)$$

$$\mathcal{E}_1^A = \theta E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \Big|_{\theta=-1}^1, \quad (3.25)$$

$$\mathcal{E}_0^A = E(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) \Big|_{\theta=-1}^1, \quad (3.26)$$

$$\mathcal{J} = \frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)). \quad (3.27)$$

Wir erhalten \mathcal{A}_n als $\mathcal{O}(h^2)$ -Approximation an $\tilde{\mathcal{A}}_n$ durch

$$\mathcal{A}_n = E(\Phi_n) \bullet \mathcal{I}_0^A \bullet W_n \quad \text{mit} \quad \mathcal{I}_0^A = \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0^A - \mathcal{J} \bullet \mathcal{I}_1^A \bullet \frac{i\hbar^2}{\epsilon} D(\dot{\Lambda}_n). \quad (3.28)$$

Das Integral in $\tilde{\mathcal{B}}_n$ können wir exakt integrieren

$$\int_{-1}^1 \theta E(\theta h \Lambda(t_n)) d\theta = E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet (\theta \mathcal{J} - \mathcal{J} \bullet \mathcal{J}) \Big|_{\theta=-1}^1$$

und mit den entsprechenden Ausdrücken

$$\mathcal{I}_1 = \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_1 - \mathcal{J} \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0, \quad (3.29)$$

$$\mathcal{E}_1 = \theta E(\theta h \Lambda(t_n)) \Big|_{\theta=-1}^1 \quad \text{sowie} \quad (3.30)$$

$$\mathcal{E}_0 = E(\theta h \Lambda(t_n)) \Big|_{\theta=-1}^1 \quad (3.31)$$

erhalten wir

$$\tilde{\mathcal{B}}_n = E(\Phi_n) \bullet \mathcal{I}_1 \bullet \dot{W}_n. \quad (3.32)$$

Der Term $\tilde{\mathcal{C}}_n$ ist komplizierter, da er ein Doppelintegral enthält und sowohl eine Matrixmultiplikation als auch eintragsweise Multiplikationen von Matrizen auftreten. Zunächst integrieren wir das innere Integral analytisch,

$$\int_0^\theta E_n(\sigma) d\sigma = \mathcal{J} \bullet (E_n(\theta) - E_n(0)) \quad (3.33)$$

und $\tilde{\mathcal{C}}_n$ wird zu

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \left(E(\Phi_n + \theta h \Lambda(t_n)) \bullet W_n \right) \left(E(\Phi_n + \theta h \Lambda(t_n)) \bullet \mathcal{J} \bullet W_n \right) d\theta \\ & - \int_{-1}^1 \left(E(\Phi_n) \bullet E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet W_n \right) \left(E(\Phi_n) \bullet \mathcal{J} \bullet W_n \right) d\theta. \end{aligned}$$

Nach Definition gilt

$$(E(\Phi) \bullet M_1)(E(\Phi) \bullet M_2) = (E(\Phi) + I) \bullet (M_1 M_2)$$

für alle Diagonalmatrizen Φ und alle Matrizen M_1 und M_2 , deren Diagonale Null ist, dabei bezeichnet I die Einheitsmatrix. Diese Gleichheit wenden wir nun an, integrieren wieder exakt und erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_n &= \left(E(\Phi_n) \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0 + 2I \right) \bullet \left(W_n(\mathcal{J} \bullet W_n) \right) \\ &\quad - \left(E(\Phi_n) + I \right) \bullet \left((\mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0 \bullet W_n)(\mathcal{J} \bullet W_n) \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Die adiabatische Mittelpunktsregel können wir also wie folgt implementieren.

Algorithmus

Es seien $\eta_n, \eta_{n-1}, C(t_n), C(t_{n-1}), Q(t_n), Q(t_{n-1}), \Omega(t_n), \Omega(t_{n-1}), \Phi_n, \Phi_{n-1}$ und $W_{n-1/2}$ aus vorigen Schritten gegeben. Gehe für Schritt $n + 1$ folgendermaßen vor:

1. Werte $A(t_{n+1})$ und $M(t_{n+1})$ aus und zerlege $A(t_{n+1}) = C(t_{n+1})^{-T} C(t_{n+1})^{-1}$.
2. Diagonalisiere

$$C(t_{n+1})^{-1} M(t_{n+1})^{-1} C(t_{n+1})^{-T} = Q(t_{n+1}) \Omega(t_{n+1})^2 Q(t_{n+1})^T.$$

3. Berechne L_n und $L_{n+1/2}$ mit (3.4), sowie (3.11) und daraus W_n bzw. $W_{n+1/2}$.
4. Berechne \dot{W}_n und $\dot{\Lambda}_n$ mit (3.12) und (3.14).
5. Berechne $\mathcal{J}, \mathcal{E}_0^A, \mathcal{E}_1^A, \mathcal{I}_0^A, \mathcal{I}_1^A, \mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{I}_1$ mit (3.24)–(3.31).
6. Berechne $\mathcal{A}_n = E(\Phi_n) \bullet \mathcal{I}_0^A \bullet W_n$.
7. Berechne $\tilde{\mathcal{B}}_n = E(\Phi_n) \bullet \mathcal{I}_1 \bullet \dot{W}_n$.
8. Berechne $\tilde{\mathcal{C}}_n$ mit (3.34).
9. Aktualisiere $\eta_{n+1} = \eta_{n-1} + h\mathcal{A}_n\eta_n + h^2\tilde{\mathcal{B}}_n\eta_n + h^2\tilde{\mathcal{C}}_n\eta_n$.
10. Berechne Φ_{n+1} mit (3.15).
11. Führe an den gewünschten Ausgabepunkten eine Rücktransformation in die ursprünglichen Variablen (p, q) durch.

Auch wenn dieses Verfahren relativ kompliziert in der Notation ist, erfordert es nur eine Funktionsauswertung von $A(t)$ pro Zeitschritt. Wie bei den Verfahren mit linearer Phasenapproximation muss auch hier wieder auf die Reihenfolge der Eigenwerte in $\Omega(t)$ geachtet und künstliche Vorzeichenwechsel in den Eigenvektoren sind tunlichst zu vermeiden.

Da dieses Verfahren ein Zweischrittverfahren ist, benötigen wir einen Startschritt $\eta_0 \rightarrow \eta_1$. Dafür verwenden wir

$$\eta_1 = \eta_0 + h\mathcal{A}_0\eta_0 + h^2\tilde{\mathcal{B}}_0\eta_0 + h^2\tilde{\mathcal{C}}_0\eta_0$$

mit Integration von 0 bis 1 anstatt von -1 bis 1. Um W_0, \dot{W}_0, Φ_1 und Λ_0 mit den entsprechenden Approximationen berechnen zu können, benötigen wir zwei zusätzliche Funktionsauswertungen von A in $t_{1/2} = t_0 + h/2$ und $t_{-1/2} = t_0 - h/2$.

Mit den Techniken dieses Kapitels erhalten wir relativ schnell einen weiteren Integrator globaler zweiter Ordnung, der auf einem Ansatz von Magnus beruht. Diesen werden wir im nächsten Abschnitt näher betrachten.

3.2 Das adiabatische Magnusverfahren

Magnus [24] stellt die Lösung einer linearen Differentialgleichung

$$\dot{\eta}(t) = N(t)\eta(t)$$

mit einer zeitabhängigen Matrix $N(t)$ dar als Multiplikation des Anfangswertes mit einer Exponentialfunktion,

$$\eta(t) = \exp(M(t))\eta(t_0),$$

wobei $M(t)$ durch die Magnusreihe gegeben ist:

$$\begin{aligned} M(t) &= \int_{t_0}^t N(\tau)d\tau - \frac{1}{2} \int_{t_0}^t \left[\int_{t_0}^{\tau} N(\sigma) d\sigma, N(\tau) \right] d\tau \\ &+ \frac{1}{4} \int_{t_0}^t \left[\int_{t_0}^{\tau} \left[\int_{t_0}^{\sigma} N(\mu) d\mu, N(\sigma) \right] d\sigma, N(\tau) \right] d\tau \\ &+ \frac{1}{12} \int_{t_0}^t \left[\int_{t_0}^{\tau} N(\sigma) d\sigma, \left[\int_{t_0}^{\tau} N(\mu) d\mu, N(\tau) \right] \right] d\tau + \dots \end{aligned}$$

Die Klammern $[\cdot, \cdot]$ bezeichnen dabei den Kommutator $[X, Y] = XY - YX$.

Die ineinander verschachtelten Terme aus Kommutatoren und Integralen werden schnell kompliziert, weshalb wir die Reihe für eine numerische Berechnung abbrechen und die Integrale durch geeignete Quadraturen ersetzen, siehe zum Beispiel [14].

Unser Verfahren soll zeitsymmetrisch werden, da Verfahren mit dieser Eigenschaft ein besseres Langzeitverhalten zeigen [8]. Deshalb machen wir einen Zeitschritt vorwärts, einen rückwärts und mitteln diese, indem wir setzen:

$$\begin{aligned} M_n^\pm &= h \int_{-1}^1 N(t_n + \theta h) d\theta \mp \frac{h^2}{2} \int_{-1}^1 \left[\int_{-1}^\theta N(t_n \pm \sigma h) d\sigma, N(t_n \pm \theta h) \right] d\theta, \\ M_n &= (M_n^+ + M_n^-)/2 \end{aligned}$$

sowie

$$\eta_{n+1} = \exp(M_n)\eta_{n-1}.$$

In unserem Fall der Differentialgleichung (3.3) hat $N(t)$ die Gestalt

$$N(t) = E(\Phi(t)) \bullet W(t),$$

und wieder müssen wir auf Grund des Auftretens von $E(\Phi(t))$ in $N(t)$ oszillatorische Integrale berechnen. Auch hier möchten wir nur eine Funktionsauswertung pro Zeitschritt investieren, so dass wir die Techniken aus dem vorigen Abschnitt erneut anwenden. Auch werden $\Phi(t_n + \theta h)$ und $W(t_n + \theta h)$ wieder entsprechend linear bzw. quadratisch approximiert. Mit diesen Substitutionen erhalten wir Terme, die zu denen im vorigen Kapitel identisch bzw. sehr ähnlich sind und beschränken uns deshalb hier auf die Angabe des Algorithmus für ein sogenanntes “adiabatisches Magnus-Verfahren”:

Algorithmus

1. bis 7. Gehe vor wie bei der adiabatischen Mittelpunktsregel.
8. Berechne

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}}_n &= \frac{1}{2}(E(\Phi_n) \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0 + 2I) \bullet [W_n, \mathcal{J} \bullet W_n] \\ &\quad + \frac{1}{4}[E(\Phi_n) \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_1 \bullet W_n, E(\Phi_n) \bullet \mathcal{J} \bullet \mathcal{E}_0 \bullet W_n]. \end{aligned}$$

9. Berechne M_n und η_{n+1} :

$$\begin{aligned} M_n &= h\mathcal{A}_n + h^2\tilde{\mathcal{B}}_n + h^2\tilde{\mathcal{C}}_n, \\ \eta_{n+1} &= \exp(M_n)\eta_{n-1}. \end{aligned}$$

10. bis 11. Gehe vor wie bei der adiabatischen Mittelpunktsregel.

Auch dieses Verfahren ist ein Zweischrittverfahren.

Den Startschritt können wir wie bei der adiabatischen Mittelpunktsregel erhalten oder durch Modifikation des obigen Magnusschrittes.

Wir haben hier zwei Verfahren vorgestellt, die im Gegensatz zu den Verfahren aus Kapitel 2 Zweischrittverfahren sind. Wir benötigen dabei für jeden neuen Schritt die beiden vorherigen Schritte. Im vorigen Kapitel mussten wir dafür nur auf den letzten Schritt zurückgreifen, verwendeten allerdings zwei Funktionsauswertungen pro Zeitschritt. Hier kommen wir mit einer Funktionsauswertung pro Zeitschritt aus. Von der quadratischen Phasenapproximation und den besseren Näherungen an die auftretenden Matrizen versprechen wir uns eine Erhöhung der Ordnung vor allem in den schnellen Impulsen. Ob dies auch erreicht wird, werden wir im nächsten Abschnitt sehen.

3.3 Fehleranalyse: Resultate

Wir beschränken uns auch hier zunächst auf eine Darstellung der Ergebnisse als Sätze bzw. Theoreme und verweisen auf die Kapitel 3.5 und 3.6 für die Beweise. Wie in Kapitel 2.4 setzt sich die Untersuchung der Ordnung von adiabatischer Mittelpunktsregel und adiabatischem Magnus-Verfahren zusammen aus einem Satz über die Abschätzung des lokalen Fehlers und einem folgenden Theorem über die Fehlerakkumulation bzw. Stabilität.

Zunächst wiederholen wir die bereits bekannten Voraussetzungen:

V1 Es gilt die Energiebeschränkung $H(p, q, t) \leq \text{Const.}$ für die Anfangswerte und die Funktionen in (1.2) sind ausreichend oft differenzierbar (C^3 mit unabhängig von ε beschränkten Ableitungen).

- V2** Die orthogonale Matrix $Q(t)$ aus dem zweiten Schritt des Algorithmus hat beschränkte Ableitungen mit $\dot{Q}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-1})$ und $\ddot{Q}(t) = \mathcal{O}(\delta^{-2})$.
- V3** Die Frequenzen $\omega_k(t)$ erfüllen für alle Zeiten $t \in [t_0, t_{end}]$ die Ungleichungen $|\omega_k(t) - \omega_l(t)| \geq \delta$ und $\omega_k(t) \geq \text{Const.} > 0 \quad \forall k, l = 1, \dots, m$ mit $k \neq l$.
- V4** Die Schrittweite h erfüllt $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$.

In der adiabatischen Situation gilt zudem $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$

Wir wollen die Auswirkungen von nichtadiabatischen Übergängen auf die Genauigkeit unserer Verfahren wieder anhand des ersten lokalen Fehlerbeweises verfolgen und gehen ansonsten durchweg von der adiabatischen Situation aus, in der $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ erfüllt ist.

Satz 5 *Unter den Voraussetzungen V1-V4 gilt für den lokalen Fehler der adiabatischen Mittelpunktsregel*

$$\left\| \eta(t_{n+1}) - \left(\eta(t_{n-1}) + h\mathcal{A}_n\eta(t_n) + h^2\tilde{\mathcal{B}}_n\eta(t_n) + h^2\tilde{\mathcal{C}}_n\eta(t_n) \right) \right\| \leq Ch^3/\delta^3, \quad (3.35)$$

mit einer von ε unabhängigen Konstanten C .

Beweis: Siehe Kapitel 3.5.

Eine Fastkreuzung der Eigenwerte mit kleinen Werten von δ hat also auch hier die Auswirkungen, die wir in Kapitel 2.4 durch eine dezidierte Verfolgung des Parameters δ im lokalen Fehler bereits festgestellt haben. Die Verbesserung unserer Verfahren in einer solchen Situation mittels adaptiver Schrittweitensteuerung haben wir in Kapitel 2.6 eingehend erläutert.

In der transformierten Variablen η haben wir nun eine Potenz von h im Fehler gegenüber den Verfahren mit linearer Phasenapproximation gewonnen. Wie gewohnt reduziert sich dies durch die Fehlerakkumulation auf h^2 im globalen Fehler und wir erhalten nach n Schritten des Verfahrens:

Theorem 5 Seien η_n , p_n and q_n die durch die adiabatische Mittelpunktsregel gegebenen Approximationen an $\eta(t_n)$ bzw. die ursprünglichen Koordinaten $p(t_n)$ und $q(t_n)$. Unter den Voraussetzungen $V1-V4$ und $\frac{1}{\delta} < \text{Const.}$ gelten für den Fehler in $t_n = t_0 + nh$ folgende Schranken:

$$\begin{aligned}\|\eta(t_n) - \eta_n\| &\leq Ch^2, \\ \|p(t_n) - p_n\| &\leq Ch^2, \\ \|q(t_n) - q_n\| &\leq C\epsilon h^2.\end{aligned}$$

Die Konstanten C hängen dabei nicht von ϵ , n und h ab so lange $nh < \text{Const.}$ gilt.

Beweis: Siehe Kapitel 3.5.

Für das adiabatische Magnus-Verfahren erhalten wir eine analoge Fehlerabschätzung:

Theorem 6 Unter den Voraussetzungen von Theorem 5 gilt für den Fehler des adiabatischen Magnus-Verfahrens aus Kapitel 3.2

$$\begin{aligned}\|\eta(t_n) - \eta_n\| &\leq Ch^2, \\ \|p(t_n) - p_n\| &\leq Ch^2, \\ \|q(t_n) - q_n\| &\leq C\epsilon h^2.\end{aligned}$$

Die Konstanten C hängen dabei nicht von ϵ , n und h ab so lange $nh < \text{Const.}$ gilt.

Beweis: Siehe Kapitel 3.6.

Die quadratische Ordnung im Fehler von η führt also auch zu einer quadratischen Ordnung in den schnellen Impulsen und wir haben das Ziel erreicht, den Approximationsfehler in allen Variablen durch Ch^2 zu beschränken.

Im nächsten Abschnitt werden wir das Verhalten der Verfahren mit quadratischer Phasenapproximation illustrieren und mit dem Verhalten bekannter Verfahren vergleichen..

3.4 Numerische Beispiele

Zur Illustration des Verhaltens von adiabatischer Mittelpunktsregel und adiabatischem Magnus-Verfahren verwenden wir wieder das Fastkreuzungsbeispiel aus Abschnitt 2.5.2 bzw. 1.5.2 und vergleichen unsere beiden neuen Verfahren mit anderen numerischen Integratoren, die hier etwas spezieller gewählt sind als das Störmer-Verlet-Verfahren in Kapitel 2.5:

- das modifizierte Magnus-Verfahren klassischer vierter Ordnung präsentiert von A. Iserles in [13] (MMagnus),
- das ursprüngliche Magnus-Verfahren zweiter Ordnung (Magnus) angewandt auf

$$\begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \frac{1}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 0 & -\Omega(t) \\ \Omega(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -L(t) & 0 \\ 0 & L(t)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix},$$

- ein Verfahren vom Gautschi-Typ, angewandt auf (3.1) mit

$$q_{n+1} - 2 \cos\left(\frac{h}{\varepsilon} \Omega_n\right) q_n + q_{n-1} = 0.$$

Im Magnus-Verfahren zweiter Ordnung haben wir die Integrale durch eine Gauss-Quadratur vierter Ordnung approximiert, um der hochoszillatorischen Struktur dieser Integrale Rechnung zu tragen.

Abbildung 3.1 zeigt den durchschnittlichen Fehler in η , logarithmisch geplottet gegen die Schrittweite für verschiedene Werte von ε . Wir erkennen an der Steigung der gepunkteten Linie für kleine Schrittweiten $h < \varepsilon$ die vierte Ordnung des modifizierten Magnus-Verfahrens, während die adiabatischen Integratoren überall zweite Ordnung zeigen. Die Erhöhung der Ordnung auf zwei gegenüber den adiabatischen Integratoren mit linearer Phasenapproximation (Ordnung 1), die wir im vorigen Abschnitt als theoretisches Resultat angegeben haben und im nächsten Abschnitt beweisen werden, zeigt sich also ganz klar im numerischen Experiment.

Im für uns interessanten Schrittweitenbereich $h > \varepsilon$ zeigen die meisten Verfahren Schrittweitenresonanzen für bestimmte Werte von h . Das Verfahren vom Gautschi-Typ ist ganz klar das ungenaueste von den geplotteten. Allerdings haben wir Standardintegratoren wie zum Beispiel die Trapezregel hier erst gar nicht eingezeichnet, gegenüber denen ein solches Gautschi-Verfahren noch deutlich im Vorteil wäre.

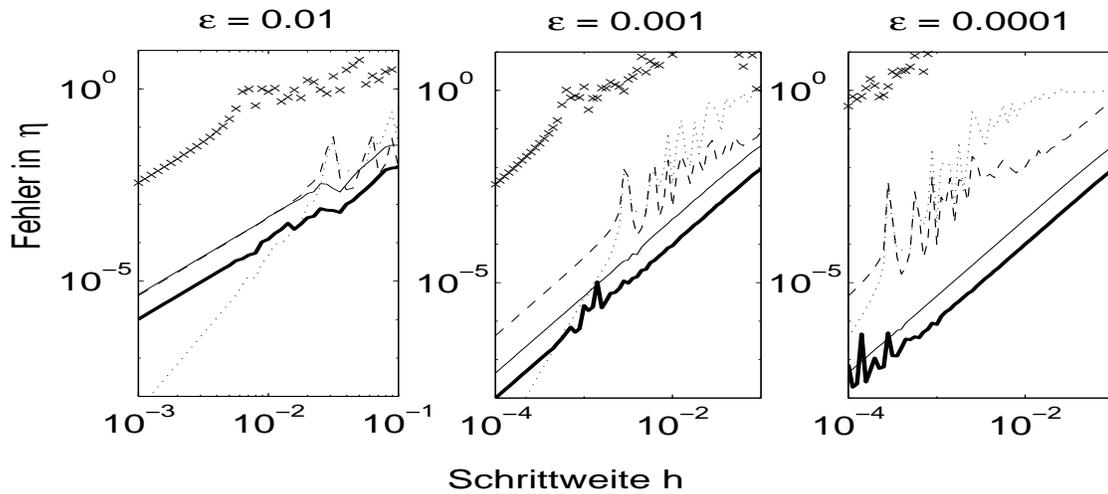


Abbildung 3.1: Fehler in η , geplottet gegen die Schrittweite für $\varepsilon = 0.01$, $\varepsilon = 0.001$ und $\varepsilon = 0.0001$; adiabatische Mittelpunktsregel (durchgezogene Linie) und adiabatisches Magnus-Verfahren (dicke durchgezogene Linie) verglichen mit MMagnus (gepunktet), Magnus (gestrichelt) und Gautschi-Typ (Kreuze); $\delta = 1$.

Die adiabatischen Integratoren zeigen für $\varepsilon = 0.01$ vergleichbare Genauigkeit zu den Magnus-Integratoren, sind aber signifikant genauer je kleiner ε wird.

Da die meisten der Vergleichsverfahren mehr als eine Funktionsauswertung pro Zeitschritt benötigen, plotten wir in Abbildung 3.2 den Fehler der Verfahren logarithmisch gegen die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen.

Hier wird der Vorteil der adiabatischen Integratoren gegenüber den anderen Verfahren noch deutlicher. Bei gleicher Anzahl von Funktionsauswertungen zeigen die adiabatische Mittelpunktsregel und das adiabatische Magnus-Verfahren deutlich geringere Fehler vor allem für kleine Werte von ε .

Beim Auftreten von Fastkreuzungen würden allerdings auch diese Verfahren kleinere Schrittweiten und damit mehr Funktionsauswertungen benötigen, um die nichtadiabatischen Übergänge in η auflösen zu können. Die Wahl adaptiver Schrittweiten wie in Kapitel 2.6 kann hier Abhilfe schaffen.

Die investierte Arbeit zahlt sich also aus: insbesondere mit starken Oszillationen kommen die adiabatischen Integratoren deutlich besser zurecht als die Vergleichsverfahren.

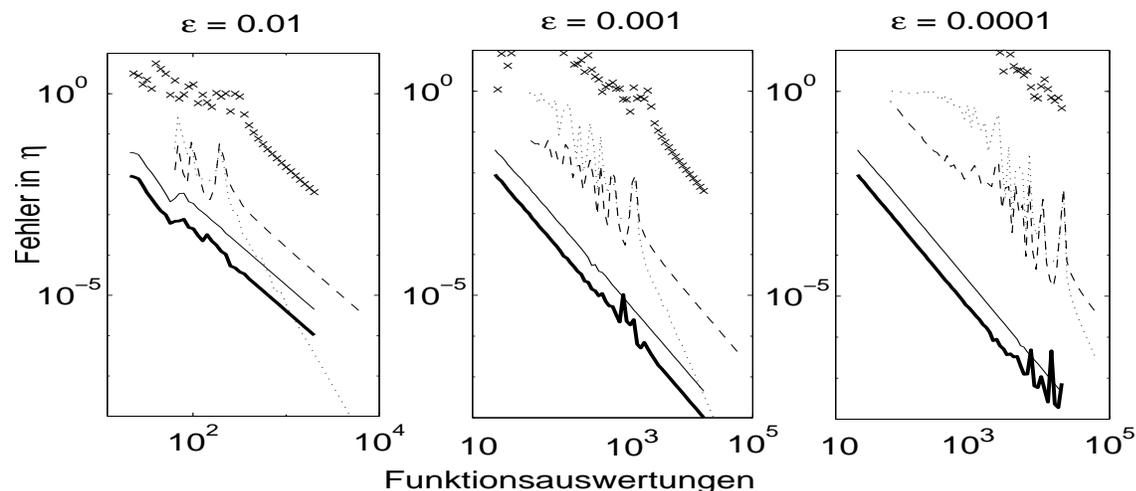


Abbildung 3.2: Fehler in η geplottet gegen die Anzahl von Funktionsauswertungen für die gleichen Verfahren und Daten wie oben (Abbildung 3.1).

Aber ein gutes Stück Arbeit steckt noch in dem Beweis der Fehlerabschätzungen, der theoretischen Grundlage für die Bilder dieses Abschnitts.

3.5 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 5

Analog zu Kapitel 2.7 werden wir zunächst die Aussage von Satz 5 über den lokalen Fehler beweisen und dann über Fehlerakkumulation bzw. Stabilität des Verfahrens und Rücktransformation zum globalen Fehler in den ursprünglichen Variablen übergehen. Wieder haben wir zum einen die Potenzen von h im Auge zu behalten, zum anderen auf das Auftreten von ε -Termen im Nenner zu achten, die uns h -Potenzen kosten können.

Auch den Parameter δ wollen wir zumindest im Beweis des lokalen Fehlers beobachten und fassen wieder mit C bzw. \mathcal{O} verschiedene nicht näher bezeichnete, aber von ε und h unabhängige harmlose Konstanten zusammen.

3.5.1 Beweis von Satz 5

Wir zeigen die Abschätzung für den lokalen Fehler, indem wir die Differenz (3.35) wieder in handlichere Teile aufspalten.

Dazu folgen wir [22] und führen folgende Notation ein:

- Definiere $\widehat{\mathcal{A}}_n$, $\widehat{\mathcal{B}}_n$ und $\widehat{\mathcal{C}}_n$ jeweils wie in (3.8), (3.9) und (3.10), wobei $W(t_n)$ durch die Approximation W_n ersetzt wird und $\dot{W}(t_n)$ durch \dot{W}_n .
- Definiere $\check{\mathcal{A}}_n$, $\check{\mathcal{B}}_n$, und $\check{\mathcal{C}}_n$ jeweils wie in (3.18), (3.19) und (3.20), wobei Φ_n durch $\Phi(t_n)$ und $\dot{\Lambda}_n$ durch $\dot{\Lambda}(t_n)$ ersetzt wird.

Mit dieser Notation können wir den lokalen Fehler in vier Teile zerlegen

$$\begin{aligned} & \eta(t_{n+1}) - \left(\eta(t_{n-1}) + h\mathcal{A}_n\eta(t_n) + h^2\widetilde{\mathcal{B}}_n\eta(t_n) + h^2\widetilde{\mathcal{C}}_n\eta(t_n) \right) \\ &= \eta(t_{n+1}) - \left(\eta(t_{n-1}) + h\widehat{\mathcal{A}}_n\eta(t_n) + h^2\widehat{\mathcal{B}}_n\eta(t_n) + h^2\widehat{\mathcal{C}}_n\eta(t_n) \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$+ \left(h\widehat{\mathcal{A}}_n + h^2\widehat{\mathcal{B}}_n + h^2\widehat{\mathcal{C}}_n \right) \eta(t_n) - \left(h\check{\mathcal{A}}_n + h^2\check{\mathcal{B}}_n + h^2\check{\mathcal{C}}_n \right) \eta(t_n) \quad (3.37)$$

$$+ \left(h\check{\mathcal{A}}_n + h^2\check{\mathcal{B}}_n + h^2\check{\mathcal{C}}_n \right) \eta(t_n) - \left(h\widetilde{\mathcal{A}}_n + h^2\widetilde{\mathcal{B}}_n + h^2\widetilde{\mathcal{C}}_n \right) \eta(t_n) \quad (3.38)$$

$$+ h\widetilde{\mathcal{A}}_n\eta(t_n) - h\mathcal{A}_n\eta(t_n). \quad (3.39)$$

Diese Teile können nun jedes für sich mit Hilfe der folgenden Interpretationen abgeschätzt werden:

(3.36) ist der Fehler, der durch das Ersetzen der Zwischenwerte von W und \dot{W} durch (3.7), (3.11) und (3.12) entsteht bzw. durch das Einfrieren von $\eta(t_n + \sigma h)$ in $\eta(t_n)$. Die lineare bzw. quadratische Approximation der Phase $\Phi(t_n + \theta h)$ verursacht die Differenz (3.37), während die Berechnung des Integrals $\Phi(t_n)$ an sich durch die Simpsonregel die Ursache von (3.38) ist. Die Integrale in $\widetilde{\mathcal{B}}_n$ und $\widetilde{\mathcal{C}}_n$ haben wir exakt integriert, wohingegen wir uns bei $\widetilde{\mathcal{A}}_n$ für die Technik der sukzessiven partiellen Integration entscheiden können. Dieses Vorgehen ist verantwortlich für die Entstehung der Differenz (3.39).

1. Schritt: Abschätzung von (3.36)

Mit (3.11) und (3.12) können wir leicht folgende Abschätzungen zeigen

$$\|W(t_n) - W_n\| \leq Ch^2 \|\partial^3 Q\| = Ch^2/\delta^3,$$

$$\|\dot{W}(t_n) - \dot{W}_n\| \leq Ch \|\partial^3 Q\| = Ch/\delta^3$$

und erhalten

$$\|W(t_n + \theta h) - W_n - \theta h\dot{W}_n\| \leq Ch^2(\|\partial^3 Q\| + \|\ddot{W}\|) = Ch^2/\delta^3 \text{ sowie}$$

$$\|W(t_n + \theta h) - W_n\| \leq Ch\|\dot{W}\| + \mathcal{O}(h^2/\delta^3).$$

Weiter gilt

$$\eta(t_n + \sigma h) - \eta(t_n) = h \int_0^\sigma \left(E(\Phi(t_n + \xi h)) \bullet W(t_n + \xi h) \right) \eta(t_n + \xi h) d\xi$$

und damit unter Verwendung von $|\sigma| \leq 1$

$$\|\eta(t_n + \sigma h) - \eta(t_n)\| \leq Ch \|W\|.$$

Mit diesen Abschätzungen können wir (3.36) beschränken durch

$$Ch^3(\|\partial^3 Q\| + \|\ddot{W}\| + \|\dot{W}\| \|W\| + \|W\|^3) = Ch^3/\delta^3.$$

2. Schritt: Abschätzung von (3.37)

In diesem Schritt betrachten wir zunächst den Fehler, der durch die lineare Approximation von Φ in den Integralen von $\widehat{\mathcal{B}}_n$ und $\widehat{\mathcal{C}}_n$ entstanden ist. Solche Terme haben wir bereits in Schritt 3 des Beweises von Satz 2 (Kapitel 2.7) untersucht und wir greifen hier auf die dortige Notation zurück, indem wir schreiben

$$\begin{aligned} E(\Phi(t + \theta h)) - E(\Phi(t) + \theta h \Lambda(t)) \\ = \frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} E(\Phi(t) + \theta h \Lambda(t)) \bullet F(t, \theta h, R), \end{aligned}$$

mit der durch (2.57) definierten Funktion F , bei der R das Restglied der Taylorreihe nach dem linearen Term ist. Für das Integral über diese Differenz gilt hier wie dort

$$\int_{-1}^1 E(\Phi(t + \theta h)) - E(\Phi(t) + \theta h \Lambda(t)) d\theta \quad (3.40)$$

$$= \frac{ih^2}{\varepsilon} E(\Phi(t)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda) \bullet \theta^2 F(t, \theta h, R) d\theta = \mathcal{O}\left(\frac{h}{\delta}\right). \quad (3.41)$$

Es ist also

$$\begin{aligned} h^2 \left(\widehat{\mathcal{B}}_n - \check{\mathcal{B}}_n \right) &= h^2 E(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 \theta E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet \frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \theta h, R) d\theta \bullet \dot{W}_n \\ &= h^2 \frac{ih^2}{\varepsilon} E(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet \theta^3 F(t_n, \theta h, R) d\theta \bullet \dot{W}_n \\ &= \mathcal{O}(h^3/\delta^3) \end{aligned}$$

für $\varepsilon < h$ und $\dot{W}_n = \mathcal{O}(1/\delta^2)$.

Weiter gilt

$$\begin{aligned}
h^2 \left(\widehat{\mathcal{C}}_n - \check{\mathcal{C}}_n \right) &= h^2 \left(E(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet \frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \theta h, R) \bullet W_n \right) \\
&\quad \left(\int_0^\theta E(\Phi(t_n + \sigma h)) d\sigma \bullet W_n \right) d\theta \\
&\quad + h^2 \left(E(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet W_n \right) \\
&\quad \left(E(\Phi(t_n)) \bullet \int_0^\theta E(\sigma h \Lambda(t_n)) \bullet \frac{i\sigma^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \sigma h, R) d\sigma \bullet W_n \right) d\theta.
\end{aligned}$$

Wir betrachten den ersten Term, approximieren die Phase im zweiten Integral linear und erhalten mit $\mathcal{J} = \frac{\varepsilon}{ih} D^-(\Lambda(t_n))$

$$\begin{aligned}
&h^2 \left(E(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet \frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \theta h, R) \bullet W_n \right) \\
&\quad \left(E(\Phi(t_n)) \bullet \mathcal{J} \bullet \left(E(\theta h \Lambda(t_n)) - E(0) \right) \bullet W_n \right) d\theta + \mathcal{O}(h^3/\delta^3) \\
&= h^2 \left(\int_{-1}^1 E(\Phi(t_n)) \bullet E(\theta h \Lambda(t_n)) + I \right) \bullet \left(\left(\frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \theta h, R) \bullet W_n \right) (\mathcal{J} \bullet W_n) \right) d\theta \\
&\quad - h^2 \left(E(\Phi(t_n)) + I \right) \bullet \int_{-1}^1 \left(\left(E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet \frac{i\theta^2 h^2}{\varepsilon} F(t_n, \theta h, R) \bullet W_n \right) (\mathcal{J} \bullet W_n) \right) d\theta \\
&\quad + \mathcal{O}(h^3/\delta^3) \\
&= \mathcal{O}(h^3/\delta^3).
\end{aligned}$$

Dabei haben wir wieder unser Vorwissen aus (3.41) eingesetzt.

Mit der gleichen Technik können wir auch den zweiten Term abschätzen und erhalten insgesamt

$$h^2 \left(\widehat{\mathcal{C}}_n - \check{\mathcal{C}}_n \right) = \mathcal{O}(h^3/\delta^3).$$

Für die Differenz $h \left(\widehat{\mathcal{A}}_n - \check{\mathcal{A}}_n \right)$ bauen wir zunächst den gleichen Formalismus für die quadratische Phasenapproximation auf, wie wir ihn für die lineare bereits mehrfach mit Erfolg verwendet haben.

Dazu schreiben wir $\theta^3 h^3 R(t, \theta h)$ als Restglied der Taylorentwicklung nach dem quadratischen Term (3.13), das heißt

$$\Phi(t + \theta h) = \Phi(t) + \theta h \Lambda(t) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t) + \theta^3 h^3 R(t, \theta h), \text{ und } \|R(t, \theta h)\| \leq C \|\ddot{\Lambda}\|.$$

Außerdem definieren wir wieder eine matrixwertige und nach t stetig differenzierbare Funktion F durch

$$F(t, x) = D(R(t, x)) \bullet \int_0^1 E(\xi x^3 R(t, x)) d\xi = \frac{\epsilon}{ix^3} (E(x^3 R(t, x)) - E(0))$$

für $x \neq 0$ und durch den entsprechenden Grenzwert für $x = 0$.

$F(t, x)$ ist beschränkt durch

$$\|F(t, x)\| = C \|R(t, x)\| \leq C \|\ddot{\Lambda}\|. \quad (3.42)$$

Wir verwenden diese Definition und erhalten wie oben:

$$\begin{aligned} & h\widehat{\mathcal{A}}_n - h\check{\mathcal{A}}_n \\ &= hE(\Phi(t_n)) \bullet \int_{-1}^1 E\left(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) d\theta \bullet W_n. \end{aligned}$$

Dieses Integral ist exakt das gleiche wie in [16]. Wir integrieren partiell,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 E\left(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) d\theta \\ &= \int_{-1}^{\theta} E(\sigma h \Lambda(t_n)) d\sigma \bullet E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) \Big|_{\theta=-1}^1 \\ & \quad - \int_{-1}^1 \int_{-1}^{\theta} E(\sigma h \Lambda(t_n)) d\sigma \bullet \frac{d}{d\theta} \left(E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) \right) d\theta. \end{aligned}$$

Mit der bereits oben verwendeten analytischen Integration

$$\int_{-1}^{\theta} E(\sigma h \Lambda(t_n)) d\sigma = \frac{\epsilon}{ih} D^-(\Lambda(t_n)) \bullet (E(\theta h \Lambda(t_n)) - E(-h \Lambda(t_n)))$$

und

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\theta} \left(E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) \right) \\ &= \frac{i\theta h^2}{\epsilon} D(\dot{\Lambda}(t_n)) \bullet E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{i\theta^3 h^3}{\epsilon} F(t_n, \theta h) \\ & \quad + E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)\right) \bullet \frac{ih^3}{\epsilon} \frac{d}{d\theta} (\theta^3 F(t_n, \theta h)) \end{aligned}$$

können wir hier feststellen

$$\|h\widehat{\mathcal{A}}_n - h\check{\mathcal{A}}_n\| \leq C \frac{h^3}{\delta} \|\ddot{\Lambda}\| \|W\| = C \frac{h^3}{\delta^3}.$$

Dabei geht ein, dass die Ableitungen von Λ , die im adiabatischen Fall zwar glatt und beschränkt sind, beim Auftreten einer Fastkreuzung Unstetigkeiten haben können.

3. Schritt: Abschätzung von (3.38)

Die Fehler der Simpsonregel (3.15) und des symmetrischen Differenzenquotienten (3.14) sind

$$\begin{aligned} \|\Phi(t_n) - \Phi_n\| &\leq Ch^4 \|\partial^3 \Lambda\|, \\ \|\dot{\Lambda}(t_n) - \dot{\Lambda}_n\| &\leq Ch^2 \|\partial^3 \Lambda\|. \end{aligned}$$

Es gilt also

$$\begin{aligned} \check{\mathcal{A}}_n - \widetilde{\mathcal{A}}_n &= \int_{-1}^1 E(\Phi(t_n) + \theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}(t_n)) \\ &\quad - E(\Phi_n + \theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n) d\theta \bullet W_n \\ &= \mathcal{O}(h^2 \|\partial^3 \Lambda\| \|W\|). \end{aligned}$$

Dabei haben wir $\frac{h^2}{\varepsilon} \leq 1$ verwendet.

$\check{\mathcal{B}}_n - \widetilde{\mathcal{B}}_n$ und $\check{\mathcal{C}}_n - \widetilde{\mathcal{C}}_n$ erzeugen auf Grund des Vorfaktors h^2 nur Fehler höherer Ordnung und wir erhalten die Beschränkung Ch^3/δ^3 für (3.38).

4. Schritt: Abschätzung von (3.39)

Die Integrale mit linearer Phasenapproximation haben wir analytisch integriert, so dass $\widetilde{\mathcal{B}}_n$ und $\widetilde{\mathcal{C}}_n$ keinen weiteren Fehler erzeugen. Mit Hilfe der Fehlerfunktionen lässt sich dies für $\widetilde{\mathcal{A}}_n$ ebenfalls realisieren und wir könnten den Beweis hier abschliessen. Der durch die sukzessive partielle Integration entstehende Fehler ist allerdings mit (3.21), (3.22) und (3.23) schnell abgeschätzt. Zunächst schreiben wir

$$\begin{aligned} \widetilde{\mathcal{A}}_n - \mathcal{A}_n &= E(\Phi_n) \bullet \left(\int_{-1}^1 E \left(\theta h \Lambda(t_n) + \frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n \right) d\theta \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\varepsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \bullet \mathcal{E}_0^A - h D^-(\Lambda(t_n)) \bullet D(\dot{\Lambda}_n) \bullet \mathcal{I}_1^A \right) \right) \bullet W_n. \end{aligned}$$

Aus (3.22) und (3.23) folgt

$$\int_{-1}^1 \theta E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet E\left(\frac{1}{2} \theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n\right) d\theta = \mathcal{I}_1^A + \mathcal{O}(h/\delta) + \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2)$$

und damit

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 E(\theta h \Lambda(t_n)) \bullet E\left(\frac{1}{2}\theta^2 h^2 \dot{\Lambda}_n\right) d\theta \\ &= \left(\frac{\epsilon}{i\hbar} D^-(\Lambda(t_n)) \bullet \mathcal{E}_0^A - h D^-(\Lambda(t_n)) \bullet D(\dot{\Lambda}_n) \bullet \mathcal{I}_1^A \right) \\ & \quad + \mathcal{O}(h^2/\delta) + \mathcal{O}(\epsilon h/\delta^2) \end{aligned}$$

Insgesamt gilt mit $\epsilon < h$

$$\|\tilde{\mathcal{A}}_n - \mathcal{A}_n\| \leq C \left(\frac{h}{\delta}\right)^2 \|W\| \leq C \frac{h^2}{\delta^3},$$

und der lokale Fehler in η ist wie gewünscht durch Ch^3/δ^3 beschränkt. Für den Startschritt gilt eine Beschränkung von Ch^2 . \square

3.5.2 Beweis von Theorem 5

Der Beweis hier verläuft vollständig analog zu [16], weshalb wir die Darstellung im Folgenden etwas verkürzen.

Zunächst muss das Zweischrittverfahren als Einschrittverfahren in einem Raum doppelter Dimension dargestellt werden. Wir verwenden dafür die Bezeichnungen

$$\begin{aligned} v(t_{k+1}) &= \begin{pmatrix} \eta(t_{k+1}) \\ \eta(t_k) \end{pmatrix}, \quad v_{k+1} = \begin{pmatrix} \eta_{k+1} \\ \eta_k \end{pmatrix}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{M}_k &= \begin{pmatrix} \mathcal{A}_k + h\tilde{\mathcal{B}}_k + h\tilde{\mathcal{C}}_k & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

In dieser Notation hat die adiabatische Mittelpunktsregel die Gestalt

$$v_{k+1} = (J + h\mathcal{M}_k)v_k \tag{3.43}$$

und der lokale Fehler in der Einschrittformulierung wird mit

$$d_{k+1} = (J + h\mathcal{M}(t_k))v(t_k) - v(t_{k+1}) = \mathcal{O}(h^3)$$

bezeichnet. Dabei ist $\mathcal{M}(t_k)$ genauso definiert wie \mathcal{M}_k , allerdings wird der exakte Wert $\Phi(t_k)$ anstelle der Approximation Φ_k in den Ausdrücken \mathcal{A}_k , $\tilde{\mathcal{B}}_k$ und $\tilde{\mathcal{C}}_k$ verwendet.

Hieraus ergibt sich für den globalen Fehler $e_n = v_n - v(t_n)$ nach n Schritten des Verfahrens

$$\begin{aligned} e_{n+1} &= v_{n+1} - v(t_{n+1}) \\ &= (J + h\mathcal{M}_n)v_n - (J + h\mathcal{M}(t_n))v(t_n) + d_{n+1} \\ &= Je_n + h\mathcal{M}_n e_n + d_{n+1} + c_{n+1} \end{aligned}$$

mit $c_{n+1} = h(\mathcal{M}_n - \mathcal{M}(t_n))v(t_n)$.

Durch Induktion lässt sich leicht zeigen, dass gilt

$$e_{n+1} = J^n e_1 + h \sum_{k=1}^n J^{n-k} \mathcal{M}_k e_k + \sum_{k=2}^{n+1} J^{n+1-k} d_k + \sum_{k=2}^{n+1} J^{n+1-k} c_k. \quad (3.44)$$

In $c_{k+1} = h(\mathcal{M}_k - \mathcal{M}(t_k))v(t_k)$ geht im wesentlichen der Fehler durch die Verwendung der Simpsonregel ein, den wir bereits als $\Phi_n - \Phi(t_n) = \mathcal{O}(h^4)$ kennen gelernt hatten. Es folgt $c_k = \mathcal{O}(h^4)$ und damit ist die Norm der letzten Summe in (3.44) durch Ch^3 beschränkt.

Für d_k gilt $d_k = \mathcal{O}(h^3)$ und damit

$$\left\| \sum_{k=2}^{n+1} J^{n+1-k} d_k \right\| \leq Ch^2.$$

Der Fehler im Startschritt, der mit e_1 bezeichnet wird, ist ebenfalls durch Ch^2 beschränkt und es folgt für (3.44) mit $M = \max_k \|\mathcal{M}_k\|$ und $\|J\| = 1$:

$$\|e_{n+1}\| \leq hM \sum_{k=2}^n \|e_k\| + Ch^2.$$

Diese Darstellung eröffnet uns die Möglichkeit, das diskrete Gronwall-Lemma anzuwenden und wir schliessen für n mit $nh \leq \text{Const.}$

$$\|e_{n+1}\| \leq Ch^2.$$

Dies entspricht wegen $\|\eta(t_n) - \eta_n\| \leq \|e_n\|$ der ersten Fehlerabschätzung von Theorem 5.

Die weiteren Abschätzungen ergeben sich wie gewohnt durch Rücktransformation und Reskalierung, wodurch die Positionen wieder eine Potenz von ε gegenüber η und den Impulsen gewinnen. \square

3.6 Fehleranalyse: Beweis von Theorem 6

Der einzig neue Fehler, der beim adiabatischen Magnus-Verfahren im Vergleich zur adiabatischen Mittelpunktsregel auftaucht, ist der Fehler durch den Abbruch der Magnus-Reihe.

Die verwendeten Taylor-Reihen, Differenzenquotienten, Phasenapproximationen und Annäherungen an die Integrale bleiben genau dieselben wie zuvor.

Wir ersparen uns deshalb das erneute Aufschreiben und Abschätzen dieser Differenzen und konzentrieren uns ausschließlich auf den Fehler, der durch den Abbruch der Magnus-Reihe entsteht.

Wir brechen die Magnus-Reihe nach dem ersten Kommutator ab, was einen in der Literatur wohlbekannten lokalen Fehler von $\mathcal{O}(h^5)$ verursacht, solange das Produkt von Schrittweite und maximaler Frequenz klein bleibt. Allerdings ist diese Abschätzung nicht gleichmäßig in ε .

Unter Einbeziehung von $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$ bleibt uns aber immer noch ein lokaler Fehler von $\mathcal{O}(h^3)$, da die Restterme der Reihe mindestens drei Integrale enthalten. Durch jede Integration der oszillatorischen Exponentialfunktionen entsteht ein Faktor ε/h , wohingegen die Integranden selbst gleichmäßig in ε beschränkt sind.

Damit lässt sich der durch den Reihenabbruch verursachte Fehler durch Ch^3 abschätzen mit einer von ε unabhängigen Konstanten C .

Dieser lokale Fehler geht in die gleiche Fehlerakkumulation ein wie die, die wir im vorigen Abschnitt durchgeführt haben und wir erhalten das gleiche Ergebnis für beide adiabatischen Integriatoren. \square

Kapitel 4

Hamilton-Systeme mit lösungsabhängigen hohen Frequenzen

In diesem Kapitel betrachten wir Hamiltonsysteme mit lösungsabhängigen hohen Frequenzen, das heißt wir gehen von einer Hamiltonfunktion

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q) + \frac{1}{\varepsilon^2} V(q) \quad (4.1)$$

aus, deren Potential $\varepsilon^{-2}V(q)$ nun von den Positionen $q(t)$ abhängt (siehe [8], Kapitel XIV). Dieses Potential wirkt auf einige der Lösungskomponenten ein, so dass wir wieder mehrere Skalen in der Bewegung des Systems auffinden können. Diese Klasse von Problemen wird analytisch auch in [26, 28, 2] untersucht.

Zunächst illustrieren wir das Problemfeld des Kapitels und geben ein Beispiel für ein typisches mechanisches Problem dieser Klasse.

Natürlich versuchen wir, möglichst viel Theorie aus dem zeitabhängigen Fall hier erneut einzusetzen und beginnen dabei mit den Transformationen.

4.1 Problemfeld

Wir betrachten ein Hamiltonsystem mit Hamiltonfunktion (4.1), wobei $M(q)$ eine symmetrisch positiv definite Massematrix ist, die glatt von den Positionen $q \in \mathbb{R}^n$ abhängt. U sei wieder ein glattes Potential und das beschränkende Potential $V(q)$

soll die folgenden Eigenschaften haben:

Die glatte Funktion $V : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ nimmt ihren minimalen Wert 0 auf einer d -dimensionalen Mannigfaltigkeit \mathcal{V} an, also

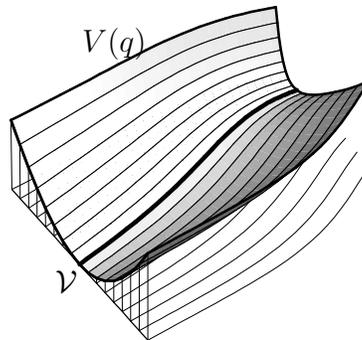
$$\mathcal{V} = \{q \in D \mid V(q) = \min V = 0\}. \quad (4.2)$$

Für alle $q \in \mathcal{V}$ gilt daher $\nabla V(q) = 0$. Weiter ist das Potential V in einer Umgebung von \mathcal{V} strikt konvex entlang aller Richtungen, die nicht tangential zu \mathcal{V} verlaufen, das heißt es existiert ein $\alpha > 0$, so dass die Hessematrix $\nabla^2 V(q)$ für alle $q \in \mathcal{V}$ die folgende Ungleichung erfüllt:

$$v^T \nabla^2 V(q) v \geq \alpha v^T M(q) v \quad (4.3)$$

für alle v im $M(q)$ -orthogonalen Komplement des Tangentialraumes $T_q \mathcal{V}$.

Die d -dimensionale Mannigfaltigkeit \mathcal{V} wird durch $m = n - d$ unabhängige Bedingungen lokal beschrieben und V wirkt sich demnach auf Bewegungen weg von dieser Mannigfaltigkeit aus. Wir sehen in nebenstehender Abbildung die Illustration einer solchen Situation.



Typischerweise erfüllen semiquadratische Potentiale der Form

$$V(q) = \frac{1}{2} q_1^T A(q_0) q_1 \quad (4.4)$$

mit $q = (q_0, q_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$ und einer symmetrisch positiv definiten Matrix $A(q_0)$ obige Bedingungen mit $\mathcal{V} = \mathbb{R}^d \times 0$.

Ein Beispiel dieser Klasse ist das Doppelpendel, bei dem zwei (im Allgemeinen m) Massepunkte mit steifen Federn verbunden sind.

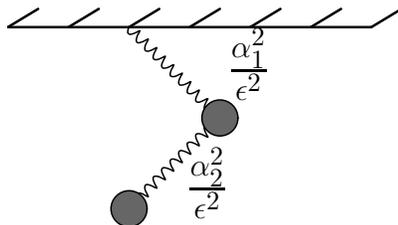


Abbildung 4.1: doppelpertes Federpendel

α_i^2/ε^2 ($i = 1, \dots, m$) sind dabei die Federkonstanten und die Bewegung des Systems ist eindeutig bestimmt durch die Koordinaten des Aufhängepunktes der ersten Feder, die Winkel φ_i , welche die i -te Feder in Bezug zur Senkrechten einnimmt und die Auslenkungen d_i der i -ten Feder. Das beschränkende Potential lautet in dieser Situation

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \alpha_i^2 d_i^2,$$

woraus wir erkennen, dass die Mannigfaltigkeit \mathcal{V} beschrieben werden kann durch $d_1 = \dots = d_m = 0$. Dies entspricht dem Ruhezustand des Systems, in dem keine der Federn ausgelenkt wird. Die Variablen d_i beschreiben die Frequenzen der Vibrationen innerhalb einer solchen Federkette und hängen hier von den Winkeln φ_i ab. Wir unterscheiden damit die Auslenkungen d_i als schnelle Variablen von den Winkeln φ_i die sich auf einer langsameren Skala bewegen.

Im Fall des Doppelpendels können wir die beteiligten Matrizen direkt angeben. Dazu verwenden wir l_i , $i = 1, 2$, für die Ruhelänge der jeweiligen Feder, m_i für die Masse des jeweiligen Massepunktes und verkürzen mit $\mathbf{s} := \sin(\varphi_1 - \varphi_2)$ bzw. $\mathbf{c} := \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ die Schreibweise. Es gilt mit $q_0 = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$ und $q_1 = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q) + \frac{1}{2\varepsilon^2} q_1^T A q_1,$$

wobei

$$M(q) = \begin{pmatrix} (m_1 + m_2)(d_1 + l_1)^2 & m_2(d_1 + l_1)(d_2 + l_2)\mathbf{c} & 0 & -m_2(d_1 + l_1)\mathbf{s} \\ m_2(d_1 + l_1)(d_2 + l_2)\mathbf{c} & m_2(d_2 + l_2)^2 & m_2(d_2 + l_2)\mathbf{s} & 0 \\ 0 & m_2(d_2 + l_2)\mathbf{s} & m_1 + m_2 & m_2\mathbf{c} \\ -m_2(d_1 + l_1)\mathbf{s} & 0 & m_2\mathbf{c} & m_2 \end{pmatrix},$$

$$U(q) = -(d_1 + l_1)(m_1 + m_2)g \cos \varphi_1 - (d_2 + l_2)m_2g \cos \varphi_2,$$

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1^2 & 0 \\ 0 & \alpha_2^2 \end{pmatrix}.$$

Abbildung 4.2 zeigt die Bewegung eines solchen doppelten Federpendels, wenn wir die beiden Massepunkte ($m_1 = m_2 = 1$) mit Federn der Ruhelänge $l_1 = l_2 = 1$ verbinden. Die obere Feder hat dabei die Federkonstante $1/\varepsilon^2$, die untere Feder $2/\varepsilon^2$ mit $\varepsilon = 0.01$.

In Abbildung 4.2 sehen wir die Entwicklung der Positionen des Systems für ein Zeitintervall $[0, 10]$ und können die verschiedenen Zeitskalen der Bewegung ausmachen.

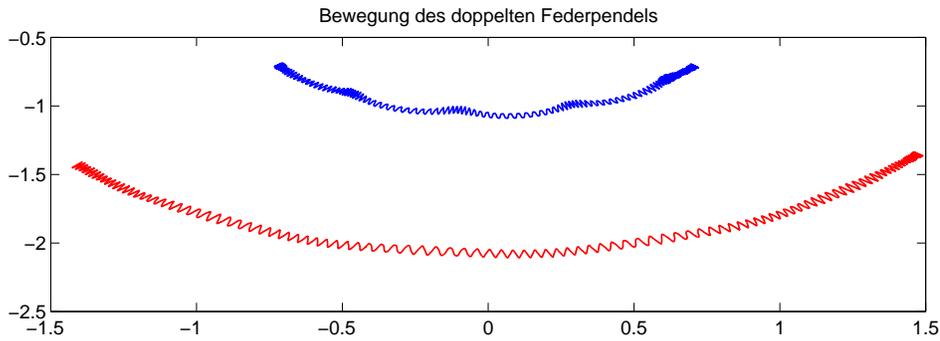


Abbildung 4.2: Positionen der Massepunkte des doppelten Federpendels; $\varepsilon = 0.01$

Im Beispiel des doppelten Federpendels erhalten wir sogar $V(q) = \frac{1}{2} q_1^T A q_1$ mit einer konstanten Matrix A ; wir wollen uns in diesem Kapitel jedoch an den allgemeineren Fall eines Potentials $V(q) = \frac{1}{2} q_1^T A(q_0) q_1$ wie in (4.4) halten.

Gegenüber dem eingangs durch (4.2) und (4.3) beschriebenen noch allgemeineren beschränkenden Potential stellt dies keine Einschränkung dar. Wie das folgende Lemma aus [23] zeigt, beschreibt (4.4) schon die allgemeine Situation in geeigneten Koordinaten.

Lemma 8 *Unter den Bedingungen (4.2) und (4.3) existiert eine glatte lokale Koordinatentransformation $q = \chi(y)$, so dass*

$$V(q) = \frac{1}{2} y_1^T A(y_0) y_1 \quad \text{für } q = \chi(y),$$

wobei $A(y_0)$ eine symmetrisch positiv definite $m \times m$ -Matrix bezeichnet und $y = (y_0, y_1)$ in $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$ nahe 0 ist.

Beweis: Wir wählen zunächst lokale Koordinaten $x = (x_0, x_1)$ nahe 0 in $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$ mit $q = \psi(x)$, so dass $q = \psi(x) \in \mathcal{V}$ genau dann erfüllt ist, wenn $x_1 = 0$ gilt.

Für $q = \psi(x)$ schreiben wir $\widehat{V}(x) = V(q)$ und schließen aus (4.2)

$$\widehat{V}(x_0, 0) = 0 \quad \text{und} \quad \nabla \widehat{V}(x_0, 0) = 0.$$

Weiter folgt aus (4.3), dass $A(x_0) := \nabla_{x_1}^2 \widehat{V}(x_0, 0)$ positiv definit ist.

Wir verwenden nun eine weitere Koordinatentransformation, die allerdings nahe der Identität ist:

$$y_0 = x_0 \quad \text{und} \quad y_1 = \mu(x)x_1.$$

Den reellen Faktor $\mu(x)$ (der für x_1 nahe 0 nahe an 1 sein soll) bestimmen wir nun so, dass gilt

$$\frac{1}{2} y_1^T A(y_0) y_1 = \widehat{V}(x_0, x_1).$$

Dazu entwickeln wir die rechte Seite in eine Taylorreihe,

$$\widehat{V}(x_0, x_1) = \widehat{V}(x_0, 0) + x_1^T \nabla_{x_1} \widehat{V}(x_0, 0) + \frac{1}{2} x_1^T A(x_0) x_1 + r(x),$$

und es folgt

$$\frac{1}{2} \mu(x)^2 x_1^T A(x_0) x_1 = \widehat{V}(x_0, 0) + x_1^T \nabla_{x_1} \widehat{V}(x_0, 0) + \frac{1}{2} x_1^T A(x_0) x_1 + r(x).$$

Mit

$$\mu(x) = \sqrt{1 + \frac{2r(x)}{x_1^T A(x_0) x_1}}$$

ist ein μ gefunden, welches auf Grund von $r(x) = \mathcal{O}(\|x_1\|^3)$ auch die gewünschten Eigenschaften (nahe 1 für x_1 nahe 0) hat. \square

Im Gegensatz zu den Transformationen aus Kapitel 1.4, die alle mit Standardroutinen aus der numerischen linearen Algebra durchgeführt werden können, ist die Transformation $q = \psi(x)$ von q nach $x = (x_0, x_1)$ mit $V(q) = 0 \Leftrightarrow x_1 = 0$ nicht konstruktiv, falls wir ausschließlich den Ausdruck für das Potential V kennen. Die Transformation der lokalen Koordinaten von x nach y lässt sich hingegen wie gewohnt numerisch bewerkstelligen.

In vielen Situationen können wir außerdem die Mannigfaltigkeit \mathcal{V} durch Bedingungen $g(q) = 0$ beschreiben und damit $x_1 = g$ zu einem vollständigen Satz Koordinaten erweitern (siehe [8], Kapitel XIV).

In jedem Fall lässt sich die Transformation $q = \chi(y)$ in den Positionskoordinaten zu einer kanonischen Transformation erweitern. Wir setzen dazu wie gewohnt $p_y = \chi'(y)^T p$ für die konjugierten Impulse und betrachten im Folgenden die Hamiltonfunktion mit semiquadratischem Potential V :

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q) + \frac{1}{2\varepsilon^2} q_1^T A(q_0) q_1. \quad (4.5)$$

$M(q)$ und $A(q_0)$ sind dabei symmetrische positiv definite Matrizen und $U(q)$ ein entsprechend glattes Potential. Wir können bereits in diesem Stadium zwischen schnellen und langsamen Positionen unterscheiden. Die schnellen Positionen $q_1(t)$ sind dabei auf Grund der beschränkten Gesamtenergie $H(p, q) < \text{Const.}$ von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$, während $q_0(t) = \mathcal{O}(1)$ gilt.

Wir befinden uns also bereits in einer Situation, in der schnelle und langsame Variablen unterschieden werden können. Von einer annähernden Separation der beiden Zeitskalen, wie wir sie in Kapitel 1.4 mit Hilfe der Transformationen erreicht haben, ist hier allerdings noch nichts zu sehen. Dies ist Ziel des nächsten Abschnitts.

4.2 Transformationen

Die kanonischen Transformationen aus Kapitel 1.4 und die Transformation in die adiabatischen Variablen η waren bereits im zeitabhängigen Fall von großer Bedeutung für die numerische Integration des Systems und dessen analytische Untersuchung. In diesem Abschnitt machen wir uns dies wieder zu Nutze und “recyclen” einige der zeitabhängigen Transformationen für den lösungsabhängigen Fall, wenn das Ergebnis auch etwas umständlicher zu notieren ist.

Theorem 7 *Es existieren symplektische Transformationen $(p, q) \rightarrow (\check{p}, \check{q})$, so dass die Hamiltonfunktion $H(p, q)$ aus (4.5) in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \check{H}(\check{p}, \check{q}) &= \frac{1}{2} \check{p}_0^T M_0(\check{q}_0)^{-1} \check{p}_0 + \frac{1}{2\varepsilon} \check{p}_1^T \Omega(\check{q}_0) \check{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon} \check{q}_1^T \Omega(\check{q}_0) \check{q}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} \check{p}^T R(\check{q}) \check{p} + U(T(\check{q}) \check{q}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix $M_0(\check{q}_0)$, einer Diagonalmatrix $\Omega(\check{q}_0)$, einer Transformationsmatrix $T(\check{q}_0)$ und einer symmetrischen Matrix $R(\check{q})$.

Der Ausdruck $\frac{1}{2} \check{p}^T R(\check{q}) \check{p}$ kann geschrieben werden als

$$\frac{1}{2} \check{p}^T R(\check{q}) \check{p} = \varepsilon^{1/2} c(\check{p}_0, \check{q}_0)^T \check{q}_1 + \check{p}_1^T L(\check{p}_0, \check{q}_0)^T \check{q}_1 + \varepsilon^{-1/2} \tau(\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1; \check{q}_0) + \rho(\check{p}, \check{q}) \quad (4.7)$$

mit einem Vektor c , einer Matrix L , einer Funktion τ , die trilinear in $\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1$ ist und einem Restterm der Größenordnung $\rho(\check{p}, \check{q}) = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ für $\check{p}_1, \check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ und die Situation getrennter Eigenfrequenzen.

Bemerkung: Da wir von einem System mit beschränkter Gesamtenergie ausgehen, gilt hier $\check{p}_1, \check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$, also ist der Kopplungsterm $\frac{1}{2}\check{p}^T R(\check{q})\check{p}$ im Fall getrennter Eigenfrequenzen von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Es ist durch die Transformationen also wieder gelungen, die Kopplung zwischen schnellen und langsamen Variablen auf eine Größe von $\mathcal{O}(\varepsilon)$ zu reduzieren.

Beweis: Der Beweis dieses Theorems ergibt sich wie in Kapitel 1.4 durch die sukzessive Konstruktion entsprechender Transformationen, deren Hintereinanderausführung wieder eine symplektische Transformation darstellt. Diese Konstruktion werden wir in den folgenden Lemmata ausführen. \square

Mit der ersten Transformation wird die Steifigkeitsmatrix in die Identität überführt.

Lemma 9 *Es existiert eine symplektische Transformation $q_0 = \tilde{q}_0$, $q_1 = C(\tilde{q}_0)\tilde{q}_1$, so dass die Hamiltonfunktion $H(p, q)$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{q}) = \frac{1}{2}\tilde{p}^T \tilde{M}(\tilde{q})^{-1}\tilde{p} + \frac{1}{2\varepsilon^2}\tilde{q}_1^T \tilde{q}_1 + \tilde{U}(\tilde{q}). \quad (4.8)$$

Beweis: Wir schreiben die Choleski-Zerlegung der Steifigkeitsmatrix $A(q_0)$ als

$$A(q_0) = C(q_0)^{-T}C(q_0)^{-1}$$

und transformieren die Positionen wie im Lemma angegeben. Durch

$$\begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{q}_0} C(\tilde{q}_0)\tilde{q}_1\right)^T \\ 0 & C(\tilde{q}_0)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \end{pmatrix}$$

wird diese Transformation zu einer symplektischen Transformation auf die Impulse erweitert.

Setzen wir

$$\mathcal{C}(\tilde{q}) = \begin{pmatrix} I & -\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{q}_0} C(\tilde{q}_0)\tilde{q}_1\right)^T C(\tilde{q}_0)^{-T} \\ 0 & C(\tilde{q}_0)^{-T} \end{pmatrix},$$

so erhalten wir die angegebene Hamiltonfunktion \tilde{H} mit

$$\tilde{M}(\tilde{q})^{-1} = \mathcal{C}(\tilde{q})^T M(\tilde{q}_0, C(\tilde{q}_0)\tilde{q}_1)^{-1} \mathcal{C}(\tilde{q}), \quad (4.9)$$

$$\tilde{U}(\tilde{q}) = U(\tilde{q}_0, C(\tilde{q}_0)\tilde{q}_1). \quad \square$$

Im nächsten Schritt werden wir die Blockmatrizen in der Nebendiagonalen der Massematrix \tilde{M} eliminieren und gleichzeitig die Abhängigkeit der neuen Massematrizen von \tilde{q}_1 reduzieren.

Lemma 10 *Es existiert eine symplektische Transformation $\tilde{q}_0 = \bar{q}_0 + G(\bar{q}_0)\bar{q}_1$, $\tilde{q}_1 = \bar{q}_1$, so dass die Hamiltonfunktion $\tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{q})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{q}) &= \frac{1}{2} \tilde{p}_0^T \bar{M}_0(\bar{q}_0)^{-1} \tilde{p}_0 + \frac{1}{2} \tilde{p}_1^T \bar{M}_1(\bar{q}_0)^{-1} \tilde{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon^2} \tilde{q}_1^T \tilde{q}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} \tilde{p}^T R(\tilde{q}) \tilde{p} + \bar{U}(\tilde{q}), \end{aligned} \quad (4.10)$$

wobei R eine glatte matrixwertige Funktion mit $R(\bar{q}_0, 0) = 0$ ist.

Bemerkung: Die Gleichung für \tilde{q}_0 stellt ein implizites Gleichungssystem in \bar{q}_0 dar, welches gegebenenfalls mit dem Newton-Verfahren gelöst werden muss.

Beweis: Wir schreiben die Massematrix $\tilde{M}(\tilde{q})$ als

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} M_{00} & M_{01} \\ M_{10} & M_{11} \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

und setzen

$$G(\bar{q}_0) = -M_{00}(\bar{q}_0, 0)^{-1} M_{01}(\bar{q}_0, 0).$$

Durch

$$\begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I + \left(\frac{\partial}{\partial \bar{q}_0} G(\bar{q}_0) \bar{q}_1 \right)^T & 0 \\ G(\bar{q}_0)^T & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \end{pmatrix} =: \mathcal{G}(\bar{q})^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{p}_0 \\ \tilde{p}_1 \end{pmatrix}$$

wird die im Lemma angegebene Transformation zu einer symplektischen Transformation erweitert.

Es gilt

$$\tilde{M}(\tilde{q}_0, \tilde{q}_1) = \tilde{M}(\bar{q}_0, 0) + \left(\tilde{M}(\bar{q}_0 + G(\bar{q}_0)\bar{q}_1, \bar{q}_1) - \tilde{M}(\bar{q}_0, 0) \right)$$

und wir setzen $\tilde{M}(\bar{q}_0) = \tilde{M}(\bar{q}_0, 0)$ sowie $\tilde{M}_*(\bar{q}_0, \bar{q}_1) = \tilde{M}(\bar{q}_0 + G(\bar{q}_0)\bar{q}_1, \bar{q}_1) - \tilde{M}(\bar{q}_0, 0)$ mit $\|\tilde{M}_*(\bar{q}_0, \bar{q}_1)\| = \mathcal{O}(\|\bar{q}_1\|) = \mathcal{O}(\varepsilon)$.

Für den ersten Term der Hamiltonfunktion gilt dann

$$\frac{1}{2} \tilde{p}^T \tilde{M}(\tilde{q})^{-1} \tilde{p} = \frac{1}{2} \tilde{p}^T \mathcal{G}(\bar{q})^T \tilde{M}(\bar{q}_0)^{-1} \mathcal{G}(\bar{q}) \tilde{p} + \frac{1}{2} \tilde{p}^T \mathcal{G}(\bar{q})^T N_1(\bar{q}) \mathcal{G}(\bar{q}) \tilde{p}$$

mit $N_1(\bar{q}_0, 0) = 0$. Wir setzen

$$\bar{M}_0(\bar{q}_0) = M_{00}(\bar{q}_0, 0), \quad \bar{M}_1(\bar{q}_0) = \left(M_{11} - M_{10}M_{00}^{-1}M_{01} \right)(\bar{q}_0, 0),$$

und erhalten

$$\frac{1}{2} \bar{p}^T \mathcal{G}(\bar{q})^T \tilde{M}(\bar{q}_0)^{-1} \mathcal{G}(\bar{q}) \bar{p} = \frac{1}{2} \bar{p}^T \begin{pmatrix} \bar{M}_0(\bar{q}_0) & 0 \\ 0 & \bar{M}_1(\bar{q}_0) \end{pmatrix} \bar{p} + \frac{1}{2} \bar{p}^T N_2(\bar{q}) \bar{p}$$

mit $N_2(\bar{q}_0, 0) = 0$, da $N_2(\bar{q})$ eine Summe aus Termen darstellt, die linear bzw. quadratisch in \bar{q}_1 sind. Insgesamt ergibt sich obige Hamiltonfunktion mittels

$$R(\bar{q}) = \mathcal{G}(\bar{q})^T N_1(\bar{q}) \mathcal{G}(\bar{q}) + N_2(\bar{q}), \quad (4.12)$$

$$\bar{U}(\bar{q}) = U(\bar{q}_0 + G(\bar{q}_0)\bar{q}_1, C(\bar{q}_0 + G(\bar{q}_0)\bar{q}_1)\bar{q}_1). \quad \square$$

Mit der nächsten Transformation wird die Massematrix $\bar{M}_1(\bar{q}_0)$ der schnellen Variablen diagonalisiert.

Lemma 11 *Es existiert eine symplektische Transformation $\bar{q}_0 = \hat{q}_0$, $\bar{q}_1 = Q(\hat{q}_0)\hat{q}_1$, $Q(\hat{q}_0)$ orthogonal, so dass die Hamiltonfunktion $\bar{H}(\bar{p}, \bar{q})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat*

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) &= \frac{1}{2} \hat{p}_0^T \hat{M}_0(\hat{q}_0)^{-1} \hat{p}_0 + \frac{1}{2} \hat{p}_1^T \Omega(\hat{q}_0)^2 \hat{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon^2} \hat{q}_1^T \hat{q}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} \hat{p}^T \hat{R}(\hat{q}) \hat{p} + \hat{U}(\hat{q}). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Für \hat{R} gilt zwar immer noch $\hat{R}(\hat{q}_0, 0) = 0$, das heißt $\hat{R} = \mathcal{O}(\hat{q}_1)$, allerdings ausschließlich im Fall getrennter Eigenfrequenzen. Bei Fastkreuzungen kann dieser Term groß werden.

Beweis: Wir diagonalisieren

$$\bar{M}_1(\bar{q}_0) = Q(\bar{q}_0) \Omega(\bar{q}_0)^{-2} Q(\bar{q}_0)^T \quad (4.14)$$

mit der Diagonalmatrix $\Omega(\bar{q}_0) = \text{diag}(\omega_j(\bar{q}_0))$ der Frequenzen und einer orthogonalen Matrix $Q(\bar{q}_0)$, die glatt von \bar{q}_0 abhängt, falls die Frequenzen ω_j voneinander getrennt sind.

Wir transformieren die Positionen wie angegeben und erhalten durch

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}_0} Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1 \right)^T \\ 0 & Q(\hat{q}_0)^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{p}_0 \\ \bar{p}_1 \end{pmatrix}$$

eine symplektische Transformation.

Die Matrix

$$Y(\hat{q}) = \left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}_0} Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1 \right)^T Q(\hat{q}_0) \quad (4.15)$$

ist von der Größenordnung $\mathcal{O}(\hat{q}_1)$, dennoch müssen wir diesen Ausdruck im Auge behalten. Bei Fastkreuzungen der Eigenwerte zeigt er ein ähnliches Verhalten wie $\dot{Q}(t)Q(t)$ im zeitabhängigen Fall, das heißt er wird sehr schnell sehr groß und fällt nach der vermiedenen Kreuzung schnell wieder ab. Wir betrachten deshalb die assoziierte Matrix

$$X(\hat{q}) = \begin{pmatrix} 0 & X_{01} \\ X_{10} & X_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\bar{M}_0^{-1}Y \\ -Y^T \bar{M}_0^{-1} & Y^T \bar{M}_0^{-1}Y \end{pmatrix}$$

und setzen

$$\hat{Q}(\hat{q}) = \begin{pmatrix} I & -Y(\hat{q}) \\ 0 & Q(\hat{q}_0) \end{pmatrix}.$$

Dadurch erhalten wir die angegebene Hamiltonfunktion mit

$$\begin{aligned} \hat{M}_0(\hat{q}_0) &= \bar{M}_0(\hat{q}_0), \\ \hat{R}(\hat{q}) &= \hat{Q}(\hat{q})^T R(\hat{q}_0, Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1) \hat{Q}(\hat{q}) + X(\hat{q}), \\ \hat{U}(\hat{q}) &= U\left(\hat{q}_0 + G(\hat{q}_0)Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1, C(\hat{q}_0 + G(\hat{q}_0)Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1) Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1\right). \quad \square \end{aligned} \quad (4.16)$$

Mit der letzten kanonischen Transformation reskalieren wir wieder die schnellen Positionen und Impulse.

Lemma 12 *Es existiert eine kanonische Transformation $\hat{q}_0 = \check{q}_0$, $\hat{q}_1 = \varepsilon^{1/2} \Omega(\check{q}_0)^{1/2} \check{q}_1$, so dass die Hamiltonfunktion $\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})$ in den neuen Koordinaten folgende Form hat ($\hat{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon)$ impliziert $\check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$):*

$$\begin{aligned} \check{H}(\check{p}, \check{q}) &= \frac{1}{2} \check{p}_0^T \check{M}_0(\check{q}_0)^{-1} \check{p}_0 + \frac{1}{2\varepsilon} \check{p}_1^T \Omega(\check{q}_0) \check{p}_1 + \frac{1}{2\varepsilon} \check{q}_1^T \Omega(\check{q}_0) \check{q}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} \check{p}^T \check{R}(\check{q}) \check{p} + U(T(\check{q}) \check{q}). \end{aligned}$$

Der Ausdruck $\frac{1}{2}\check{p}^T\check{R}(\check{q})\check{p}$ kann geschrieben werden als

$$\frac{1}{2}\check{p}^T\check{R}(\check{q})\check{p} = \varepsilon^{1/2}c(\check{p}_0, \check{q}_0)^T\check{q}_1 + \check{p}_1^T L(\check{p}_0, \check{q}_0)^T\check{q}_1 + \varepsilon^{-1/2}\tau(\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1; \check{q}_0) + \rho(\check{p}, \check{q})$$

mit einem Vektor c , einer Matrix L , einer Funktion τ , die trilinear in $\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1$ ist und einem Restterm der Größenordnung $\rho(\check{p}, \check{q}) = \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ für $\check{p}_1, \check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ und die Situation getrennter Eigenfrequenzen.

Beweis: Wir erweitern die Transformation der Positionen wieder auf die Impulse mittels

$$\begin{pmatrix} \check{p}_0 \\ \check{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & \varepsilon^{1/2} \left(\frac{\partial}{\partial \check{q}_0} \Omega(\check{q}_0)^{1/2} \check{q}_1 \right)^T \\ 0 & \varepsilon^{1/2} \Omega(\check{q}_0)^{1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \end{pmatrix}.$$

Mit $\check{T}(\check{q}_0) = G(\check{q}_0)Q(\check{q}_0)\Omega(\check{q}_0)^{1/2}$ definieren wir

$$T(\check{q}) = (T_0 | \varepsilon^{1/2}T_1) = \begin{pmatrix} I & \varepsilon^{1/2}\check{T}(\check{q}_0) \\ 0 & \varepsilon^{1/2}C(\check{q}_0 + \varepsilon^{1/2}\check{T}(\check{q}_0)\check{q}_1)Q(\check{q}_0)\Omega(\check{q}_0)^{1/2} \end{pmatrix}$$

und erhalten dadurch

$$\hat{U}(\hat{q}) = U(T(\check{q})\check{q}).$$

Dabei ist $U(T(\check{q}_0, \check{q}_1)\check{q}) = U(T(\check{q}_0, 0)\check{q}) + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2})$ in einer Situation mit getrennten Eigenfrequenzen.

Weiter definieren wir eine Matrix der Größenordnung $\mathcal{O}(\check{q}_1) = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ durch

$$\Theta(\check{q}) = \left(\frac{\partial}{\partial \check{q}_0} \Omega(\check{q}_0)^{1/2} \check{q}_1 \right)^T \Omega(\check{q}_0)^{-1/2}$$

und damit die Rücktransformation

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_0 \\ \hat{p}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & -\Theta(\check{q}) \\ 0 & \varepsilon^{-1/2}\Omega(\check{q}_0)^{-1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \check{p}_0 \\ \check{p}_1 \end{pmatrix}.$$

Es gilt nun

$$\frac{1}{2}\hat{p}_0^T\hat{M}_0(\hat{q}_0)\hat{p}_0 = \frac{1}{2}\check{p}_0^T\check{M}_0(\check{q}_0)\check{p}_0 + \frac{1}{2}\check{p}^TR_1(\check{q})\check{p}$$

mit der symmetrischen Matrix

$$R_1(\check{q}) = \begin{pmatrix} 0 & -\check{M}_0(\check{q}_0)^{-1}\Theta(\check{q}) \\ -\Theta(\check{q})^T\check{M}_0(\check{q}_0)^{-1} & \Theta(\check{q})^T\check{M}_0(\check{q}_0)^{-1}\Theta(\check{q}) \end{pmatrix} = \mathcal{O}(\check{q}_1)$$

und $\check{M}_0 = \hat{M}_0$.

Analog schließen wir für $\hat{p}^T R(\hat{q}) \hat{p}$

$$\hat{p}^T R(\hat{q}) \hat{p} = \check{p}^T R_2(\check{q}) \check{p} + \check{p}^T R_3(\check{q}) \check{p}$$

mit einer symmetrischen Matrix

$$R_2(\check{q}) = \begin{pmatrix} 0 & -R_{00}\Theta \\ -\Theta^T R_{00} & \Theta^T R_{00}\Theta - \varepsilon^{-1/2} \Omega^{-1/2} R_{10}\Theta - \varepsilon^{-1/2} \Theta^T R_{01}\Omega^{-1/2} \end{pmatrix} = \mathcal{O}(\check{q}_1)$$

im Fall getrennter Frequenzen. Dabei bezeichnen $R_{ij} = R_{ij}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1)$ die entsprechenden Blöcke von $R(\hat{q})$, für die $R_{ij}(\check{q}_0, 0) = 0$ gilt, die allerdings durch das Auftreten der Matrix Y auch groß werden können, wenn eine Fastkreuzung der Eigenfrequenzen stattfindet. Die Matrix $R_3(\check{q})$ ist zwar ebenfalls symmetrisch, durch das Auftreten negativer Potenzen von ε und die entsprechenden Blöcke von R allerdings weniger harmlos als die vorherigen,

$$R_3(\check{q}) = \begin{pmatrix} R_{00}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) & \varepsilon^{-1/2} R_{01}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \\ \varepsilon^{-1/2} \Omega^{-1/2} R_{10}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) & \varepsilon^{-1} \Omega^{-1/2} R_{11}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \end{pmatrix}.$$

Mit

$$\check{R}(\check{q}) = R_1(\check{q}) + R_2(\check{q}) + R_3(\check{q})$$

erreichen wir die im Lemma angegebene Hamiltonfunktion $\check{H}(\check{p}, \check{q})$ und es bleibt noch der Ausdruck $\check{p}^T \check{R}(\check{q}) \check{p}$ zu untersuchen. Auf Grund der negativen Potenzen von ε ist dabei vor allem der Term $\check{p}^T R_3(\check{q}) \check{p}$ zu beachten. Die weiteren Summanden R_1 und R_2 liefern nur kleinere Terme, die sich in R_3 subsummieren bzw. als Restterm $\rho(\check{p}, \check{q})$ zusammengefasst werden können. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \check{p}^T R_3(\check{q}) \check{p} &= \frac{1}{2} \check{p}_0^T R_{00}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \check{p}_0 + \varepsilon^{-1/2} \check{p}_1^T \Omega^{-1/2} R_{10}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \check{p}_0 \\ &\quad + \frac{1}{2} \varepsilon^{-1} \check{p}_1^T \Omega^{-1/2} R_{11}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \check{p}_1 \\ &= \varepsilon^{1/2} c(\check{p}_0, \check{q}_0)^T \check{q}_1 + \check{p}_1^T L(\check{p}_0, \check{q}_0)^T \check{q}_1 + \varepsilon^{-1/2} \tau(\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1; \check{q}_0) = \mathcal{O}(\varepsilon) \end{aligned}$$

für $\check{p}_1, \check{q}_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ und getrennte Eigenfrequenzen. Dabei ist c ein Vektor, L eine Matrix und τ eine Funktion, die trilinear in \check{p}_1, \check{p}_1 und \check{q}_1 ist. Da in dieser Situation auch $\Theta = \mathcal{O}(\check{q}_1) = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ gilt, schließen wir

$$\frac{1}{2} \check{p}^T R_1(\check{q}) \check{p} + \frac{1}{2} \check{p}^T R_2(\check{q}) \check{p} = \check{p}_1^T \check{L}(\check{p}_0, \check{q}_0) \check{q}_1 + \varepsilon^{1/2} \check{\tau}(\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1; \check{q}_0) + \check{\rho}(\check{p}, \check{q}).$$

$\check{\rho}(\check{p}, \check{q})$ ist dabei ein Term, der quadrilinear in $\check{p}_1, \check{p}_1, \check{q}_1$ und \check{q}_1 ist und den wir mit $\varepsilon^{1/2}\check{\tau}$ zu einem Restterm $\rho(\check{p}, \check{q})$ der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ zusammenfassen können. Die partiellen Ableitungen von ρ nach \check{p}_1 und \check{q}_1 sind von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^{3/2})$, diejenigen nach \check{p}_0 und \check{q}_0 behalten die ursprüngliche Größe von $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$. \square

Wir lassen alle Haken weg und betrachten die Bewegungsgleichungen des transformierten Systems

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= -\nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2} p_0^T M_0(q_0) p_0 + U(q_0, 0) \right) \\ &\quad - \nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2\varepsilon} p_1^T \Omega(q_0) p_1 + \frac{1}{2\varepsilon} q_1^T \Omega(q_0) q_1 \right) + f_0(p, q) \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$\dot{q}_0 = M_0(q_0)^{-1} p_0 + g_0(p, q) \quad (4.18)$$

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_1 \\ \dot{q}_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\varepsilon} \begin{pmatrix} 0 & -\Omega(q_0) \\ \Omega(q_0) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_1(p, q) \\ g_1(p, q) \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \end{pmatrix} &= -\nabla_q \left(\frac{1}{2} p^T R(q) p + U(T(q)q) - U(q_0, 0) \right) \\ \begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \end{pmatrix} &= R(q)p. \end{aligned}$$

Falls die Eigenfrequenzen getrennt bleiben und die Diagonalisierung glatt ist mit beschränkten Ableitungsmatrizen, erhalten wir $f_0 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, $g_0 = \mathcal{O}(\varepsilon)$, $f_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ und $g_1 = \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$. Mit (4.7) schreiben wir

$$\begin{aligned} f_1 &= -\varepsilon^{1/2}c - Lp_1 + \varepsilon^{-1/2}a(p_1, p_1; q_0) - \varepsilon^{1/2}T_1^T \nabla_q U(q_0, 0) + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2}) \\ g_1 &= L^T q_1 + \varepsilon^{-1/2}b(p_1, q_1; q_0) + \mathcal{O}(\varepsilon^{3/2}), \end{aligned} \quad (4.20)$$

wobei wir der Übersichtlichkeit wegen die Argumente in c , L und T_1 weglassen. Die Funktionen a und b sind bilinear in p_1 und q_1 .

Nun verlassen wir den kanonischen Rahmen und transformieren die schnellen Variablen p_1 und q_1 in die adiabatische Variable η . Dazu betrachten wir die diagonale Phasenmatrix $\Phi(t)$ entlang einer Lösung $(p(t), q(t))$ des Systems (4.17) - (4.19) und

definieren sie durch

$$\dot{\Phi}(t) = \Lambda(q_0(t)) \quad \text{mit} \quad \Lambda(q_0) = \begin{pmatrix} \Omega(q_0) & 0 \\ 0 & -\Omega(q_0) \end{pmatrix}.$$

Wieder diagonalisiert die konstante unitäre Matrix Γ aus (1.23) die führende Matrix der schnellen Differentialgleichungen (4.19) und wir erhalten

$$\begin{pmatrix} 0 & -\Omega(q_0) \\ \Omega(q_0) & 0 \end{pmatrix} = \Gamma i\Lambda(q_0) \Gamma^*.$$

Damit transformieren wir p_1 und q_1 zu

$$\eta(t) = \varepsilon^{-1/2} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \Phi(t)\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} p_1(t) \\ q_1(t) \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

und wieder zurück mit

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} = \varepsilon^{1/2} \begin{pmatrix} P_1 \\ Q_1 \end{pmatrix} \eta = \varepsilon^{1/2} \Gamma \exp\left(\frac{i}{\varepsilon} \Phi\right) \eta. \quad (4.22)$$

Für eine Lösung beschränkter Energie sind sowohl $p_1(t)$ als auch $q_1(t)$ in (4.19) von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ und folglich gilt für η wieder

$$\eta(t) = \mathcal{O}(1).$$

Die schnellen Bewegungsgleichungen lassen sich in den neuen Variablen schreiben als

$$\dot{\eta} = \varepsilon^{-1/2} \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \Phi\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} f_1 \\ g_1 \end{pmatrix} = \varepsilon^{-1/2} P_1^* f_1 + \varepsilon^{-1/2} Q_1^* g_1$$

mit den Argumenten $(p_0, \varepsilon^{1/2} P_1 \eta, q_0, \varepsilon^{1/2} Q_1 \eta)$ in den Funktionen f_1 und g_1 . Setzen wir die Ausdrücke für f_1 und g_1 aus (4.20) ein, so erhalten wir wie in (1.30)

$$\begin{aligned} \dot{p}_0 &= -\nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2} p_0^T M_0(q_0)^{-1} p_0 + U(q_0, 0) \right) \\ &\quad - \nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2} \eta^* P_1^* \Omega(q_0) P_1 \eta + \frac{1}{2} \eta^* Q_1^* \Omega(q_0) Q_1 \eta \right) + f_0, \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\dot{q}_0 = M_0(q_0)^{-1} p_0 + g_0, \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned}
\dot{\eta} &= \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) W(p_0, q_0) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) \eta \\
&\quad + \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon}\Phi\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} a(P_1\eta, P_1\eta; q_0) \\ b(P_1\eta, Q_1\eta; q_0) \end{pmatrix} \\
&\quad - P_1^* \left(c(p_0, q_0) + T_1(q_0, \varepsilon Q_1\eta)^T \nabla U(q_0, 0) \right) + r,
\end{aligned} \tag{4.25}$$

mit

$$W(p_0, q_0) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} L(p_0, q_0) - L(p_0, q_0)^T & L(p_0, q_0) + L(p_0, q_0)^T \\ L(p_0, q_0) + L(p_0, q_0)^T & L(p_0, q_0) - L(p_0, q_0)^T \end{pmatrix} \tag{4.26}$$

und dem Rest $r(p_0, \varepsilon^{1/2}P_1\eta, q_0, \varepsilon^{1/2}Q_1\eta) = \mathcal{O}(\varepsilon)$ sowie den Funktionen $f_0(p_0, \varepsilon^{1/2}P_1\eta, q_0, \varepsilon^{1/2}Q_1\eta)$ und $g_0(p_0, \varepsilon^{1/2}P_1\eta, q_0, \varepsilon^{1/2}Q_1\eta)$ der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ im Fall getrennter Eigenfrequenzen.

Die annähernde Separation der Zeitskalen ist also zumindest im Fall getrennter Eigenfrequenzen wieder gelungen. Im Gegensatz zum zeitabhängigen Fall gelingt sie allerdings nicht mehr rein mit Standardroutinen der numerischen linearen Algebra, wir benötigen gegebenenfalls das Newton-Verfahren, um die Massematrix zu zerlegen.

Die rechten Seiten der transformierten Differentialgleichungen sind aber auch hier wieder unabhängig von ε beschränkt.

Um den Nutzen der Transformationen zu veranschaulichen, betrachten wir das Beispiel des doppelten Federpendels. Abbildung 4.3 zeigt die ursprüngliche Variable $q_1(t)$ und die Realteile der transformierten Variablen $\eta_1(t)$, sowie $\eta_2(t)$ für $\varepsilon = 0.01$.

Im Gegensatz zur stark oszillierenden Ausgangsvariablen $q_1(t)$ zeigt $\eta(t)$ langsame Bewegungen um eine Konstante. Die Amplitude der Bewegungen liegt dabei bei $\mathcal{O}(\varepsilon)$, so dass wir η erneut als adiabatische Invariante vermuten können.

Für kleinere Werte von ε tritt der Effekt der Transformationen noch deutlicher zum Vorschein. In Abbildung 4.4 sehen wir die gleichen Variablen für $\varepsilon = 0.001$. Im Gegensatz zu den beschleunigten Oszillationen in den ursprünglichen Variablen wird die Bewegung in η kleiner, langsamer und glatter.

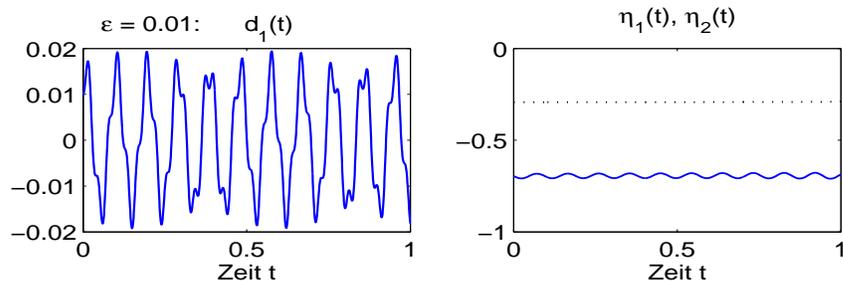


Abbildung 4.3: $q_1(t)$ (links) sowie Realteile von $\eta_1(t)$ (rechts, gepunktet) und $\eta_2(t)$ (rechts, durchgezogen); $\varepsilon = 0.01$.

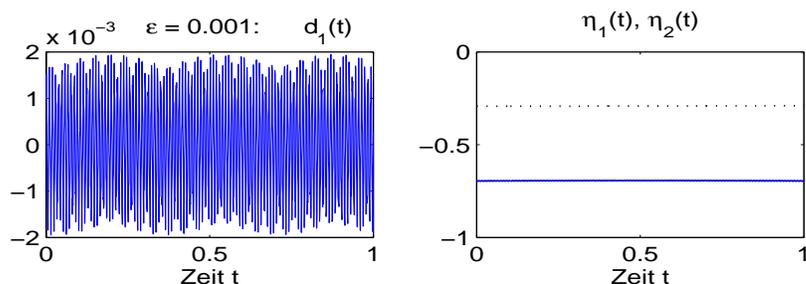


Abbildung 4.4: $q_1(t)$ (links) sowie Realteile von $\eta_1(t)$ (rechts, gepunktet) und $\eta_2(t)$ (rechts, durchgezogen); $\varepsilon = 0.001$.

Die Bilder legen nahe, dass wir $\eta(t)$ auch im frequenzabhängigen Fall als adiabatische Invariante identifizieren können. Dies ist allerdings nur unter etwas restriktiveren Bedingungen als in der zeitabhängigen Situation möglich, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden.

4.3 Adiabatische Invarianten

Die großen Analogien zwischen dem zeitabhängigen Fall aus Kapitel 1 und dem frequenzabhängigen Fall hier lassen vermuten und hoffen, dass η auch hier eine adiabatische Invariante darstellt. Um dies zu überprüfen, integrieren wir beide Seiten der Differentialgleichung für η (4.25) von t_0 bis t .

Die erste Zeile ist dabei eine alte Bekannte aus Abschnitt 1.5.1. Wir setzen wieder voraus, dass wir uns in der adiabatischen Situation befinden, in der die Eigenfrequenzen $\omega_j(t) := \omega_j(q_0(t))$ getrennt und von 0 weg beschränkt bleiben, also eine

Konstante $\delta > 0$ existiert, so dass für jedes Paar $\omega_j(t)$ und $\omega_k(t)$ mit $j \neq k$ und alle Zeiten t im Integrationsintervall gilt:

$$|\omega_j(t) - \omega_k(t)| \geq \delta \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\delta} \leq \text{Const.}, \quad \omega_j(t) \geq \text{Const.} \quad (4.27)$$

Da die Matrix W der ersten Zeile von (4.25) Nullen auf der Hauptdiagonalen trägt, ergeben sich durch Multiplikation mit den oszillatorischen Exponentialen von links und rechts ausschließlich oszillatorische Terme, deren Integral wir wie in Kapitel 1.5.1 durch $\mathcal{O}(\varepsilon)$ abschätzen können.

Genauso gehen wir bei der letzten Zeile von (4.25) vor. Wir integrieren partiell und nutzen aus, dass das Integral über $P_1^*(t)$ von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ ist. Die Ableitungen von p_0 , q_0 und η sind beschränkt falls (4.27) gilt. Auch mit dem Restterm r können wir so verfahren, zumal dieser von vornherein durch seine geringe Größe besticht.

Schwieriger wird es bei der mittleren Zeile von (4.25), welche die bilinearen Funktionen a und b enthält. Ein typischer Term dieser bilinearen Funktionen ist von folgender Gestalt: $\eta^* P_1^* R(p_0, q_0) P_1 \eta$ bzw. $\eta^* P_1^* R(p_0, q_0) Q_1 \eta$, mit einem $2m \times 2m \times 2m$ Tensor $R(p_0, q_0)$, der von oszillatorischen Exponentialen P_1 bzw. Q_1 eingerahmt wird. Unter dem Integral

$$\int_{t_0}^t \exp\left(-\frac{i}{\varepsilon} \Phi\right) \Gamma^* \begin{pmatrix} a(P_1 \eta, P_1 \eta; q_0) \\ b(P_1 \eta, Q_1 \eta; q_0) \end{pmatrix}$$

treffen also drei oszillatorische Exponentialfunktionen aufeinander und wir benötigen eine weitere Bedingung an die Eigenfrequenzen $\omega_j(t)$, wenn wir eine vergleichbare Abschätzung zu den anderen Termen erreichen wollen. Das Integral über die oszillatorischen Komponenten des Integranden können wir durch $\mathcal{O}(\varepsilon)$ abschätzen und wir sorgen mit der folgenden Nichtresonanzbedingung dafür, dass unser Integrand ausschließlich solche Komponenten enthält: gilt für alle j, k, l und alle möglichen Kombinationen von Vorzeichen

$$|\omega_j(t) \pm \omega_k(t) \pm \omega_l(t)| \geq \delta \quad (4.28)$$

mit einer positiven Konstanten δ unabhängig von ε , so ist das Integral über den mittleren Term unserer Differentialgleichung von der Größenordnung $\mathcal{O}(\varepsilon)$ und wir haben gezeigt:

Satz 6 Unter den Voraussetzungen (4.27) und (4.28) gilt für $\eta(t)$

$$\eta(t) = \eta(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (4.29)$$

gleichmäßig auf beschränkten Zeitintervallen. \square

Bemerkung: Wenn die Nichtresonanzbedingung (4.28) zu der folgenden Bedingung abgeschwächt wird,

$$\begin{aligned} \omega_j(t) \pm \omega_k(t) \pm \omega_l(t) \text{ besitzt } \forall j, k, l = 1, \dots, m \text{ und } \forall t \in [t_0, t_{end}] \\ \text{eine endliche Anzahl höchstens einfacher Nullstellen,} \end{aligned} \quad (4.30)$$

reduziert sich die Aussage des Satzes zu

$$\eta(t) = \eta(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2}) \quad \text{für } t \leq \text{Const.} \quad (4.31)$$

(siehe [8], Kapitel XIV).

Mit Satz 6 erhalten wir wieder die Wirkungen

$$I_j = |\eta_j|^2 \quad (j = 1, \dots, m) \quad (4.32)$$

als adiabatische Invarianten mit

$$I_j(t) = I_j(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad \text{für } t \leq \text{Const.} \quad (4.33)$$

im Fall von (4.29) und $I_j(t) = I_j(t_0) + \mathcal{O}(\varepsilon^{1/2})$ im Fall von (4.31).

Durch eine Fastkreuzung der Eigenfrequenzen oder eine Verletzung der Nichtresonanzbedingung können allerdings auch hier wieder $\mathcal{O}(1)$ Sprünge in $\eta(t)$ auftreten. Wir profitieren dennoch von der Definition der Wirkungen bzw. Invarianten, denn wir können mit ihrer Hilfe das System der langsamen transformierten Differentialgleichungen (4.23) und (4.24) vereinfachen. Es gilt

$$\frac{1}{2\varepsilon} p_1^T \Omega(q_0) p_1 + \frac{1}{2\varepsilon} q_1^T \Omega(q_0) q_1 = \sum_{j=1}^m I_j \omega_j(q_0)$$

und damit

$$\dot{p}_0 = -\nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2} p_0^T M_0(q_0)^{-1} p_0 + U(q_0, 0) \right) - \sum_{j=1}^m I_j \nabla_{q_0} \omega_j(q_0) + \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (4.34)$$

$$\dot{q}_0 = M_0(q_0)^{-1} p_0 + \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (4.35)$$

Vergleichen wir diese Bewegungsgleichungen mit dem beschränkenden System, welches durch die Hamiltonfunktion $\frac{1}{2}p^T M(q)^{-1}p + U(q)$ auf der Mannigfaltigkeit \mathcal{V} gegeben ist, wird die langsame Bewegung obigen Gleichungen zufolge gesteuert von dem zusätzlichen Potential $\sum_{j=1}^m I_j \omega_j(q_0)$, das von den Wirkungen I_j abhängt. Verschiedene Herleitungen und Diskussionen eines solchen Korrekturpotentials finden sich in [26, 28, 2].

Die Aussagen dieses Abschnitts galten alle ausschließlich unter der Voraussetzung, dass eine adiabatische Situation vorliegt, in der die Eigenfrequenzen deutlich getrennt bleiben und zusätzlich eine der Nichtresonanzbedingungen (4.28) bzw. (4.30) erfüllt ist. Im nächsten Abschnitt werden wir uns damit auseinandersetzen, was bei einer Verletzung dieser Bedingungen geschieht.

4.4 Dynamik von Fastkreuzungen

Im zeitabhängigen Fall haben wir bereits eingehend das Verhalten der Lösungen und einzelnen Matrizen untersucht, welches auftritt, wenn der minimale Abstand δ der Eigenfrequenzen in einem Punkt $q_0(t)$ so klein wird, dass $\delta^2 \leq \varepsilon$ gilt. Die rechte Seite der Differentialgleichung für η nimmt dabei Werte der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ an und η zeigt einen Sprung ebensolcher Höhe. Betrachten wir ausschließlich die Differentialgleichung in η , so erhalten wir hier das gleiche Ergebnis und beobachten das Auftreten von $\mathcal{O}(1)$ Sprüngen in den adiabatischen Invarianten I_j . Allerdings ist diese Gleichung gekoppelt mit den Differentialgleichungen für das langsame System, eine Tatsache, die im frequenzabhängigen Fall für das Auftreten völlig neuer Aspekte sorgt.

Wir betrachten die erste Zeile der Differentialgleichung für η aus (4.25) und schreiben sie wieder als

$$(E(\Phi) \bullet W(p_0, q_0)) \eta \quad \text{mit} \quad E(\Phi)_{kl} = \begin{cases} \exp\left(\frac{i}{\varepsilon}(\phi_l - \phi_k)\right) & \text{für } k \neq l \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Matrizen Φ und W hängen nun über die langsamen Positionen $q_0(t)$ bzw. die Impulse $p_0(t)$ von der Zeit ab. Während diese Abhängigkeit in W zu keinen größeren Auffälligkeiten führt, hat sie in Φ ganz erhebliche Auswirkungen, falls sich die Eigenfrequenzen zu nahe kommen. Wir verfolgen deshalb exemplarisch den Weg leicht gestörter Positionen $q_0(t)$ durch Φ in die adiabatische Variable η mittels Untersuchung der ersten Zeile von (4.25).

Eine Störung der Größenordnung ε in $q_0(t)$ führt zunächst zu einer gestörten Frequenzmatrix $\tilde{\Phi}$,

$$\tilde{\Phi} = \Phi + \varepsilon \hat{\Phi}$$

mit $\hat{\Phi} = \mathcal{O}(1)$ und diese Störung wirkt sich massiv auf das Verhalten von η aus. So gilt

$$E(\tilde{\Phi}) - E(\Phi) = (E(\varepsilon \hat{\Phi}) - I) \bullet E(\Phi),$$

wobei der Faktor $\tilde{E} := E(\varepsilon \hat{\Phi}) - I$ nicht etwa klein ist, sondern die Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ hat.

Wir bezeichnen mit $\eta(t)$ die Lösung der Differentialgleichung $\dot{\eta} = (E(\Phi) \bullet W(p_0, q_0)) \eta$ und mit $\tilde{\eta}$ die Lösung des teilweise gestörten Systems $\dot{\tilde{\eta}} = (E(\tilde{\Phi}) \bullet W(p_0, q_0)) \tilde{\eta}$, um die Auswirkungen einer Störung in den langsamen Variablen auf η untersuchen zu können. Dabei sollen die Startwerte $\eta(t_0)$ und $\tilde{\eta}(t_0)$ dieselben sein.

Betrachten wir das Integral über die Differenz zwischen gestörter und ungestörter Gleichung über ein Intervall $[t_0, t]$, in dem eine Fastkreuzung der Eigenfrequenzen auftritt, so erhalten wir nach partieller Integration

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}(t) - \eta(t) &= \int_{t_0}^t \left((E(\tilde{\Phi}) - E(\Phi)) \bullet W(p_0(s), q_0(s)) \right) \eta(s) ds \\ &= \frac{\varepsilon}{i} \left[\left(E(\Phi) \bullet D^-(\Lambda) \bullet \tilde{E} \bullet W(p_0(s), q_0(s)) \right) \eta(s) \right]_{s=t_0}^t \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{i} \int_{t_0}^t E(\Phi) \bullet \frac{d}{d\theta} (D^-(\Lambda) \bullet \tilde{E} \bullet W(p_0(\theta), q_0(\theta)) \eta(\theta)) \Big|_{\theta=s} ds \\ &= \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2) \end{aligned}$$

mit der Matrix D^- definiert durch (2.4).

Gleiches gilt für die Sprunghöhe von η an sich

$$\eta(t) - \eta(t_0) = \int_{t_0}^t \left(E(\Phi) \bullet W(p_0(s), q_0(s)) \right) \eta(s) ds = \mathcal{O}(\varepsilon/\delta^2).$$

Eine $\mathcal{O}(\varepsilon)$ -Störung in den langsamen Variablen sorgt also im Fall $\delta^2 \leq \varepsilon$ für eine Störung in η , die genauso groß ist wie die Höhe des Sprungs, dem η beim Durchlaufen einer Fastkreuzungsstelle unterzogen wird.

Im Gegenzug hängen aber die langsamen Variablen durch das Auftreten von η in den Bewegungsgleichungen (4.23) und (4.24) von den neuen Werten von η nach dem

Sprung ab, so dass ein Sprung in η , wie er beim Durchlaufen einer Fastkreuzung auftritt, unweigerlich zu einer Störung in den langsamen Variablen führt. Diese wiederum beeinflusst die Sprunghöhe von η in der oben festgestellten Weise, so dass sich die Effekte unverhersagbar überlagern und beeinflussen können.

Insbesondere wirken sich im Fall vermiedener Kreuzungen der Eigenfrequenzen auch kleinste Störungen in den Startwerten der langsamen Variablen auf das Sprungverhalten von η aus.

Die Sensitivität einer Lösung auf kleine Störungen der Startwerte im Fall vermiedener Eigenwertkreuzungen ist ein Effekt, der zuerst von Takens [28] entdeckt wurde und demnach in der Literatur als *Takens Chaos* bezeichnet wird. In [2] wird dieser Effekt illustriert und es zeigt sich dort, dass wir nach dem Durchlaufen einer vermiedenen Eigenwertkreuzung bei gestörten Startwerten zwar keine einzelne exakte Lösung mehr angeben können, es scheint aber eine Art Trichter oder Fächer zu geben, innerhalb dessen sich die Lösungen dann befinden. So ist das Verhalten der Lösungen nach der Fastkreuzung zwar nicht exakt vorhersagbar, allerdings können wir doch von Fast-Lösungen sprechen, die alle innerhalb eines Trichters um die ungestörte Lösung liegen.

Wir wollen diesen Sachverhalt an einem einfachen Testbeispiel illustrieren. Dafür sei ein Hamiltonsystem gegeben mit

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p_0^T p_0 + \frac{1}{2} p_1^T M_1(q_0)^{-1} p_1 + \frac{1}{2\varepsilon^2} q_1^T q_1,$$

$$M_1(q_0)^{-1} = \begin{pmatrix} q_{00} + q_{01} + 3 & \delta \\ \delta & 2(q_{00} + q_{01}) + 3 \end{pmatrix}^2.$$

Die Diagonalisierung der Massematrix $M_1(q_0)^{-1} = Q(q_0)\Omega(q_0)^2Q(q_0)^T$ ist mit $\|q_0\|_1 = q_{00} + q_{01}$ gegeben durch

$$\begin{aligned} \Omega(q_0) &= \begin{pmatrix} \frac{3}{2}\|q_0\|_1 + 3 + \frac{1}{2}\sqrt{\|q_0\|_1^2 + 4\delta^2} & 0 \\ 0 & \frac{3}{2}\|q_0\|_1 + 3 - \frac{1}{2}\sqrt{\|q_0\|_1^2 + 4\delta^2} \end{pmatrix}, \\ Q(q_0) &= \begin{pmatrix} \cos(\xi(q_0)) & -\sin(\xi(q_0)) \\ \sin(\xi(q_0)) & \cos(\xi(q_0)) \end{pmatrix}, \\ \xi(q_0) &= \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\|q_0\|_1}{2\delta}\right). \end{aligned}$$

Wie bei dem Fastkreuzungsbeispiel aus Kapitel 1.5.2 können wir durch unterschiedliche Wahl von ε und δ die minimale Nähe der Eigenfrequenzen beeinflussen.

Abbildung 4.5 zeigt die Eigenfrequenzen $\omega_j(q_0(t))$ für $\varepsilon = 0.001$ und unterschiedliche Werte von δ .

Die Eigenfrequenzen nähern sich wieder bis auf eine zu δ proportionale minimale Distanz an und gehen ohne Kreuzung auseinander.

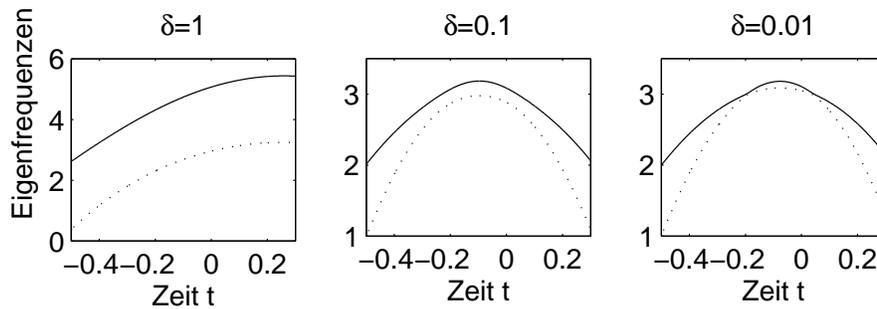
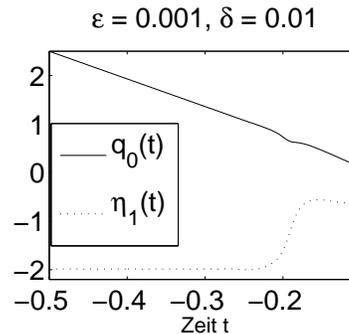


Abbildung 4.5: Eigenfrequenzen von $M_1(q_0)$ für $\varepsilon = 0.001$ und $\delta = 1, 0.1, 0.01$.

Um uns ein Bild von der angesprochenen Sensitivität der transformierten Variablen auf gestörte Startwerte zu machen, betrachten wir zunächst in nebenstehender Abbildung die generelle Situation bei einer vermiedenen Kreuzung. Geplottet ist die “exakte” Lösung der transformierten Differentialgleichung, und zwar jeweils die erste Komponente von q_0 und η_1 für $\varepsilon = 0.001$, $\delta = 0.01$. Wir erkennen, dass die langsamen Positionen von der Fastkreuzung nicht unbeeinflusst bleiben.



So zeigt die erste Komponente von q_0 zumindest einen kleinen “Wackler”, während η dem Sprung auf einer Skala von $\mathcal{O}(1)$ unterzogen wird.

Wir lösen nun ebenfalls die transformierten Differentialgleichungen, stören aber den Anfangswert in den langsamen Positionen um $\mathcal{O}(\varepsilon)$. Durchläuft das System keine vermiedene Kreuzung, sollte dies das Lösungsverhalten nicht wesentlich beeinflussen.

Abbildung 4.6 zeigt eine solche Situation. Für $\varepsilon = 0.001$ und $\delta = 0.1$ tritt noch keine ausreichende Annäherung der Eigenfrequenzen auf, die eine starke Sensitivität der Lösungen von den Startwerten erwarten lässt. Eine Unterscheidung der Linienstrukturen ist so nicht möglich, eine Aufspaltung in einen Fächer oder Trichter findet nicht sichtbar statt.

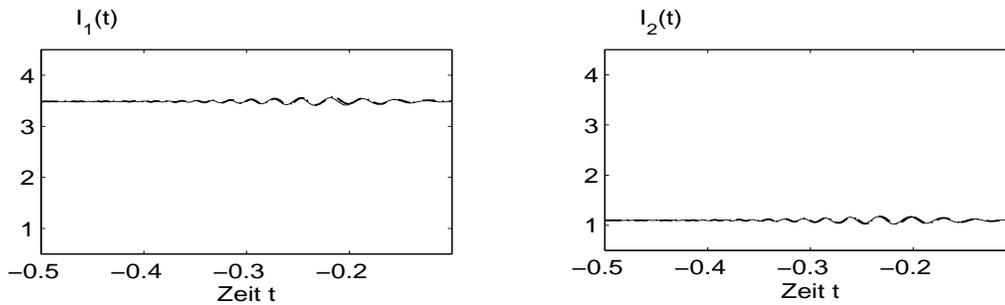


Abbildung 4.6: $I_j(t)$ mit ungestörten und um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ gestörten Startwerten; $\varepsilon = 0.001$, $\delta = 0.1$.

Doch die Situation verändert sich, wenn durch kleinere Werte von δ eine vermiedene Kreuzung zustande kommt.

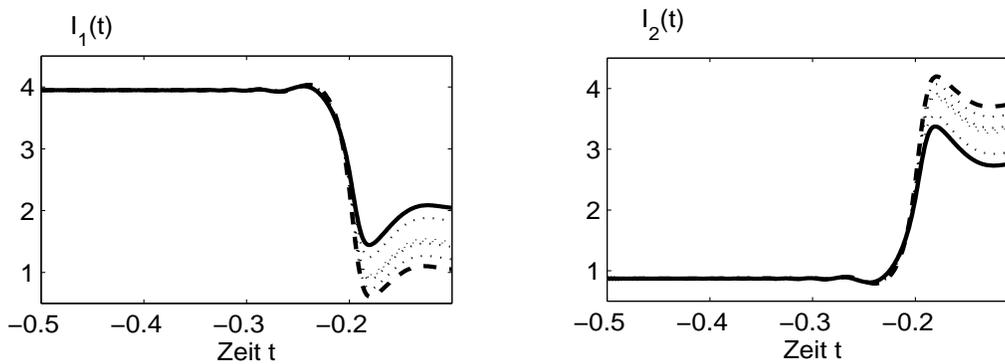


Abbildung 4.7: $I_j(t)$ mit ungestörtem Startwert (dick durchgezogen), mit um ε gestörtem Startwert (dick gestrichelt) und um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ zufällig gestörte Startwerte (dünn gepunktet); $\varepsilon = 0.001$, $\delta = 0.01$.

Abbildung 4.7 zeigt die ungestörten Wirkungen für $\varepsilon = 0.001$, $\delta = 0.01$ mit einer dicken durchgezogenen Linie und die Wirkungen für um ε gestörte langsame Anfangswerte mit einer dicken gestrichelten Linie.

Stört man den Anfangswert $q_0(t_0)$ um eine zufällig gewählte Zahl zwischen 0 und 1 multipliziert mit ε , so erhalten wir die angesprochene Auffächerung (“Trichter”). Ab dem Punkt, an dem die Fastkreuzung statt findet, nimmt jede der gestörten Lösungen einen anderen Verlauf, bleibt dabei aber innerhalb des durch die beiden dick gezeichneten Linien festgelegten Trichters.

Das gleiche Phänomen zeigt sich auch für kleinere Werte von ε , wie wir Abbildung 4.8 entnehmen können. Hier werden dieselben Funktionen für $\varepsilon = 0.0001$ und $\delta = 0.001$ geplottet und wir erkennen wieder eine Auffächerung der Lösung in eine Schar von “Fastlösungen”, bei denen lediglich der Startwert der langsamen Positionen um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ verändert wurde.

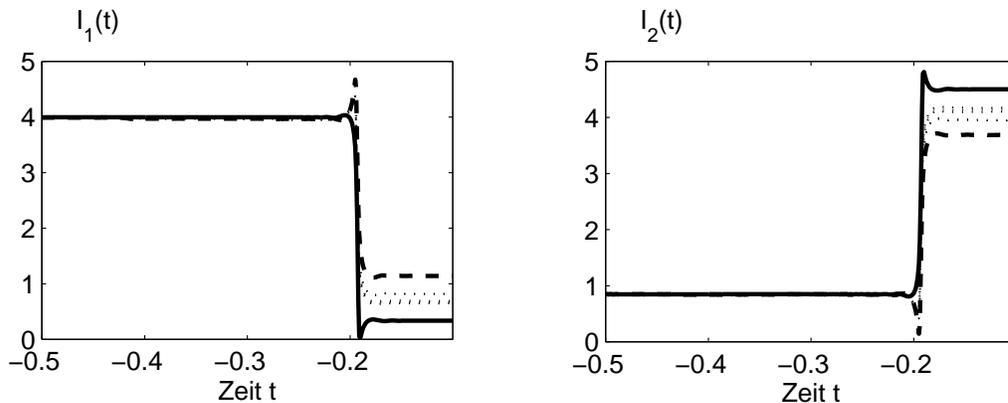


Abbildung 4.8: $I_j(t)$ mit ungestörtem Startwert (dick durchgezogen), mit um ε gestörtem Startwert (dick gestrichelt) und um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ zufällig gestörte Startwerte (dünn gepunktet); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.001$.

Bei der Entwicklung von Integratoren für die Situation einer Fastkreuzung werden wir also enttäuscht, wenn wir erwarten, dass *die* Lösung mit einer bestimmten Genauigkeit approximiert wird. *Die* Lösung an sich ist in einer solchen Situation schwer zu bestimmen, wenn solch kleine Veränderungen der Startwerte zu einer ganzen Schar von Lösungskurven führen. Außerdem führt der Sprung in η genau zu solchen Veränderungen in den langsamen Variablen, so dass ein Bündel von Lösungen entsteht, die ab einem gewissen Punkt alle gleich wahrscheinlich sind und im Sinne der Rückwärtsanalyse den exakten Lösungen zu gestörten Startwerten entsprechen.

4.5 Numerische Integratoren

Nach den erkannten Schwierigkeiten in nichtadiabatischen Situationen gehen wir zunächst von der adiabatischen Situation aus, in der (4.27) und (4.28) mit einer ausreichend großen Konstanten δ gelten.

Ein erstes und sehr einfaches Verfahren zur Approximation der Lösung sieht wie folgt aus:

- Löse die langsamen Grenzgleichungen ($\varepsilon \rightarrow 0$)

$$\dot{p}_0 = -\nabla_{q_0} \left(\frac{1}{2} p_0^T M_0(q_0)^{-1} p_0 + U(q_0, 0) \right) - \sum_{j=1}^m I_j \nabla_{q_0} \omega_j(q_0) \quad (4.36)$$

$$\dot{q}_0 = M_0(q_0)^{-1} p_0 \quad (4.37)$$

mit dem Störmer-Verlet-Verfahren,

- belasse dabei $\eta(t)$ bzw. $I_j(t)$ auf dem Anfangswert $\eta(t_0)$ bzw. $I_j(t_0)$.

Unter der Bedingung einer beschränkten Gesamtenergie und einer ausreichenden Separation der Eigenfrequenzen verursacht dieser Ansatz einen Modellfehler von $\mathcal{O}(\varepsilon)$, was wir analog zu den Beweisen der vorigen Kapitel zeigen können.

Das Störmer-Verlet-Verfahren ist ein Verfahren zweiter Ordnung, wir erwarten also für $h > \sqrt{\varepsilon}$ eine quadratische Fehlerreduktion und eine Stagnation des Fehlers auf $\mathcal{O}(\varepsilon)$ für $h < \sqrt{\varepsilon}$. Für kleine Werte von ε , an denen wir ja vor allem interessiert sind, könnten wir uns also mit diesem Verfahren und diesem Ergebnis zufrieden geben. Wie in Kapitel 2 genügt uns dies allerdings nicht.

Im Fall einer auftretenden Fastkreuzung von Eigenfrequenzen erkennen wir diese mit obigem Verfahren nicht einmal. Auch wenn wir es mit keinem noch so guten Verfahren schaffen werden, *die* Lösung des Systems in einer solchen Situation zu approximieren, ist es doch ein Unterschied, ob wir diese Situation einfach ignorieren und mit unserem Verfahren weiter gehen als sei nichts gewesen, oder ob wir wenigstens vom Programm darauf aufmerksam gemacht werden, dass eine solche Fastkreuzung statt gefunden hat und vielleicht sogar eine der möglichen Fast-Lösungskurven mit unserem Verfahren verfolgen können.

Die weiterführende Frage bei der Entwicklung eines Verfahrens mit diesen Zielen ist also, welche der Terme, die wir oben ignoriert haben im Fall einer solchen Fastkreuzung groß werden und uns somit auf dem Weg durch die Fastkreuzung behilflich sein können.

Zur Beantwortung dieser Frage steigen wir noch einmal in die Transformationen des Abschnitts 4.2 ein.

In Lemma 11 diagonalisieren wir die schnelle Massematrix und es entsteht ein Term

$$\frac{1}{2} \hat{p}^T X(\hat{q}) \hat{p} \quad \text{mit} \quad X(\hat{q}) = \begin{pmatrix} 0 & X_{01} \\ X_{10} & X_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\bar{M}_0^{-1} Y \\ -Y^T \bar{M}_0^{-1} & Y^T \bar{M}_0^{-1} Y \end{pmatrix}$$

und

$$Y(\hat{q}) = \left(\frac{\partial}{\partial \hat{q}_0} Q(\hat{q}_0) \hat{q}_1 \right)^T Q(\hat{q}_0) = \mathcal{O}(\hat{q}_1 / \delta).$$

Dieser Ausdruck beinhaltet die Terme, die hauptverantwortlich sind für die Veränderung der adiabatischen Invarianten auf Grund einer Fastkreuzung und es genügt demnach, den weiteren Weg dieses Ausdrucks zu verfolgen. Er wird transformiert zu

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \check{p}^T \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon^{-1/2} X_{01}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \\ \varepsilon^{-1/2} \Omega^{-1/2} X_{10}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) & \varepsilon^{-1} \Omega^{-1/2} X_{11}(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \end{pmatrix} \check{p} \\ &= -\varepsilon^{-1/2} \check{p}_0^T M_0^{-1} Y(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \check{p}_1 \\ & \quad + \frac{1}{2} \varepsilon^{-1} \check{p}_1^T \Omega^{-1/2} Y(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1)^T M_0^{-1} Y(\check{q}_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} \check{q}_1) \Omega^{-1/2} \check{p}_1 \\ &= \mathcal{O}(\varepsilon / \delta) + \mathcal{O}(\varepsilon^2 / \delta^2) \end{aligned} \tag{4.38}$$

im Fall beschränkter Gesamtenergie. In Fastkreuzungssituationen mit $\delta^2 \leq \varepsilon$ identifizieren wir den gemischten Term (4.38) als führenden Term und schreiben ihn um, wobei wir die Haken auf den Buchstaben weglassen und $v_0 = M_0(q_0)^{-1} p_0$ setzen.

$$\begin{aligned} -\varepsilon^{-1/2} v_0^T Y(q_0, \varepsilon^{1/2} \Omega^{1/2} q_1) \Omega^{-1/2} p_1 &= -v_0^T \left(\left(\frac{\partial}{\partial q_0} Q(q_0) \right) \Omega^{1/2} q_1 \right)^T Q(q_0) \Omega^{-1/2} p_1 \\ &= - \left(\frac{d}{d\tau} \Big|_{\tau=0} Q(q_0 + \tau v_0) \Omega^{1/2} q_1 \right)^T Q(q_0) \Omega^{-1/2} p_1 \\ &= q_1^T L(p_0, q_0) p_1 \end{aligned}$$

mit

$$L(p_0, q_0) = -\Omega(q_0)^{1/2} \frac{d}{d\tau} \Big|_{\tau=0} Q(q_0 + \tau v_0)^T Q(q_0) \Omega(q_0)^{-1/2}. \tag{4.39}$$

Mit diesem L stellen wir eine vereinfachte Version der Differentialgleichung für die adiabatischen Variablen η auf,

$$\dot{\eta} = (E(\Phi) \bullet W) \eta, \quad (4.40)$$

wobei W gegeben ist durch (4.26) mit der vereinfachten Matrix L aus (4.39).

Wir erhalten einen zweiten, verbesserten Integrator, indem wir das langsame Grenzsystem (4.36) und (4.37) mit dem Störmer-Verlet-Verfahren lösen und einen adiabatischen Integrator mit linearer Phasenapproximation, wie er in Kapitel 2.2 vorgestellt wurde, auf die Differentialgleichung (4.40) anwenden.

Verwenden wir das Störmer-Verlet-Verfahren wieder als Kombination aus symplektischem Euler-Verfahren und adjungiertem symplektischen Euler-Verfahren, so ergeben sich folgende Formeln für einen Zeitschritt $t_n \rightarrow t_{n+1}$ mit $t_n = t_0 + nh$,

$$p_0^{n+1/2} = p_0^n - \frac{h}{2} \left(\frac{1}{2} p_0^{n+1/2T} \nabla_{q_0} M_0(q_0^n)^{-1} p_0^{n+1/2} + \nabla_{q_0} U(q_0^n, 0) + \sum_{j=1}^m I_j^n \nabla_{q_0} \omega_j(q_0^n) \right)$$

$$q_0^{n+1/2} = q_0^n + \frac{h}{2} \left(M_0(q_0^n)^{-1} p_0^{n+1/2} \right)$$

$$\eta^{n+1} = \eta^n + h \left(E(\Phi^{n+1/2}) \bullet \mathcal{I}^{n+1/2} \bullet W^{n+1/2} \right) \frac{1}{2} (\eta^{n+1} + \eta^n)$$

$$p_0^{n+1} = p_0^{n+1/2} - \frac{h}{2} \left(\frac{1}{2} p_0^{n+1/2T} \nabla_{q_0} M_0(q_0^{n+1})^{-1} p_0^{n+1/2} + \nabla_{q_0} U(q_0^{n+1}, 0) + \sum_{j=1}^m I_j^{n+1} \nabla_{q_0} \omega_j(q_0^{n+1}) \right)$$

$$q_0^{n+1} = q_0^{n+1/2} + \frac{h}{2} \left(M_0(q_0^{n+1})^{-1} p_0^{n+1/2} \right),$$

mit $E(\Phi^{n+1/2}) = E(\Phi(q_0^{n+1/2}))$, $\mathcal{I}_{ij}^{n+1/2} = \text{sinc} \left(\frac{h}{2\varepsilon} \left(\lambda_j(q_0^{n+1/2}) - \lambda_i(q_0^{n+1/2}) \right) \right)$ und $W^{n+1/2} = W(p_0^{n+1/2}, q_0^{n+1/2})$ in der vereinfachten Form von (4.39).

Durch dieses Verfahren können wir zumindest feststellen, wann ein nichtadiabatischer Übergang statt findet und eventuell auch eine Approximation erhalten, die sich als “exakte” Lösung zu gestörten Startwerten interpretieren lässt.

Dies werden wir im nächsten Abschnitt testen.

4.6 Numerische Beispiele

In Kapitel 4.4 haben wir bereits ein Beispiel kennen gelernt, an dem wir sowohl die Situation getrennter Eigenfrequenzen, als auch das Auftreten vermiedener Kreuzungen untersuchen können. Auch wenn dieses Beispiel recht einfach ist, da ein zusätzliches Potential U in der Hamiltonfunktion nicht auftritt, können wir doch wesentliche Eigenschaften unserer Verfahren an diesem Modellproblem illustrieren. Wir betrachten zunächst die adiabatische Situation getrennter Frequenzen. Durch die Vereinfachung der Bewegungsgleichungen haben wir bereits einen Modellfehler von $\mathcal{O}(\varepsilon)$ begangen, allerdings sind wir sowieso an hochoszillatorischen Problemen mit kleinen Werten von ε interessiert. So wählen wir $\varepsilon = 0.0001$ und betrachten zunächst die Fehler unserer beiden Verfahren für $\delta = 0.1$ ($\delta = 1$ ergibt ein ähnliches Bild). Die im ersten Kapitel formulierten Ziele verfolgen wir natürlich auch hier und wollen mit Schrittweiten $h > \varepsilon$ gute Resultate erzielen.

Abbildung 4.9 zeigt den gemittelten Fehler in schnellen und langsamen Positionen geplottet gegen die Schrittweite. Durch die Reskalierung innerhalb der Rücktransformation leiden die schnellen Impulse unter dem kleinen ε , weshalb wir uns hier auf eine Darstellung des Positionsfehlers beschränken. Bei Verfahren 1 sehen wir klar die 2. Ordnung des Störmer-Verlet-Verfahrens bis zu dem Zeitpunkt, an dem der Modellfehler überwiegt und die Fehlerkurve stagniert. Auch wenn das zweite Verfahren einigen Resonanzen unterworfen ist, können wir hier ebenfalls eine mittlere Steigung von zwei identifizieren.

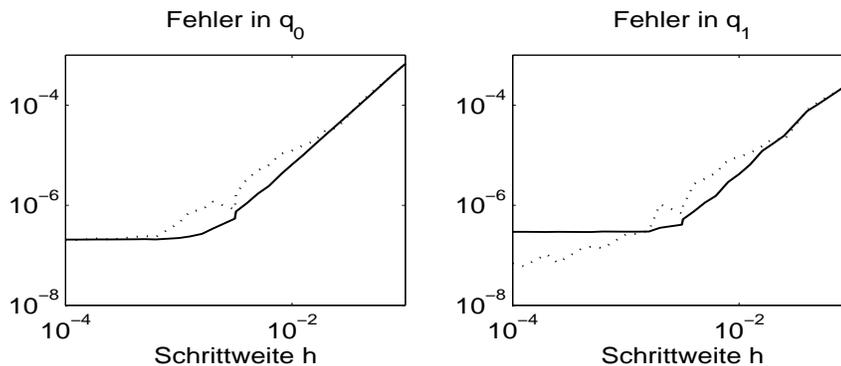


Abbildung 4.9: Gemittelter Fehler in den Positionen für Verfahren 1 (Linie) und Verfahren 2 (gepunktet); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.1$.

Für kleinere Werte von δ setzt die Fastkreuzungsproblematik ein und wir erhalten schlechtere Approximationen.

Abbildung 4.10 zeigt die gleichen Fehlerkurven für $\delta = 0.01$. Deutlich sichtbar ist das frühere Einsetzen der Stagnation und die Vorteile des zweiten Verfahrens gegenüber dem ersten.

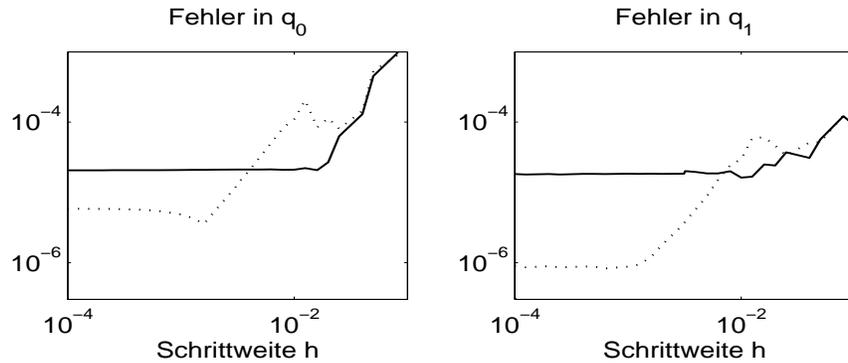


Abbildung 4.10: Gemittelter Fehler in den Positionen für Verfahren 1 (Linie) und Verfahren 2 (gepunktet); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.01$.

Verringern wir δ weiter, so zeigt sich, dass das zweite Verfahren besser mit den Fastkreuzungen umgehen kann, als wir es erwartet hatten. Abbildung 4.11 zeigt den gemittelten Fehler in den Positionen für $\varepsilon = 0.0001$ und $\delta = 0.001$.

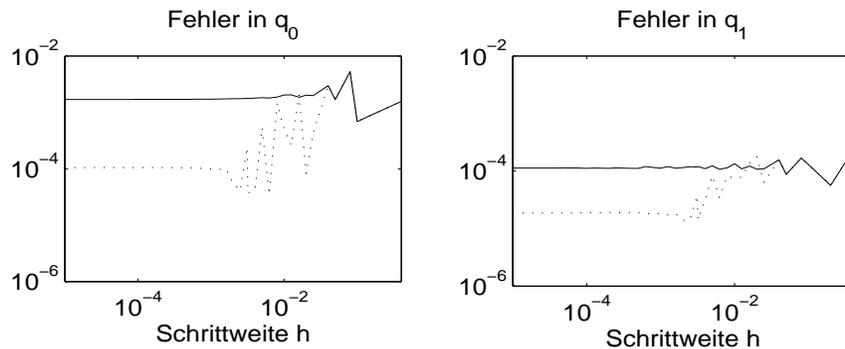


Abbildung 4.11: Gemittelter Fehler in den Positionen für Verfahren 1 (Linie) und Verfahren 2 (gepunktet); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.001$.

Da wir den Fehler über das gesamte Integrationsintervall gemittelt haben, wirkt sich das inadäquate Verhalten von Verfahren 1 nach der vermiedenen Kreuzung in der Fehlerkurve nicht sehr stark aus. Wir erhalten keine Konvergenz mehr, aber der lange Abschnitt bis zur Sprungstelle mit konstanten η hält den gemittelten Fehler auf einem geringen Niveau. So werden wir optisch darüber hinweg getäuscht, dass das erste Verfahren nach der Sprungstelle einfach auf dem vorigen Niveau bleibt, also einen Fehler der Größenordnung $\mathcal{O}(1)$ begeht.

Die Frage ist nun, ob das zweite Verfahren in der Lage ist, nach dem Sprung wenigstens eine Fast-Lösung zu verfolgen. Dazu wenden wir es mit unterschiedlichen Schrittweiten auf die Situation $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.001$ an. In Abbildung 4.12 sehen wir wieder das bekannte Bild der Wirkungen, berechnet mit den exakten Bewegungsgleichungen (dick durchgezogen), mit kleinen Störungen in den Anfangswerten q_0 (dick gestrichelt und dünn gepunktet) und berechnet mit Verfahren 2 (Kreuze). Die verwendete Schrittweite $h = 0.01$ liefert eine Lösungskurve, die ziemlich genau auf der dicken gestrichelten Linie zu liegen kommt. Wenn wir auch nicht “die” ursprüngliche Lösung erhalten haben, so doch zumindest ein Ergebnis, das wir als exakte Lösung zu um $\mathcal{O}(\varepsilon)$ gestörten Anfangswerten auffassen können.

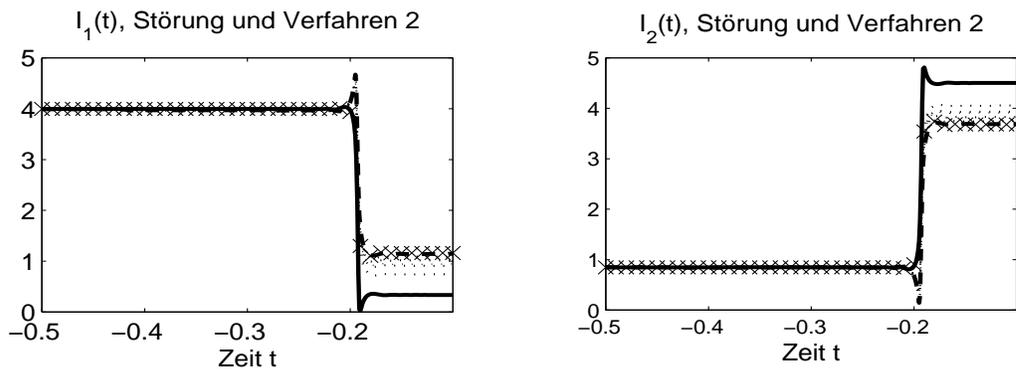


Abbildung 4.12: $I_j(t)$ “exakt”, mit gestörten Anfangswerten und Verfahren 2 (Kreuze); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.001$, $h = 0.01$.

Verkleinern wir die Schrittweite, ergibt sich ein noch erfreulicherer Bild.

Für $h = 0.001$ zeigt Abbildung 4.13, dass die Kreuze ziemlich genau auf der Lösung der exakten Bewegungsgleichungen zu liegen kommen.

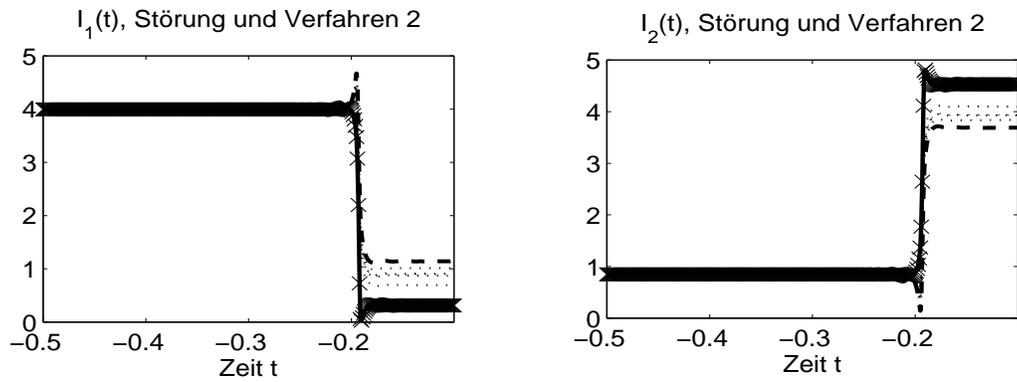


Abbildung 4.13: $I_j(t)$ “exakt”, mit gestörten Anfangswerten und Verfahren 2 (Kreuze); $\varepsilon = 0.0001$, $\delta = 0.001$, $h = 0.001$.

Wo Verfahren 1 einfach geradeaus weiter gehen würde, gelingt es also durch Hinzunahme weniger entscheidender Terme, das Sprungverhalten insofern aufzulösen, dass wir selbst für größere Schrittweiten gute Ergebnisse im Sinne der Rückwärtsanalyse erhalten.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Born & V. Fock, *Beweis des Adiabatenatzes*, Zeitschr. f. Physik, 51 (1928), 165-180.
- [2] F. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*, Springer LNM 1687 (1998).
- [3] I. Degani & J. Schiff, *RCMS: Right correction Magnus series approach for integration of linear ordinary differential equations with highly oscillatory solution*, Report, Weizmann Inst. Science, Rehovot, 2003.
- [4] E. Fermi, J. Pasta & S. Ulam, *Studies of nonlinear problems*, Los Alamos Report No. LA-1940 (1955), später publiziert in E. Fermi: Collected Papers (Chicago 1965).
- [5] B. García-Archilla, J. M. Sanz-Serna & R. D. Skeel, *Long-time-step methods for oscillatory differential equations*, SIAM J. Sci. Comput. 20 (1998), 930-963.
- [6] W. Gautschi, *Numerical integration of ordinary differential equations based on trigonometric polynomials*, Numer. Math. 3 (1961), 381-397.
- [7] V. Grimm, *Exponentielle Integratoren als Lange-Zeitschritt-Verfahren für oszillatorische Differentialgleichungen zweiter Ordnung*, Doktorarbeit, Mathematisches Institut, Universität Düsseldorf, Germany, 2002.
- [8] E. Hairer, C. Lubich & G. Wanner, *Geometric numerical integration*, Springer Verlag, Berlin, 2. Auflage, 2006.
- [9] E. Hairer, C. Lubich & G. Wanner, *Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method*, Acta Numerica (2003), 399-450.

- [10] E. Hairer & G. Söderlind, *Explicit, time reversible, adaptive step size control*, SIAM J. Sci. Comput. 26 (2005), 1838-1851.
- [11] J. Henrard, *The adiabatic invariant in classical mechanics*, Dynamics reported, New series Vol. 2, Springer, Berlin (1993), 117-235.
- [12] M. Hochbruck & C. Lubich, *A Gautschi-type method for oscillatory second-order differential equations*, Numer. Math. 83 (1999a), 403-426.
- [13] A. Iserles, *On the global error of discretization methods for highly-oscillatory ordinary differential equations*, BIT 42 (2002), 561-599.
- [14] A. Iserles, H.Z. Munthe-Kaas, S.P. Nørsett & A. Zanna, *Lie-group methods*, Acta Numerica (2000), 215-365.
- [15] A. Iserles & S.P. Nørsett, *On the numerical quadrature of highly oscillating integrals I: Fourier transforms.*, IMA J. Numer. Anal. 24 (2004), 365-391.
- [16] T. Jahnke, *Numerische Verfahren für fast adiabatische Quantendynamik*, Dissertation, Mathematisches Institut, Universität Tübingen, 2003.
- [17] T. Jahnke, *Long-time-step integrators for almost-adiabatic quantum dynamics*, SIAM J. Sci. Comput. 25 (2004), 2145-2164.
- [18] T. Jahnke, *A long-time-step method for quantum-classical molecular dynamics*, Preprint, 2004.
- [19] T. Jahnke & C. Lubich, *Numerical integrators for quantum dynamics close to the adiabatic limit*, Numer. Math. 94 (2003), 289-314.
- [20] L. Landau, *Zur Theorie der Energieübertragung bei Stößen*, Phys. Z. Sowjetunion 1 (1932), 88-98.
- [21] C. Lasser, *Conical energy level crossings in molecular dynamics*, Dissertation, Fakultät für Mathematik, Technische Universität München, 2004.
- [22] K. Lorenz, T. Jahnke & C. Lubich, *Adiabatic integrators for highly oscillatory second order linear differential equations with time-varying eigendecomposition*, BIT Numer. Math. 45 (2005), 91-115.

- [23] C. Lubich, *Integration of stiff mechanical systems by Runge-Kutta methods*, Z. Angew. Math. Phys. 44 (1993), 1022-1053.
- [24] W. Magnus, *On the exponential solution of differential equations for a linear operator*, Comm. Pure Appl. Math. VII (1954), 649-673.
- [25] L. R. Petzold, L. O. Jay & J. Yen, *Numerical solution of highly oscillatory ordinary differential equations*, Acta Numerica 7 (1997), 437-483.
- [26] H. Rubin & P. Ungar, *Motion under a strong constraining force*, Comm. Pure Appl. Math. 10 (1957), 65-87.
- [27] V. Stejskal & M. Valášek, *Kinematics and dynamics of machinery*, Marcel Dekker Inc., New York, 1996, Kap. IX.
- [28] F. Takens, *Motion under the influence of a strong constraining force*, Global theory of dynamical systems, Proc. int. Conf., Evanston/Ill. 1979, Springer LNM 819 (1980), 425-445.
- [29] D. R. Yarkony, *Conical intersections: The new conventional wisdom*, J.Phys. Chem. A 105 (2001), 6277-6293.
- [30] C. Zener, *Nonadiabatic crossing of energy levels*, Proc. Royal Soc. London, Ser. A 137 (1932), 696-702.

Danksagung

An erster Stelle bedanke ich mich bei Prof. Dr. Christian Lubich für seine exzellente Betreuung. Seine große Erfahrung, sein Engagement und seine stete Gesprächsbereitschaft waren eine wichtige Unterstützung meiner Arbeit.

Dr. Tobias Jahnke (Berlin) hat mit seiner Arbeit einen soliden Grundstein gelegt, auf dem ich aufbauen konnte. Dafür und für viele weitere Anregungen meinen herzlichen Dank.

Durch den Kontakt zu zahlreichen Freunden und Kollegen haben sich immer wieder neue Blickwinkel auf das Thema ergeben und die Arbeit wurde durch ihre Anregungen und Kritik bereichert. Hierfür danke ich besonders Prof. Dr. Marlis Hochbruck (Düsseldorf), Prof. Dr. Ernst Hairer und Prof. Dr. Gerhard Wanner (Genf), Prof. Dr. Arieh Iserles (Cambridge), PD Dr. Othmar Koch (Wien) und natürlich den Tübingern (und annectierten) Dr. David Cohen, Matthias Loy und Dr. Vasile Grdinaru.

Meinem Mann und meiner Familie gebührt ein besonderer Dank für ihre Unterstützung und ihre Geduld.

Diese Dissertation wurde im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms 1095 *Analysis, Modeling and Simulation of Multiscale Problems* finanziell gefördert. Für die dadurch ermöglichten Arbeitsbedingungen, Reise- und Austauschmöglichkeiten bedanke ich mich ausdrücklich.

Lebenslauf

13.11.1976	geboren in Stuttgart
1983 - 1996	Grundschule und Gymnasium in Stuttgart
21.6.1996	Abitur
1996 - 1997	Freiwilliges Ökologisches Jahr
1997 - 2002	Studium der Mathematik und Biologie an der Eberhard-Karls-Universität in Tübingen
15.3.2002	Diplomprüfung Mathematik
29.11.2002	Wissenschaftliche Prüfung für das Lehramt an Gymnasien (Biologie)
seit 2003	Doktorandin und wissenschaftliche Angestellte an der Universität Tübingen