

3. Dynamische Systeme und gewöhnliche Differentialgleichungen

3.1 Beispiel: mathematisches Pendel

Wir untersuchen die Bewegungsgleichung des mathematischen (gedämpften) Fadenpendels in einer Dimension

$$\ddot{\varphi} + \alpha \dot{\varphi} + \Omega_0^2 \sin \varphi = 0, \quad \Omega_0^2 = g/\ell \quad (1)$$

Das äquivalente System 1. Ordnung:

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} &= \omega \\ \dot{\omega} &= -\alpha \omega - \Omega_0^2 \sin \varphi \end{aligned} \quad (2)$$

+ Anfangsbedingungen

$$\varphi(0) = \varphi_0, \quad \omega(0) = \omega_0 .$$

Zwei Fixpunkte (Ruhelagen) $\dot{\varphi} = \dot{\omega} = 0$:

$$\varphi_0^{(0)} = 0, \quad \varphi_1^{(0)} = \pi$$

$\varphi_0^{(0)}$: stabiler Fokus, $\varphi_1^{(0)}$: instabiler Sattelpunkt.

Euler-Vorwärts-Verfahren

```
PROGRAM PENDEL
CHARACTER*1 c
INTEGER PGCURS
REAL, DIMENSION(2) :: fipg,ompg
pi=3.14159265
omega=1.; alpha      ! Eigenfrequenz, Daempfung
tper=2.*pi/omega    ! Priodenlaenge

C
WRITE(6,*) 'dt?'
READ(5,*) dt
CALL PGBEGIN(0, '/xwin', 1, 1): CALL PGPAP(6., 1.)
CALL PGENV(-pi, pi, -pi, pi, 0, 1)

1  fi=0.; om=0.
   K=PGCURS(fi, om, c)      ! Startpunkt mit Cursor waehlen
   IF(C.EQ.'L') THEN      ! Bildschirm loeschen durch L
     CALL PGERAS
     CALL PGBOX('ABCNT', 0., 0, 'ABCNT', 0., 0)
     GOTO 1
   ENDIF
```

```

IF(C.EQ.' ') GOTO 999      ! Programm beenden durch <blank>

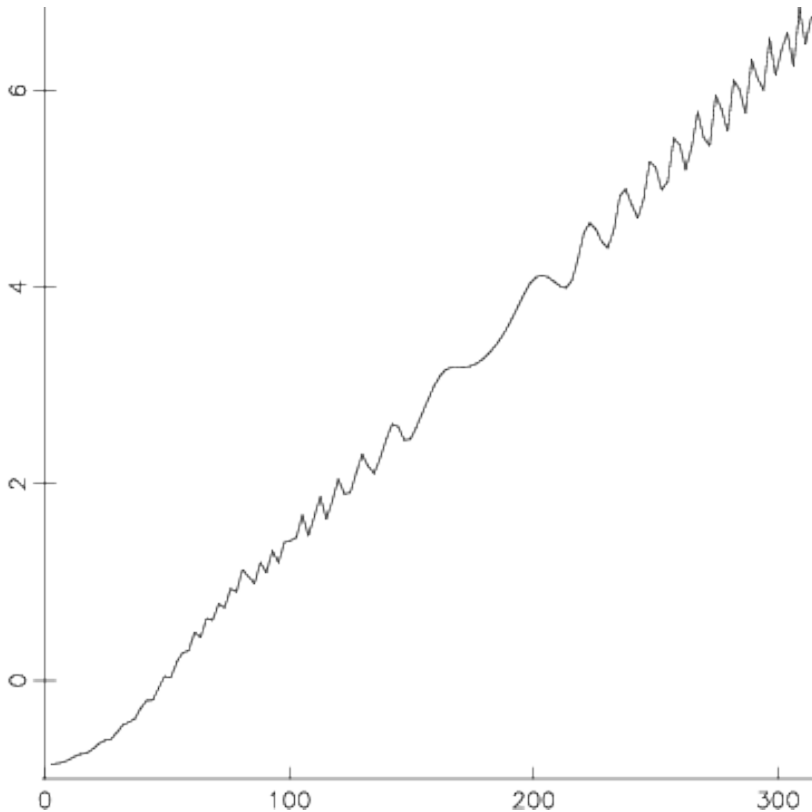
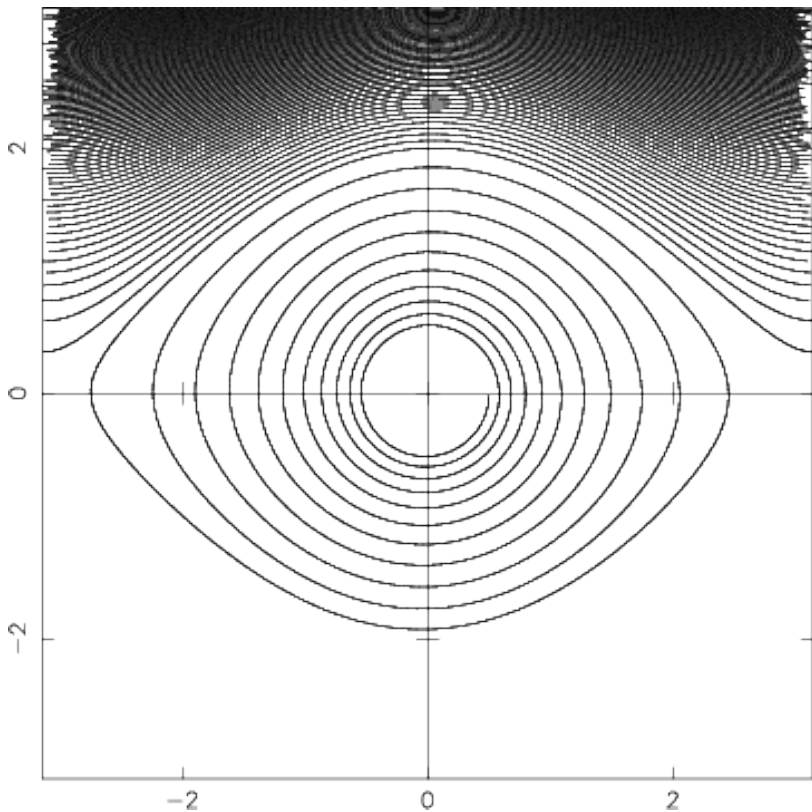
t=0.; n=0
10 CONTINUE      ! Zeitschleife
t=t+dt
fip=om           ! Euler Vorwaerts
omp=-alpha*om-omega**2*SIN(fi)
C
fi=fi+fip*dt
om=om+omp*dt
C
fipg(1)=fipg(2); ompg(1)=ompg(2)
fipg(2)=fi; ompg(2)=om
IF(fi.GT.pi) THEN
  fi=fi-2.*pi
  fipg=fi
ELSE
  IF(n.NE.0) CALL PGLINE(2,fipg,ompg)
ENDIF
IF(fi.LT.-pi) THEN
  fi=fi+2.*pi
  fipg=fi
ELSE
  IF(n.NE.0) CALL PGLINE(2,fipg,ompg)
ENDIF

```

```
n=n+1
IF(n.EQ.50) THEN
  E=.5*fip**2-omega**2*cos(FI)    ! Gesamtenergie
  n=1
  WRITE(6,*) t,fi,e
ENDIF
IF(t.LT.50.*tper) GOTO 10
GOTO 1
999 CALL PGEND
END
```

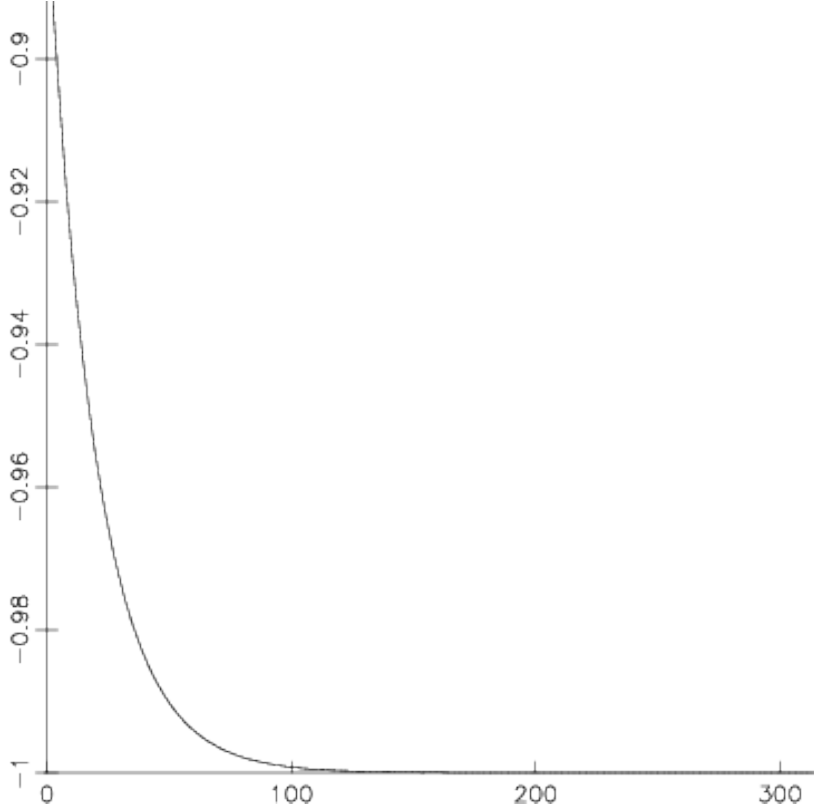
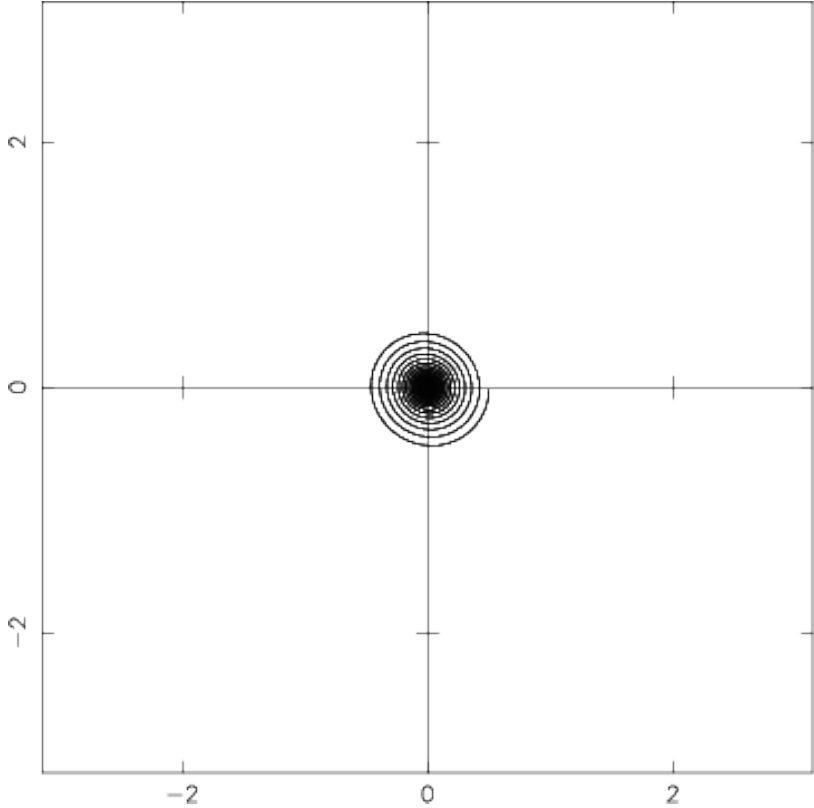
Programm pendel

Phasenraum und Gesamtenergie Pendel, Euler-Vorwärts-Verfahren



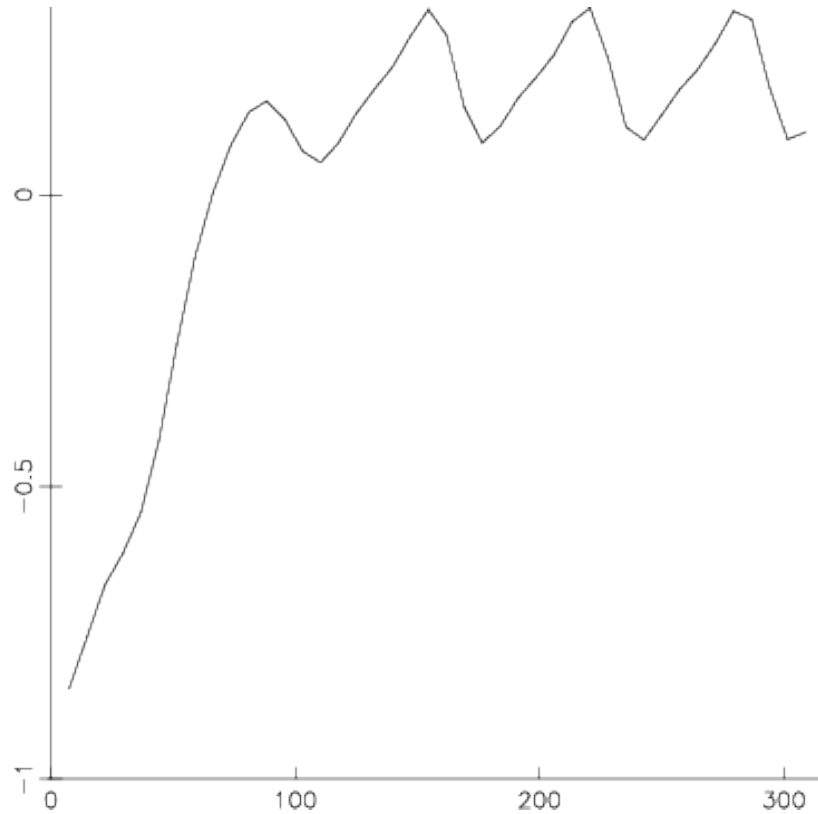
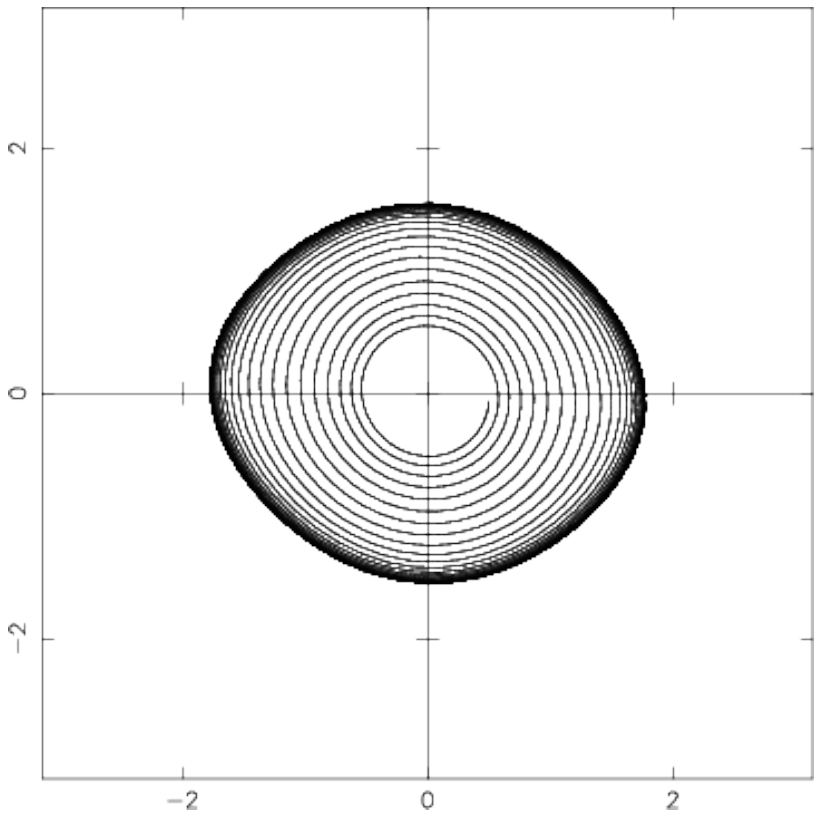
$\alpha = 0, \Delta t = 0.05$

Phasenraum und Gesamtenergie Pendel, Euler-Vorwärts-Verfahren



$$\alpha = 0.1, \Delta t = 0.05$$

Phasenraum und Gesamtenergie Pendel, Euler-Vorwärts-Verfahren

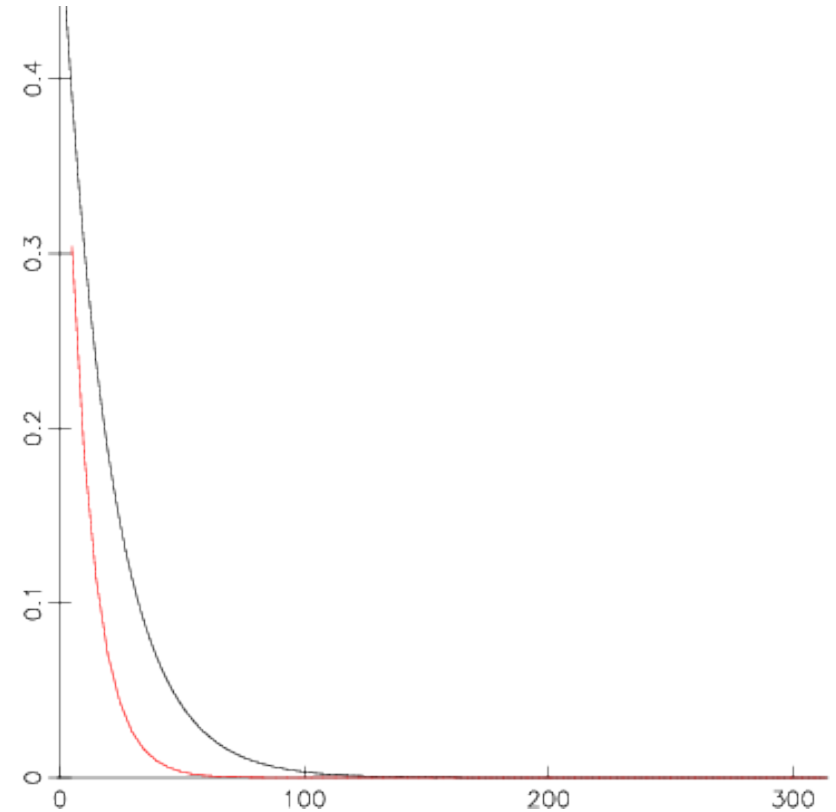
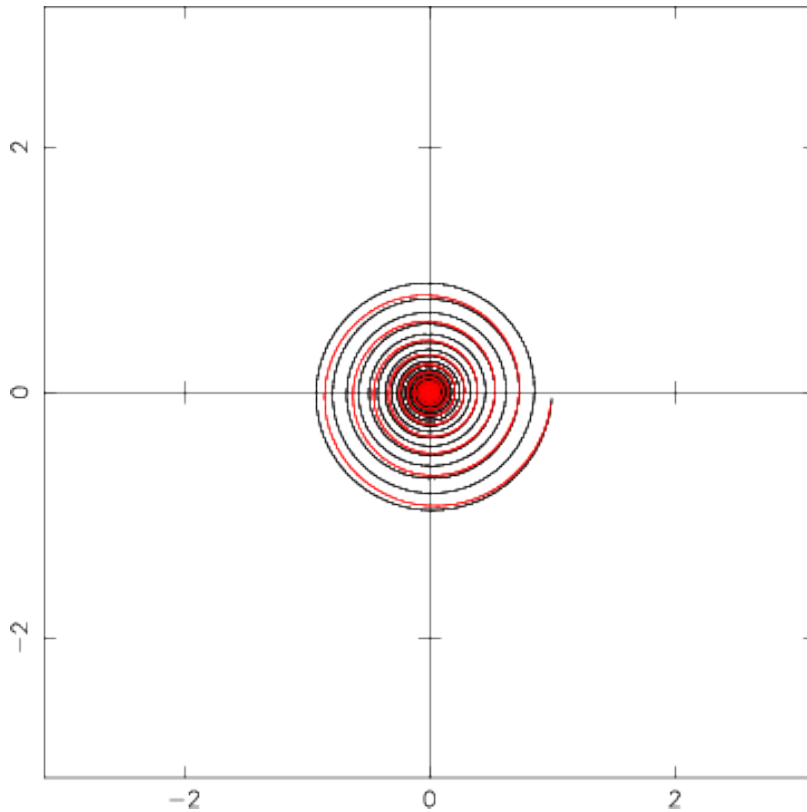


$$\alpha = 0.1, \Delta t = 0.15$$

Vorläufiges Fazit (Euler-Vorwärts):

- Die Ergebnisse für $\alpha = 0$ sind alle falsch (negative numerische Dämpfung)
- Für $\alpha > 0$ erhält man qualitativ richtige Resultate für kleine Δt
- Auch im gedämpften Fall wächst die Energie an und die Trajektorien entfernen sich vom stabilen (!) Fixpunkt, wenn Δt zu groß wird.

Phasenraum und Gesamtenergie Pendel, Euler-Rückwärts-Verfahren



Harmonischer Oszillator, implizites Verfahren 1. Ordnung, $\alpha = 0$
 $\Delta t = 0.05$ (schwarz), $\Delta t = 0.1$ (rot)

3.3 Verfahren höherer Ordnung

Euler-Verfahren konvergiert schlecht, liefert ungenaue, (unphysikalische) Ergebnisse.

Bei konservativen Systemen qualitativ falsches Verhalten.

Ausweg: Verfahren höherer Ordnung in Δt .

3.3.1 Verfahren von Heun

Zunächst eindimensionales System

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x) , \quad (3)$$

Integriere (3) über t

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' \frac{dx}{dt'} = x(t + \Delta t) - x(t) = \int_t^{t+\Delta t} dt' f(t', x(t')) \quad (4)$$

Ergibt exakte Iterationsvorschrift

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \int_t^{t+\Delta t} dt' f(t', x(t')) . \quad (5)$$

Euler-Methode, wenn Integral durch Rechteckregel genähert:

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' f(t', x) \approx f(t, x(t)) \Delta t .$$

durch genauere Trapezregel

$$\int_t^{t+\Delta t} dt' f(t', x) \approx \left(f(t, x(t)) + f(t + \Delta t, x(t + \Delta t)) \right) \frac{\Delta t}{2} ,$$

ergibt sich in (5)

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \left(f(t, x(t)) + f(t + \Delta t, x(t + \Delta t)) \right) \frac{\Delta t}{2} . \quad (6)$$

Rechte Seite enthält $x(t + \Delta t)$, deshalb implizite Vorschrift.

Berechnet man $x(t + \Delta t)$ rechts aus einem Euler-Verfahren

$$x(t + \Delta t) = x(t) + f(t, x(t)) \Delta t$$

ergibt sich

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \left(f(t, x(t)) + f(t + \Delta t, x(t)) + f(t, x(t)) \Delta t \right) \frac{\Delta t}{2} , \quad (7)$$

das Verfahren von Heun.

Genauigkeit

Von welcher Ordnung ist der Fehler beim Verfahren von Heun?

$$x(t + \Delta t) - x(t) = \left(f(x(t)) + f(x(t) + f(x(t)) \Delta t) \right) \frac{\Delta t}{2}$$

Entwickeln der linken Seite nach Δt

$$\begin{aligned} \text{L.S.} = & \frac{dx}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 x}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 x}{dt^3} \Delta t^3 + \dots = f \Delta t + \frac{1}{2} \frac{df}{dx} f \Delta t^2 \\ & + \frac{1}{6} \left(f^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + f \left(\frac{df}{dx} \right)^2 \right) \Delta t^3 + \dots, \end{aligned}$$

der rechten nach $f \Delta t$:

$$\text{R.S.} = \frac{\Delta t}{2} \left(2f + \frac{df}{dx} f \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} f^2 \Delta t^2 \right) + \dots,$$

wobei ... Terme der Ordnung Δt^4 bedeuten.

Beide Seiten stimmen bis zur Ordnung Δt^2 überein.

Fehler hat die Ordnung Δt^3

Numerische Stabilität

Wie beim Euler-Verfahren lässt Linearisierung um stabilen Fixpunkt

$$\vec{u}(t + \Delta t) = \underline{Q} \cdot \vec{u}(t)$$

$$\underline{Q} = \underline{1} + \Delta t \underline{L} + \frac{1}{2} \Delta t^2 \underline{L}^2$$

mit L als Jacobi-Matrix

$$L_{ij} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\vec{x}(0)} . \quad (8)$$

Numerische Stabilität folgt aus $\rho(\underline{Q}) < 1$, also

$$\rho = \max_i |1 + \Delta t \lambda_i + \frac{1}{2} \Delta t^2 \lambda_i^2| < 1$$

mit Eigenwerten λ_i von \underline{L} .

Beispiel harmonischer Oszillator:

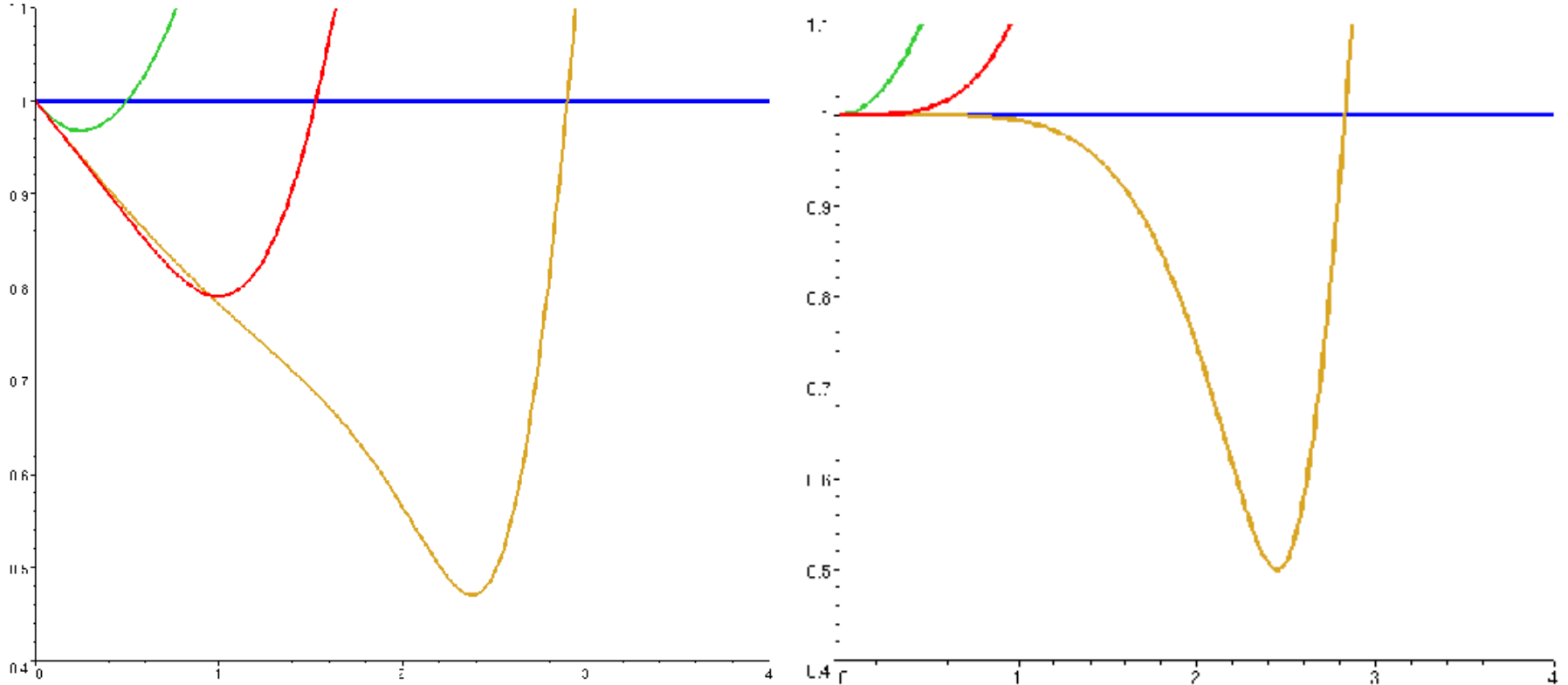
$$\lambda_{12} = -\frac{\alpha}{2} \pm \frac{1}{2}i\sqrt{4\Omega_0^2 - \alpha^2}$$

ergibt Bedingung für die Stabilitätsgrenze (maximaler Zeitschritt):

$$-\alpha + \frac{1}{2}\alpha^2\Delta t - \frac{1}{2}\alpha\Omega_0^2\Delta t^2 + \frac{1}{4}\Omega_0^4\Delta t^3 = 0 .$$

Maximaler Zeitschritt, der für $\alpha > 0$ größer als beim Eulerverfahren ist

Für ungedämpften Fall $\alpha = 0$ ist Heun-Verfahren für das Pendel immer noch bedingungslos instabil.



Spektralradien über Δt , harmonischer Oszillator, $\Omega_0 = 1$, links: gedämpft, $\alpha = 1/2$, rechts: ungedämpft, $\alpha = 0$. Grün: Euler, Rot: Heun, Gelb: Runge-Kutta (RK4).

3.3.2 Runge-Kutta-Verfahren

– Erhöhung der Ordnung wirkt sich positiv auf Schrittweite und Genauigkeit aus.

– Verfahren höherer Ordnung

Runge-Kutta-Verfahren (RK).

Normalerweise 4. Ordnung (RK4).

Der Einfachheit halber hier nur 2. Ordnung:

Sei $x = x(t)$ gesuchte Lösung der DGL

$$\dot{x} = f(t, x(t)) .$$

Man entwickelt x um $t + \Delta t/2$

$$x(t) = x(t + \Delta t/2) - \frac{\Delta t}{2} \dot{x}(t + \Delta t/2) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \ddot{x}(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^3)$$

$$x(t + \Delta t) = x(t + \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \dot{x}(t + \Delta t/2) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \ddot{x}(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^3)$$

Subtraktion der beiden Gleichungen

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \dot{x}(t + \Delta t/2) + O(\Delta t^3) ,$$

Iterationsvorschrift der Ordnung Δt^2 .

man muss $\dot{x} = f$ für $t + \Delta t/2$ kennen.

Euler-Verfahren:

$$\dot{x}(t + \Delta t/2) = f(t + \Delta t/2, x(t + \Delta t/2)) = f(t + \Delta t/2, x(t) + \Delta t/2 f(t, x(t))) + O(\Delta t^2) .$$

Ein Iterationsschritt sieht so aus:

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta t f(t, x(t)) \\ k_2 &= \Delta t f(t + \Delta t/2, x(t) + k_1/2) \\ x(t + \Delta t) &= x(t) + k_2 . \end{aligned} \tag{9}$$

Genauso lässt sich ein Verfahren 4. Ordnung (RK4) konstruieren:

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta t f(t, x(t)) \\ k_2 &= \Delta t f(t + \Delta t/2, x(t) + k_1/2) \\ k_3 &= \Delta t f(t + \Delta t/2, x(t) + k_2/2) \\ k_4 &= \Delta t f(t + \Delta t, x(t) + k_3) \\ x(t + \Delta t) &= x(t) + \frac{1}{6}(k_1 + k_2 + k_3 + k_4) . \end{aligned} \tag{10}$$

```

SUBROUTINE rk4(y,t,n,dt,eq)
C   integriert das dgl-System definiert in eq von t bis t+dt

C   y   abh. Variablen      y(n)
C   t   unabh. Variable
C   n   Anzahl der abh. Variablen
C   dt  Zeitschritt
C   eq  die rechten Seiten der dgls (subroutine)

REAL, DIMENSION(n) :: y
REAL, DIMENSION(size(y)) :: f1,f2,f3,f4

CALL eq(f1,y,t); f1=dt*f1
CALL eq(f2,y+.5*f1,t+dt/2.); f2=dt*f2
CALL eq(f3,y+.5*f2,t+dt/2.); f3=dt*f3
CALL eq(f4,y+f3,t+dt)
y=y+(f1+2.*f2+2.*f3+f4*dt)/6.
END

```

Fehler bei RK4 $O(\Delta t^5)$, die Stabilität (ohne Rechnung)

$$\rho = \max_i \left| 1 + \Delta t \lambda_i + \frac{1}{2} \Delta t^2 \lambda_i^2 + \frac{1}{6} \Delta t^3 \lambda_i^3 + \frac{1}{24} \Delta t^4 \lambda_i^4 \right| < 1 . \quad (11)$$

Beispiel: Mathematisches Pendel mit RK4

Als RK4-Anwendung wird das mathematische Pendel untersucht. RK4 liefert selbst für den problematischen ungedämpften Grenzfall $\alpha = 0$ konvergierende Ergebnisse.

Für kleine Zeitschritte wird Energie gut konserviert.

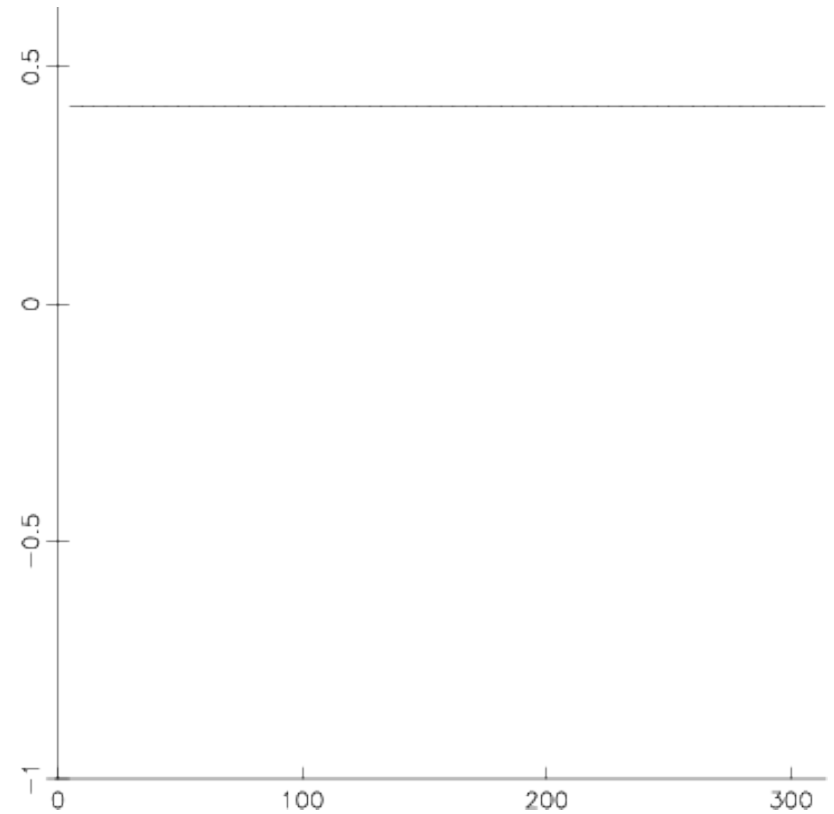
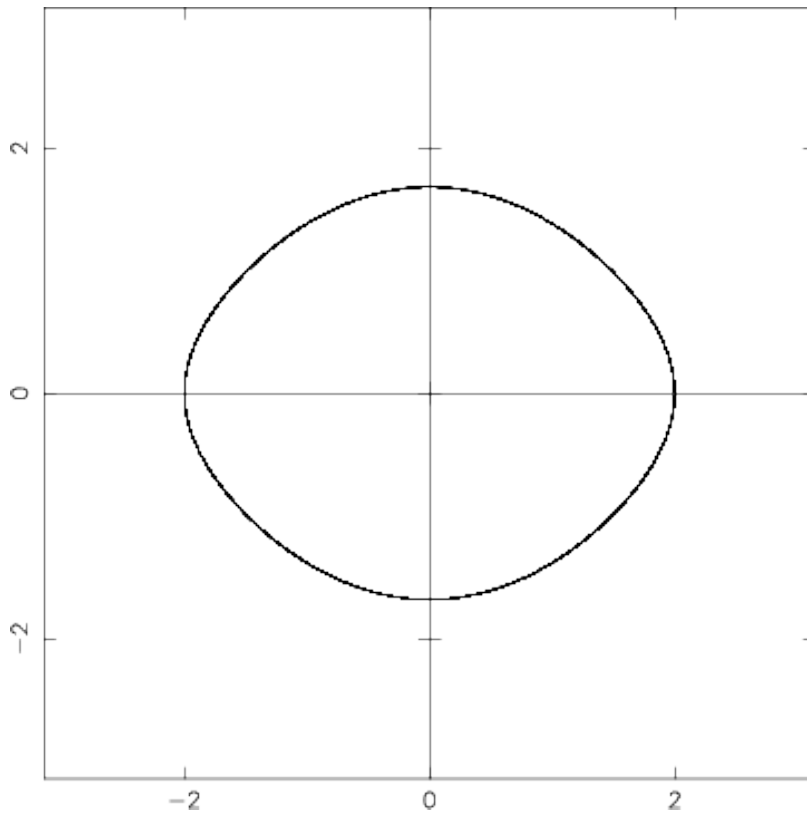
Programmbeispiel zur Berechnung einer Trajektorie, Anfangsbedingung $\varphi = 2$, $\omega = 0$:

```
PROGRAM pendel_rk4
REAL, DIMENSION(2) :: y      ! Variable phi, omega
...
y=(/2.,0./)    ! Anfangswert fuer phi und omega
t=0.; dt=0.01 ! dt am Anfang
DO             ! Beginn Zeitschleife
  t=t+dt
  CALL rk4(y,t,2,dt,pendel_dgl) ! Ein Zeitschritt RK4
...
  IF(t.GT.tend) EXIT
ENDDO
...
```

Steht die Routine *rk4* in der Programm-Library, so muss in der Datei in der das Hauptprogramm steht nur die Subroutine *pendel_dgl* spezifiziert werden.

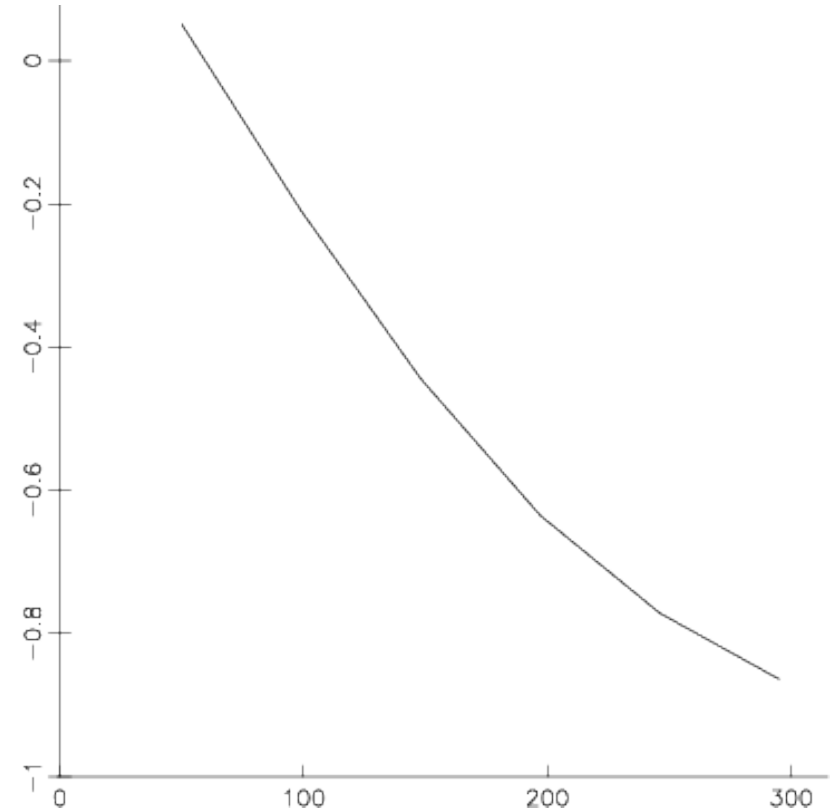
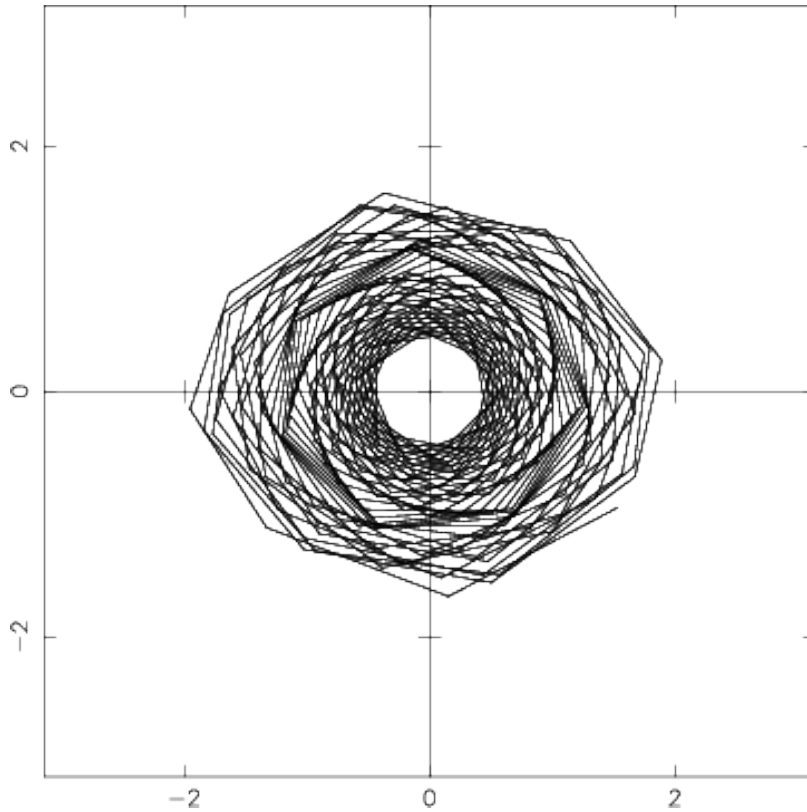
```
...  
CONTAINS    ! Dadurch sind alpha, omega bekannt (globale Variable)  
  SUBROUTINE pendel_dgl(rhside,y,t)  
    REAL, DIMENSION(2) :: rhside,y  
    rhside(1)=y(2)  
    rhside(2)=-alpha*y(2)-omega**2*SIN(Y(1))  
  END SUBROUTINE pendel_dgl  
  
END PROGRAM pendel_rk4
```

Das ungedämpfte mathematische Pendel ($\alpha = 0$) mit RK4



für $\Delta t = 0.1$ bleibt die Energie über viele Perioden in guter Näherung erhalten.

Das ungedämpfte mathematische Pendel ($\alpha = 0$) mit RK4



Bei zu großem Zeitschritt verfälscht die numerische Dämpfung das Resultat ($\Delta t = 1$)

Programm pendel_rk4

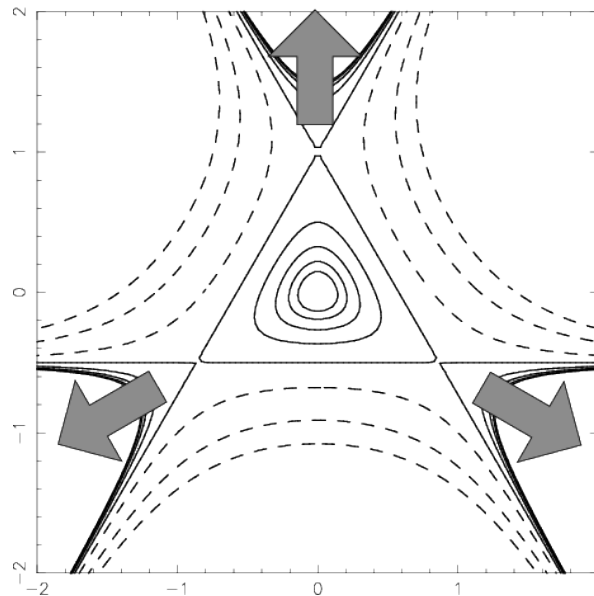
Beispiel: Hénon-Heiles-Modell

– zweidimensionale Bewegung in scheibenförmiger Galaxie

$$H(p_1, p_2, q_1, q_2) = E = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + V(q_1, q_2)$$

mit

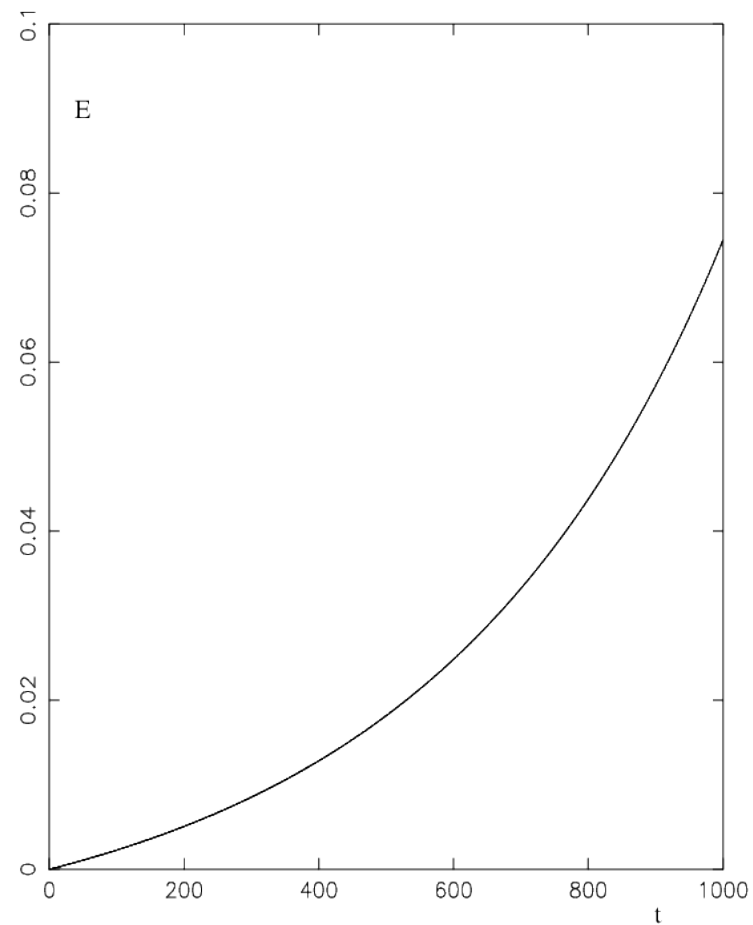
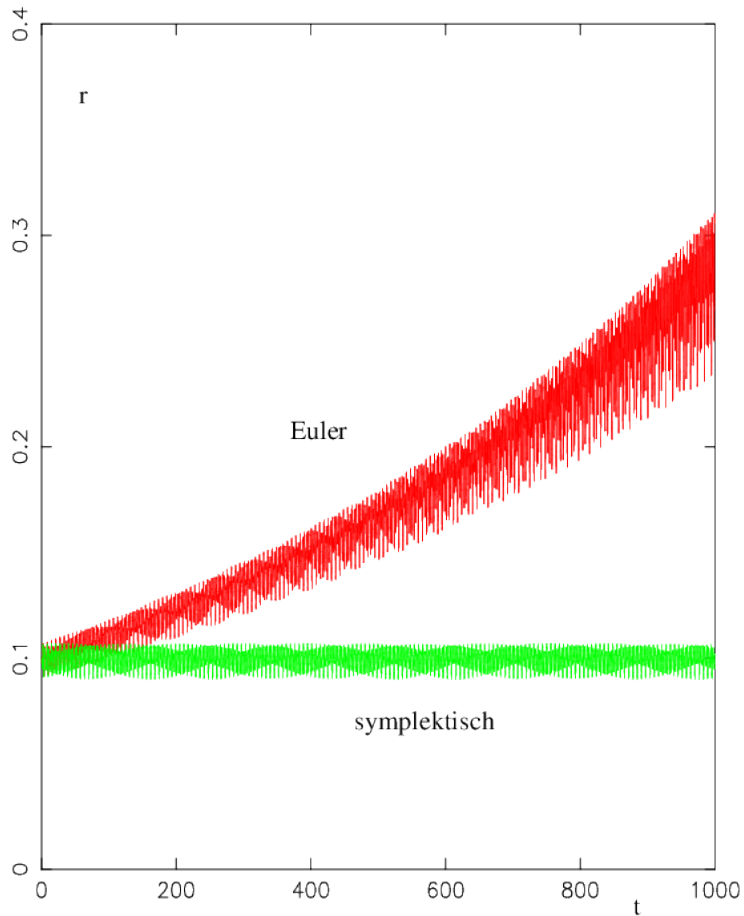
$$V(q_1, q_2) = \frac{1}{2}q_1^2 + \frac{1}{2}q_2^2 + q_1^2q_2 - \frac{1}{3}q_2^3$$



Bewegung beschränkt auf Umgebung des Ursprungs wenn

$$E < V_{\min} = \frac{1}{6}$$

Vergleich Euler (rot) und symplektische Integration



links: Abstand vom Ursprung, rechts: Energiedifferenz

Kanonische Gleichungen

$$d_t q_1 = p_1$$

$$d_t q_2 = p_2$$

$$d_t p_1 = -q_1 - 2q_1 q_2$$

$$d_t p_2 = -q_2 - q_1^2 + q_2^2$$

Symplektisch:

$$p_{1,n+1} = p_{1,n} - (q_{1,n} + 2q_{1,n}q_{2,n}) \Delta t$$

$$p_{2,n+1} = p_{2,n} - (q_{2,n} + q_{1,n}^2 - q_{2,n}^2) \Delta t$$

$$q_{1,n+1} = q_{1,n} + p_{1,n+1} \Delta t$$

$$q_{2,n+1} = q_{2,n} + p_{2,n+1} \Delta t$$