

# Zusammenfassung: Kapitel 1

- Sei  $D \subset \mathbb{R}^n$  ein offenes Gebiet und  $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$  genügend differenzierbar. Für  $t_0 \in \mathbb{R}$  und  $y_0 \in D$  betrachten wir die *gewöhnliche Differentialgleichung*

$$\begin{aligned} \dot{y} &= f(y), \\ y(t_0) &= y_0. \end{aligned}$$

Der *Fluss*  $\varphi_t : y_0 \mapsto y(t, 0, y_0)$  dieser Gleichung bildet eine 1-Parameter Gruppe.

- Sei  $h = t_{n+1} - t_n$  eine Schrittweite, wir betrachten das *numerische Fluss*  $\Phi_h : y_n \mapsto y_{n+1}$  gegeben, z.B., durch ein Einschrittverfahren.

Bsp: *Explizites Euler-Verfahren; Implizites Euler-Verfahren; Mittelpunktsregel; Symplektisches Euler-Verfahren bei partitionierte System; Störmer-Verlet Verfahren.*

- Die *Hamilton-Gleichungen* lauten

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\nabla_q H(p, q), \\ \dot{q} &= \nabla_p H(p, q), \end{aligned}$$

wobei  $H : D \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$  die *Hamilton-Funktion* ist, und  $\nabla_p H(p, q) := \left(\frac{\partial H}{\partial p}(p, q)\right)^T$ . Man hat *Energie-Erhaltung*:  $H(p(t), q(t)) = H(p_0, q_0)$  entlang der exakten Lösung  $(p(t), q(t))$  für alle Zeit  $t > 0$ .

Bsp: Kepler-Problem; Sonnensystem; Moleküldynamik; etc.

- Wir haben gesehen, dass das Störmer-Verlet Verfahren und das symplektische Euler-Verfahren gewünschte geometrische Eigenschaften zeigen. Die „klassischen“ Verfahren nicht. Ziel der Vorlesung: eine Erklärung zu finden ...