Technische Universität Dortmund

Lehrstuhl III
Angewandte Mathematik und Numerik

Operator Splitting Methoden

Seminararbeit

Janina Betz
Matrikelnummer: 130407

Betreuung:
Prof. Dr. Stefan Turek
Dr. Andriy Sokolov

9. Februar 2014

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis **ii**

1 Einleitung **1**

2 Grundlagen des Operator Splittings **3**

3 Splitting Verfahren erster Ordnung **6**

3.1 Lie-Trotter Splitting 6

3.2 Additive Splitting 8

4 Splitting Verfahren zweiter Ordnung **10**

4.1 Strang Splitting 10

4.2 Symmetrically Weighted Splitting 11

5 Splitting Verfahren höherer Ordnung **14**

Literaturverzeichnis **16**

Abbildungsverzeichnis

2.1 Splitting eines Vektorfeldes 3

Kapitel 1

Einleitung

Operator Splitting Verfahren ermöglichen die Untersuchung komplexer numerischer Modelle. Insbesondere bei physikalischen Prozessen im Bereich der Umweltphysik sowie der Schadstoffverunreinigung in der Luft hat das Operator Splitting bereits in den 90er Jahren Anwendung gefunden. Heute sind es häufig Untersuchungen zu komplexen Prozessen wie Diffusion oder Konvektion, bei denen das Operator Splitting hinzugezogen wird. So werden komplexe physikalische Abläufe häufig mit Hilfe linearer oder nicht linearer partieller Differentialgleichungen ausgedrückt. Die Komplexität dieser Modellierung führt vielmals dazu, dass eine numerische Lösung in angemessener Zeit mit akzeptablem Resultat nicht erzielt werden kann. Einer besseren Behandlung dieser schwierigen Modelle bemüht, wurden bereits in den 60er und 70er Jahren erste Splitting-Methoden auf Grundlage von Finite-Differenzen entwickelt. Die Arbeit von Gilbert Strang ([8]) fundiert als Grundlage für Verfahren höherer Ordnung zur Anwendung auf unterschiedliche partielle Differentialgleichungen, welche in der 80er Jahren weiterentwickelt wurden (vgl. [2]).

Die Grundidee des Operator Splitting besteht darin, komplexe Probleme in mehrere Teilprobleme zu spalten und diese separat voneinander mit einer vorgegebenen Schrittweite zu lösen. Die Ergebnisse der einfacher zu lösenden Teilprobleme werden schließlich über ihre Anfangsbedingungen miteinander verbunden und liefern somit eine Approximation der Lösung des Gesamtproblems (vgl. [6]). Der dabei entstehende sogenannte Splitting-Fehler gibt Aufschluss über die Genauigkeit des jeweiligen Verfahrens. Der entscheidende Vorteil dieses Vorgehens besteht darin, schwierige Differentialgleichungen aufzuspalten und die einzelnen Teilprobleme deutlich einfacher untersuchen und lösen zu können. Es existieren hierfür verschiedene Methoden unterschiedlicher Ordnung. Als klassische Splitting Methoden gelten das Lie-Trotter Splitting, das Strang Splitting (vgl. [8], [4]) und das Symmetrically Weighted Splitting (vgl. [8], [3]), welche ihre Ursprünge jeweils

in den 60er Jahren haben und sich seitdem in zahlreichen Forschungen wiederfinden.

Gegenstand dieser Arbeit ist zunächst die grundlegende Methodik des Operator Splittings. Welche Voraussetzungen und Strukturen die zu behandelnden Probleme aufweisen müssen, um eine Anwendbarkeit der Splitting Verfahren zu ermöglichen, wird ebenfalls in der Einführung dargestellt. Im Anschluss daran werden unter Verwendung der Arbeit von Y. Yazici (siehe [9]) die einzelnen Splitting Verfahren unterschiedlicher Ordnung erörtert. Als Verfahren erster Ordnung wird neben dem Lie-Trotter Splitting ebenfalls das Additive Splitting vorgestellt. Nachfolgend werden die Splitting Methoden zweiter Ordnung, das Strang Splitting und das Symmetrically Weighted Splitting, untersucht. Jedes Verfahren wird ebenfalls hinsichtlich seiner Genauigkeit durch den jeweiligen Splitting-Fehler untersucht. Nach diesen konkreten Methoden erfolgt bezüglich des Operator Splittings höherer Ordnung eine allgemeine Untersuchung der Herangehensweise an derartige Probleme. Schließlich werden verschiedene Methoden zweiter und höherer Ordnung miteinander verglichen, wodurch die Anwendbarkeit der unterschiedlichen Verfahren beurteilt werden kann.

Kapitel 2

Grundlagen des Operator Splittings

Die unterschiedlichen Operator Splitting Methoden werden insbesondere bei der Behandlung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen genutzt. Hierbei lässt sich das komplexe Problem als eine Summe einzelner Teilprobleme darstellen, welche sukzessive über die Zeit separat gelöst werden. Die numerische Lösung des Gesamtproblems kann anschließend auf die Kombination der Teillösungen zurückgeführt werden. Bei der Anwendung von Splitting Methoden wird vorausgesetzt, dass das entsprechende mathematische Problem in zwei oder mehr Terme teilbar ist. Dieses Verfahren erlaubt eine sehr effiziente und oftmals relativ genaue Lösung komplexer Modelle, da alle Teilprobleme unabhängig voneinander behandelt werden (vgl. [5]). Im Allgemeinen existieren zwei unterschiedliche Arten von Modellen, auf die das Operator Splitting angewendet wird. In dem ersten Fall beziehen sich die Teilprobleme jeweils auf einen physikalischen Prozess, wie Konvektion, Diffusion, etc. In dem anderen Fall repräsentieren die einzelnen Teilprobleme des Differentialoperators je eine Ableitung in Richtung einer Koordinatenachse. Anschaulich lässt sich die Idee des Operator Splittings bezüglich eines Vektorfeldes vereinfacht wie in Abbildung 2.1 (in Anlehnung an [7], S. 404) darstellen.

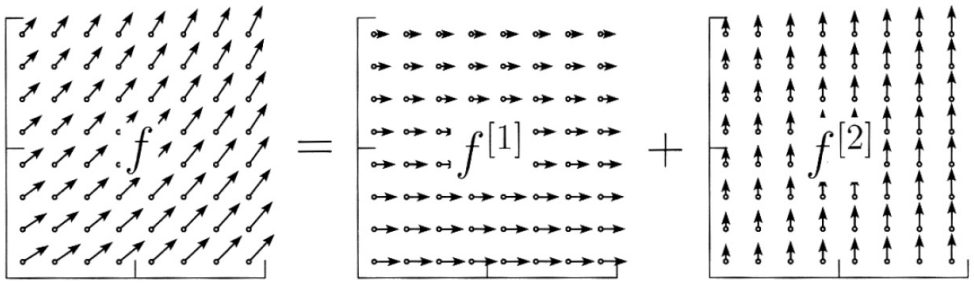


Abbildung 2.1: Splitting eines Vektorfeldes

Hierbei wird das Vektorfeld f in die Summe zweier Vektorfelder $f^{[1]}$ und $f^{[2]}$ aufgesplittet. Für beide Vektorfelder lassen sich die exakten Richtungen leicht separat bestimmen und beschreiben anschließend miteinander verknüpft das ursprüngliche Feld. Um die analytische Vorgehensweise des Operator Splittings zu erläutern, wird das Cauchy Problem herangezogen:

$$\frac{\partial U(t)}{\partial t} = AU(t) + BU(t), t \in [0, T], U(0) = U_0. \tag{2.1}$$

Der Differentialoperator wird als Summe einfacher Operatoren dargestellt. A und B stellen zwei beschränkte lineare Operatoren $A, B : X \to X$ im Banachraum X dar. U_0 wird als gegeben vorausgesetzt und $U(t) = e^{(A+B)t}U_0$ gibt die Lösung von (2.1) zum Zeitpunkt t mit dem Anfangswert $U(0) = U_0$ an. Eine derartige unmittelbare Lösung ist praktisch jedoch nicht umsetzbar, beziehungsweise rechentechnisch zu aufwändig. Um dennoch eine Lösung des Problems zu generieren, wird eine Approximation der Exponentialfunktion mit möglichst großer Schrittweite genutzt. Φ_t ist hierbei eine Abbildung höherer Ordnung und genügt der Gleichung

$$\Phi_t = e^{(A+B)t} + \mathcal{O}(t^{p+1}), \tag{2.2}$$

wobei t eine äquidistante Schrittweite ist, A und B nicht kommutative Operatoren sind und p die Ordnung angibt. Zur Realisierung einer solchen Methode höherer Ordnung wird Φ in der Regel aus mehreren Exponentialfunktionen zusammengesetzt. So erhält man die häufig genutzte Form

$$\Phi_t = e^{a_m Bt} e^{b_m At} \dots e^{a_2 Bt} e^{b_2 At} e^{a_1 Bt} e^{b_1 At}. \tag{2.3}$$

Die Parameter $(a_1, \dots, a_m)$ und $(b_1, \dots, b_m)$ sind frei wählbare reelle Zahlen und m gibt in der Regel die Anzahl der Schritte innerhalb des Splitting Verfahrens an (vgl. [1]). Mit Hilfe der Komposition mehrerer Exponentialfunktionen lässt sich schließlich die folgende Approximation angeben:

$$e^{t(A+B)} = \prod_{i=1}^{m} e^{a_i tA} e^{b_i tB} + \mathcal{O}(t^{m+1}). \tag{2.4}$$

Jede exponentielle Operator Splitting Methode mit mehreren Kompositionen lässt sich in der Form (2.4) darstellen. So wird beispielsweise das Lie-Trotter Verfahren mit den entsprechenden Parametern

$$m = 1, a_1 = 1, b_1 = 1 \quad \text{bzw.} \quad m = 1, a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = 1, b_2 = 0$$

in die allgemeine Schreibweise gebracht. Dementsprechend wird die numerische Lösung des Splitting Problems erster Ordnung mit dem Lie-Trotter Verfahren angegeben durch

$$y_1 = e^{Bt}e^{At}y_0 \quad \text{bzw.} \quad y_1 = e^{At}e^{Bt}y_0.$$

Das Strang Splitting Verfahren zweiter Ordnung kann mit den folgenden Parametern in die Form (2.4) umgeformt werden:

$$m = 2, a_1 = a_2 = \frac{1}{2}, b_1 = 1, b_2 = 0$$

bzw.

$$m = 2, a_1 = 0, a_2 = 1, b_1 = b_2 = \frac{1}{2}$$

und liefert somit eine numerische Lösung des Problems in der Form

$$y_1 = e^{At/2}e^{Bt}e^{At/2}y_0 \quad \text{bzw.} \quad y_1 = e^{Bt/2}e^{At}e^{Bt/2}y_0.$$

Auf Basis dieser Grundlagen des Operator Splittings werden in den folgenden Abschnitten die jeweiligen Methoden konkret erörtert und hinsichtlich ihrer Genauigkeit untersucht. Zunächst werden in dem nächsten Kapitel die Verfahren erster Ordnung betrachtet. Hierzu zählen das Lie-Trotter Splitting und das Additive Splitting.

Kapitel 3

Splitting Verfahren erster Ordnung

3.1 Lie-Trotter Splitting

Das Lie-Trotter Splitting wird auf eine Differentialgleichung (2.1) angewendet, welche sich wie bereits erwähnt, in mehrere Komponenten teilen lässt. In diesem Fall wird das Problem in zwei Teilprobleme gesplittet, die nacheinander separat auf den Teilintervallen $[t^n, t^{n+1}]$ gelöst werden. Anschließend werden die Teilprobleme über ihre Anfangswerte wieder miteinander verknüpft. Hierbei ist t eine äquidistante Schrittweite mit $t^0 = 0$ und $t^N = T$, für $n = 0, \ldots, N-1$. Der Algorithmus des Lie-Trotter Verfahrens stellt sich wie folgt dar:

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = Au(t) \qquad \text{mit } t \in [t^n, t^{n+1}] \text{ und } u(t^n) = u_{sp}^n \tag{3.1}$$

$$\frac{\partial v(t)}{\partial t} = Bv(t) \qquad \text{mit } t \in [t^n, t^{n+1}] \text{ und } v(t^n) = u(t^{n+1}) \tag{3.2}$$

Die Anfangswerte $u_{sp}^n = U_0$ sind hierbei durch (2.1) vorgegeben. Der Algorithmus liefert eine approximative Split-Lösung zum Zeitpunkt $t = t^{n+1}$, welche definiert ist durch $u_{sp}^{n+1} = v(t^{n+1})$. Um zu überprüfen, dass $v(\triangle t)$ tatsächlich eine Approximation von $U(\triangle t)$ darstellt, wird eine Taylorentwicklung sowohl für das ursprüngliche Lösung U als auch für die approximative Lösung $v(\triangle t)$ durchgeführt. Es ergibt sich

$$U(\triangle t) = U_0 + \triangle t \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\triangle t^2}{2!} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\triangle t^3)$$

für das ursprüngliche Problem, wobei

$$\frac{\partial U}{\partial t} = (A + B)U$$

ist (vgl. (2.1)). Sind A und B unabhängig von t, erhält man daraus durch einfache Differentiation

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = (A+B)(A+B)U,$$

was äquivalent ist zu

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = (A+B)^2 U.$$

Wird dieser Ausdruck in die Taylorentwicklung eingesetzt, ergibt sich für die Lösung des ursprünglichen Problems die Darstellung

$$U(\triangle t) = U_0 + \triangle t(A+B)U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!}(A+B)^2 U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3). \tag{3.3}$$

Das gleiche Vorgehen wird für u aus (3.1) durchgeführt. Nachdem alle Schritte äquivalent ausgeführt sind, erhält man die Lösung:

$$u(\triangle t) = U_0 + \triangle t A U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!} A^2 U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3). \tag{3.4}$$

Die zwei separaten Probleme werden nun miteinander verknüpft, indem die Taylorentwicklung des zweiten Teilproblems (3.2) mit $u(\triangle t)$ als Startwert gebildet wird. Diese lautet somit zunächst

$$v(\triangle t) = u(\triangle t) + \triangle t B u(\triangle t) + \frac{\triangle t^2}{2!} B^2(\triangle t) + \mathcal{O}(\triangle t^3), \tag{3.5}$$

was nach dem Einsetzen von (3.4) in (3.5) zu einer Taylorentwicklung der Split-Lösung von

$$v(\triangle t) = U_0 + \triangle t(A+B)U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!}(A^2 + 2BA + B^2)U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3) \tag{3.6}$$

führt. Um den Split-Fehler des Lie-Trotter Splittings zu ermitteln, wird abschließend im Zeitpunkt $\triangle t$ die Differenz der beiden Lösungen von $v(\triangle t)$ und $U(\triangle t)$ untersucht. Unter Verwendung von (3.3) und (3.6) erhält man diesbezüglich die Lösung:

$$\frac{v(\triangle t) - U(\triangle t)}{\triangle t} = \frac{\triangle t}{2}[A,B]U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^2).$$

Der Ausdruck $[A,B]$ ist der Kommutator von A und B und ist definiert als $[A,B] := AB - BA$. Das bedeutet, dass das Lie-Trotter Verfahren eine Genauigkeit erster Ordnung $\mathcal{O}(\triangle t)$ aufweist, falls die Operatoren nicht kommutieren. Sofern sie kommutieren ist die Methode exakt, da der Split-Fehler in diesem Falle 0 beträgt (vgl. [6], S. 38).

3.2 Additive Splitting

Das Additive Splitting gehört wie das Lie-Trotter Splitting zu den Verfahren erster Ordnung. Die grundlegende Idee und der entscheidende Unterschied zu dem Lie-Trotter Splitting besteht darin, dass die beiden Teilprobleme die gleiche Anfangsfunktion haben. So werden die Teilprobleme nacheinander auf den Teilintervallen $[t^n, t^{n+1}]$ mit $t^0 = 0$ und $t^N = T$ unabhängig voneinander gelöst. Der zugehörige Algorithmus lässt sich wie folgt darstellen:

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = Au(t) \qquad \text{mit } t \in [t^n, t^{n+1}] \text{ und } u(t^n) = u_{sp}^n \tag{3.7}$$

$$\frac{\partial v(t)}{\partial t} = Bv(t) \qquad \text{mit } t \in [t^n, t^{n+1}] \text{ und } v(t^n) = u_{sp}^n \tag{3.8}$$

$$u_{sp}^{n+1} = u(t^{n+1}) + v(t^{n+1}) - u_{sp}^n \tag{3.9}$$

Bei den Berechnungsschritten lässt sich der Unterschied zu dem Lie-Trotter Verfahren unmittelbar erkennen. Im Gegensatz zu vorher wird sowohl bei (3.7) als auch bei (3.8) der Anfangswert u_{sp}^n (gegeben durch das ursprüngliche Problem (2.1)) als Startwert für beide Funktionen $u(t^n)$ und $v(t^n)$ definiert. Dadurch wird eine unabhängige Berechnung der Teilprobleme realisiert, sodass sie keinerlei Einfluss aufeinander ausüben. Um anschließend die Lösung des ursprünglichen Problems zu bestimmen, werden innerhalb des letzten Terms (3.9) die Lösungen der beiden Teilprobleme addiert und die Anfangsbedingung u_{sp}^n wird subtrahiert, damit diese nicht zweifach in die Split-Lösung einbezogen wird.

Nun wird wie zuvor eine Taylorentwicklung der Teilprobleme durchgeführt, um die Genauigkeit des Verfahrens beurteilen zu können. Mit Hilfe beider Approximationen $u(\triangle t)$ und $v(\triangle t)$ bezüglich (3.7) und (3.8) sowie der Gleichung (3.9) ergibt sich die Taylorentwicklung von $u_{sp}(\triangle t)$ als:

$$u_{sp}(\triangle t) = U_0 + \triangle t A U_0 + \frac{\triangle t^2 A^2}{2} U_0 + U_0 + \triangle t B U_0 + \frac{\triangle t^2 B^2}{2} U_0 - U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3) \tag{3.10}$$

Um den Split-Fehler zu ermitteln, wird wieder die Differenz zu der Taylorentwicklung des ursprünglichen Problems im Zeitpunkt $\triangle t$ bestimmt, welche aus dem vorherigen Kapitel bereits vorliegt. Somit ergibt sich unter Einbezug von (3.3) und (3.10) ein Split-Fehler

des Additive Splittings von

$$\frac{u_{sp}(\triangle t) - U(\triangle t)}{\triangle t} = \frac{\triangle t}{2}(BA + AB)U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^2).$$

Es lässt sich unmittelbar erkennen, dass dieses Verfahren eine Genauigkeit erster Ordnung aufweist, welche wiederum nicht davon abhängt, ob die Operatoren A und B kommutieren oder nicht.

Nachdem nun zwei Vertreter der Operator Splitting Methoden erster Ordnung vorgestellt wurden, beinhaltet das nachfolgende Kapitel die beiden Splitting Verfahren zweiter Ordnung, das Strang Splitting und das Symmetrically Weighted Splitting.

Kapitel 4

Splitting Verfahren zweiter Ordnung

4.1 Strang Splitting

Das Strang Splitting Verfahren ist eine weitverbreitete und häufig verwendete Operator Splitting Methode. Der Vorteil dieses Verfahrens zweiter Ordnung besteht darin, dass mit nur kleinen Modifikationen ein Splitting Verfahren mit einer Genauigkeit zweiter Ordnung generiert wird. Im Gegensatz zu den bereits vorgestellten Methoden werden die beiden Teilprobleme nicht nacheinander über die vollständige Schrittweite $\triangle t$ berechnet. Innerhalb des Strang Splittings wird zunächst das erste Teilproblem über eine halbe Schrittweite $\triangle t/2$ gelöst und liefert den Startwert für die Berechnung des zweiten Teilproblems über die volle Schrittweite $\triangle t$. Dieses generiert wiederum den Startwert, um das erste Problem nochmal auf einem Zeitintervall der Länge $\triangle t/2$ zu berechnen. Die entsprechenden Schritte können wie folgt notiert werden:

$$\frac{\partial u(t)}{\partial t} = Au(t) \qquad , t \in [t^n, t^{n+1/2}] \qquad u(t^n) = u_{sp}^n \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial v(t)}{\partial t} = Bv(t) \qquad , t \in [t^n, t^{n+1}] \qquad v(t^n) = u(t^{n+1/2}) \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial w(t)}{\partial t} = Aw(t) \qquad , t \in [t^{n+1/2}, t^{n+1}] \qquad w(t^{n+1/2}) = v(t^{n+1}) \tag{4.3}$$

Die modifizierte Schrittweite $t^{n+1/2} = t^n + 0.5\triangle t$ geht jeweils in die Berechnung (4.1) und (4.3) ein. Die approximative Split-Lösung nach dem dritten Schritt des Algorithmus in $t = t^{n+1}$ ist definiert als $u_{sp}^{n+1} = w(t^{n+1})$. Für den Nachweis, dass das Strang Splitting tatsächlich eine Genauigkeit zweiter Ordnung aufweist, werden wieder die Taylorentwicklungen mit dem jeweiligen Startwert des vorherigen Schrittes gebildet. Zunächst wird das Teilproblem (4.1) mit dem Startwert des Ausgangsproblems über das Zeitintervall $\triangle t/2$

approximiert und es ergibt sich:

$$u(\triangle t/2) = U_0 + \frac{\triangle t}{2} AU_0 + \frac{\triangle t^2}{4} A^2 U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3).$$

Mit $u(\triangle t/2)$ als Startwert wird die Taylorentwicklung für die Lösung des zweiten Schrittes (4.2) aufgestellt:

$$v(\triangle t) = U_0 + \frac{\triangle t}{2} AU_0 + \triangle t BU_0 + \frac{\triangle t^2}{8} A^2 U_0 + \frac{\triangle t^2}{2} ABU_0 + \frac{\triangle t^2}{2} B^2 U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3).$$

Schließlich dient dieses Ergebnis als Startwert für die Taylorentwicklung des dritten Schrittes (4.3), welche zudem die Split-Lösung des Strang Splittings darstellt:

$$w(\triangle t) = U_0 + \triangle t(A+B)U_0 + \frac{\triangle t^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2)U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3).$$

Die Split-Lösung wird wieder mit der ursprünglichen Lösung (3.3) verglichen, sodass sich ein Split-Fehler von

$$\frac{w(\triangle t) - U(\triangle t)}{\triangle t} = \mathcal{O}(\triangle t^3)$$

ergibt. Es ist somit nachgewiesen, dass das Strang Splitting eine Genauigkeit zweiter Ordnung erreicht.

4.2 Symmetrically Weighted Splitting

Das in Kapitel 3.1 vorgestellte Lie-Trotter Verfahren ist lediglich für kommutative Operatoren symmetrisch und liefert eine Genauigkeit erster Ordnung. Da allerdings bei zahlreichen praktischen Anwendungen eine höhere Genauigkeit erfordert ist und die Kommutativität der Operatoren eine Einschränkung darstellt, wird ein modifiziertes Verfahren benötigt. Das Symmetrically Weighted Splitting ist hinsichtlich der Operatoren symmetrisch und erreicht eine Genauigkeit zweiter Ordnung innerhalb des Vergleichs zu dem ursprünglichen Problem. Das Vorgehen bei dieser Operator Splitting Methode stellt sich zunächst äquivalent zu dem des Lie-Trotter Splitting dar. Denn die beiden Teilprobleme werden in den ersten beiden Schritten genau wie bei dem Lie-Trotter Verfahren nacheinander auf den Teilintervallen $[t^n, t^{n+1}]$ mit $t^0 = 0$ und $t^N = T$, für $n = 0, \ldots, N-1$ gelöst. Im Anschluss daran wird jedoch nicht unmittelbar die Split-Lösung ermittelt, wodurch das Ergebnis von der Reihenfolge nicht-kommutativer Operatoren abhängig wäre. Stattdessen werden die beiden Schritte mit den zwei Teilproblemen in umgekehrter Rei-

henfolge wiederholt. Der zugehörige Algorithmus wird wie folgt formalisiert:

$$\frac{\partial u_1(t)}{\partial t} = Au_1(t) \qquad u_1(t^n) = u_{sp}^n \tag{4.4}$$

$$\frac{\partial v_1(t)}{\partial t} = Bv_1(t) \qquad v_1(t^n) = u_1(t^{n+1}) \tag{4.5}$$

$$\frac{\partial u_2(t)}{\partial t} = Bu_2(t) \qquad u_2(t^n) = u_{sp}^n \tag{4.6}$$

$$\frac{\partial v_2(t)}{\partial t} = Av_2(t) \qquad v_2(t^n) = u_2(t^{n+1}) \tag{4.7}$$

Da durch dieses Verfahren zwei Lösungen für die jeweiligen Operatorenreihenfolgen bestimmt werden, ist die approximative Split-Lösung in t^{n+1} definiert durch

$$u_{sp}^{n+1} = \frac{v_1(t^{n+1}) + v_2(t^{n+1})}{2},$$

wodurch beide Lösungen gleichermaßen Berücksichtigung finden und die Symmetrie dieser Methode gewährleistet wird. Der Nachweis, dass tatsächlich eine Genauigkeit zweiter Ordnung erreicht wird, erfolgt wie gehabt mit Hilfe der Taylorentwicklung. Für das erste Teilproblem u_1 aus (4.4) ergibt sich:

$$u_1(\triangle t) = U_0 + \triangle t A U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!} A^2 U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3) \tag{4.8}$$

Mit (4.8) als Anfangswert für die Taylorentwicklung von (4.5) erfolgt für v_1 der Ausdruck:

$$v_1(\triangle t) = U_0 + \triangle t(A+B)U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!}(A^2 + 2BA + B^2)U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3) \tag{4.9}$$

Gleichermaßen werden die beiden Taylorentwicklungen der Schritte (4.6) und (4.7) ermittelt, was zu folgender Lösung von v_2 führt:

$$v_2(\triangle t) = U_0 + \triangle t(A+B)U_0 + \frac{\triangle t^2}{2!}(A^2 + 2BA + B^2)U_0 + \mathcal{O}(\triangle t^3). \tag{4.10}$$

Da für die Split-Lösung des Symmetrically Weighted Splitting die Formel

$$u_{sp}^{n+1} = \frac{v_1(t^{n+1}) + v_2(t^{n+1})}{2}$$

gilt, folgt unter Berücksichtigung der Lösung (3.3) des ursprünglichen Problems für den Split-Fehler

$$\frac{u_{sp}(\triangle t) - U(\triangle t)}{\triangle t} = \mathcal{O}(\triangle t^3),$$

wodurch die Genauigkeit zweiter Ordnung bestätigt ist.

Kapitel 5

Splitting Verfahren höherer Ordnung

Die Operator Splitting Verfahren, welche in den vorherigen Kapiteln untersucht wurden, besitzen eine maximale Genauigkeit zweiter Ordnung. Viele Anwendungsgebiete erfordern jedoch weitaus genauere Approximationen der entsprechenden Differentialgleichungen. Dadurch wird ein höherer Rechenaufwand verursacht, der allerdings insbesondere in der Quantendynamik nicht zu umgehen ist. Das Operator Splitting höherer Ordnung findet in der Quantendynamik häufig Anwendung bei der Approximation von $e^{(A+B)t}$. Die Konstruktion von Splitting Verfahren höherer Ordnung basiert auf der Baker-Campbell-Hausdorff Formel, welche das Produkt zweier Exponentialfunktionen zusammenfasst zu einer neuen Funktion:

$$e^{At}e^{Bt} = e^{\hat{A}t}$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{\mathrm{A}} =&(A+B) + \frac{1}{2}t[B,A] + \frac{1}{12}t^2([B,[B,A]] + [A,[A,B]]) \\ &+ \frac{1}{24}t^3[B,[A,[A,B]]] + \mathcal{O}(t^4).\end{aligned}$$

Für den Fall, dass A und B kommutieren entfallen offensichtlich die Terme höherer Ordnung und es gilt $\hat{\mathrm{A}} = A + B$. Die Berechnung dieses Ausdruckes basiert auf der gleichen Formel, die bereits für die Verfahren erster und zweiter Ordnung verwendet wurde:

$$e^{t(A+B)} = \prod_{i=1}^{m} e^{a_i t A}e^{b_i t B} + \mathcal{O}(t^{m+1}).$$

Hierbei sind A und B nicht kommutative Operatoren, t ist eine äquidistante Schrittweite und $(a_1, a_2, \dots)$, $(b_1, b_2, \dots)$ sind reelle Zahlen. Wie zuvor für das Lie-Trotter und das Strang Splitting (s. Seite 4-5) müssen die entsprechenden Koeffizienten angegeben

werden. Für eine Splitting Methode vierter Ordnung sind dies beispielsweise:

$$a_1 = a_4 = \frac{1}{2(2-2^{1/3})}, \qquad a_2 = a_3 = \frac{1-2^{1/3}}{2(2-2^{1/3})}$$
$$b_1 = b_3 = \frac{1}{2-2^{1/3}}, \qquad b_2 = -\frac{2^{2/3}}{2-2^{1/3}}, \qquad b_4 = 0.$$

Es existieren hierzu verschiedenste Methoden zahlreicher Autoren, die unterschiedlich viele Kompositionen verwendet haben. Eine Auswahl von exponentiellen Operator Splitting Verfahren sind in folgender Tabelle zusammengefasst:

Methode	Ordnung	# Kompos.
Mclachan	2	3
Strang	2	2
Blanes-Moan (MB4-2)	4	7
Suzuki (S4)	4	6
Yoshida (Y4)	4	4
Kahan	6	10
Suzuki (S6)	6	26
Yoshida (Y6)	6	8
Blanes-Moan (BM6-1)	6	11

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass Operator Splitting Verfahren die Möglichkeit bieten, schwierige Differentialgleichungen zu behandeln und je nach erforderlichem Genauigkeitsgrad mit unterschiedlichen Verfahren zu lösen. Die Verfahren erster und zweiter Ordnung können mit wenig Rechenaufwand angewendet werden, da die Anzahl an Kompositionen der einzelnen Teilprobleme sehr gering ist. Bei aufwändigeren Verfahren kann eine höhere Genauigkeit erzielt werden, was allerdings in der Regel mit einem signifikanten Anstieg an Kompositionen und somit an Rechenaufwand einhergeht.

Literaturverzeichnis

[1] Castella, F. et al.: Splitting methods with complex times for parabolic equations. In: BIT Numer Math, 49. Jg. 2009, S. 487-508.

[2] Crandall, M.G.; Majda, A.: The method of fractional steps for conservation laws. In: Math. Comp., 34. Jg. 1980, S. 285-314.

[3] Csomós, P.; Faragó, I.; Havasi, Á.: Weighted sequential splittings and their analysis. In: Comp. Math. Appl., Jg. 2005, Heft 50, S.1017-1031.

[4] Dimov, I.; Havasi, Á.; Zlatev, Z.: L-commutativity of the operators of splitting methods for air pollution models. In: Annales Univ. Sci. Sec. Math., Jg. 2001, Heft 44, S.127-148.

[5] Faragó, I.; Gnandt, B.; Havasi, Á.: Additive and iterative operator splitting methods and their numerical investigation. In: Comp. Math. Appl.; Jg. 2008, Heft 55, S. 2266-2279.

[6] Geiser, Jürgen: Diskretisierungsverfahren für Systeme von Konvektions-Diffusions-Dispersions-Reaktions-Gleichungen und Anwendungen. Diss., Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg 2004.

[7] Hairer, E.; Lubich, C.; Wanner, G. Geometric numerical integration illustrated by the Strömer-Veret method. In: Acta Numerica, Ausg. 2003, S. 399-450.

[8] Strang, Gilbert: On the construction and comparison of difference schemes. In: SIAM Journal on Numerical Analysis, 5. Jg. 1968, Heft 3, S. 506-517.

[9] Yazici, Yesim: Operator splitting methods for differential equations. Diss., Graduate School of Engineering and Science of Izmir 2010.