Karlsruher Institut für Technologie

Institut für Mechanik
Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Betsch
Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Seelig

Diskrete-Gradienten-Verfahren für dynamische Systeme mit zyklischen Koordinaten

Daniel Schneider | Bachelor Thesis (2024)

Zusammenfassung

Nichtlineare dynamische Systeme lassen sich näherungsweise mit **Diskrete-Gradienten-Verfahren** *so lösen, dass die Gesamtenergie algorithmisch exakt erhalten wird. Daneben stellen auch Impulse, die zyklischen Koordinaten zugeordnet sind, Erhaltungsgrößen dar. Mit einer geeigneten Anpassung des diskreten Gradienten nach Gonzalez lassen sich auch diese Erhaltungsgrößen korrekt abbilden.*

Grundlagen

Mit einer Legendre-Transformation der Lagrange-Funktion erhält man die konjugierten Impulse und die Hamiltonfunktion

$$\mathbf{p} := \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}, \quad H(t,\mathbf{q},\mathbf{p}) := \mathbf{p}\cdot\dot{\mathbf{q}}(t,\mathbf{q},\mathbf{p}) - L(t,\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}}(t,\mathbf{q},\mathbf{p})) = E_{\text{ges}}$$

sowie die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}.$$

Jede Invarianz der Bewegungsgleichungen

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon}\left[L\left(t+\varepsilon\tilde{t}, \mathbf{q}+\varepsilon\tilde{\mathbf{q}}, \frac{\mathrm{d}\mathbf{q}+\varepsilon\tilde{\mathbf{q}}}{\mathrm{d}t+\varepsilon\tilde{t}}\right)\frac{\mathrm{d}t+\varepsilon\tilde{t}}{\mathrm{d}t}\right]\Bigg|_{\varepsilon=0} = \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}$$

liefert über das **Noether-Theorem** eine Erhaltungsgröße

$$I(t,\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}}) = \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\tilde{q}_i + \left(L - \sum_{i=1}^{N}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\dot{q}_i\right)\tilde{t} - F,$$

wenn ein F für gegebene $\tilde{t}$ und $\tilde{\mathbf{q}}$ existiert [1]. Daraus folgen die Implikationen

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = 0.$$

Man nennt q_i eine **zyklische Koordinate**.

Diskrete-Gradienten-Verfahren

Zeitdiskretisierung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen mit $[T_1, T_2] = \bigcup_{n=0}^{N-1}[t^n, t^{n+1}]$, $t^{n+1} - t^n = h$, $\mathbf{x}^n \approx \mathbf{x}(t^n)$, $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^n$ und Anwendung des **diskreten Gradienten nach Gonzalez** [2]

$$\overline{\partial} f(\mathbf{x}^n, \mathbf{x}^{n+1}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\bigg|_{\mathbf{x}^{n+\frac{1}{2}}} + \frac{f(\mathbf{x}^{n+1}) - f(\mathbf{x}^n) - \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\Big|_{\mathbf{x}^{n+\frac{1}{2}}}\cdot\Delta\mathbf{x}}{\|\Delta\mathbf{x}\|^2}\Delta\mathbf{x}$$

liefern das Zeitschrittverfahren ("DG")

$$\mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + h\overline{\partial}_{\mathbf{p}}H,$$
$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - h\overline{\partial}_{\mathbf{q}}H,$$

welches die **Energie** zeitdiskret erhält: $H^{n+1} - H^n = 0$.

- ▶ **Problem**: Keine exakte Abbildung der Impulserhaltung bei zyklischen Koordinaten
- ▶ **Ziel**: Neues Diskrete-Gradienten-Verfahren mit $\mathbf{p}_z^{n+1} - \mathbf{p}_z^n = \mathbf{0}$

Angepasstes Verfahren

Zusätzliche Partitionierung mit $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}_{nz}, \mathbf{q}_z)$ und $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{p}_{nz}, \mathbf{p}_z)$:

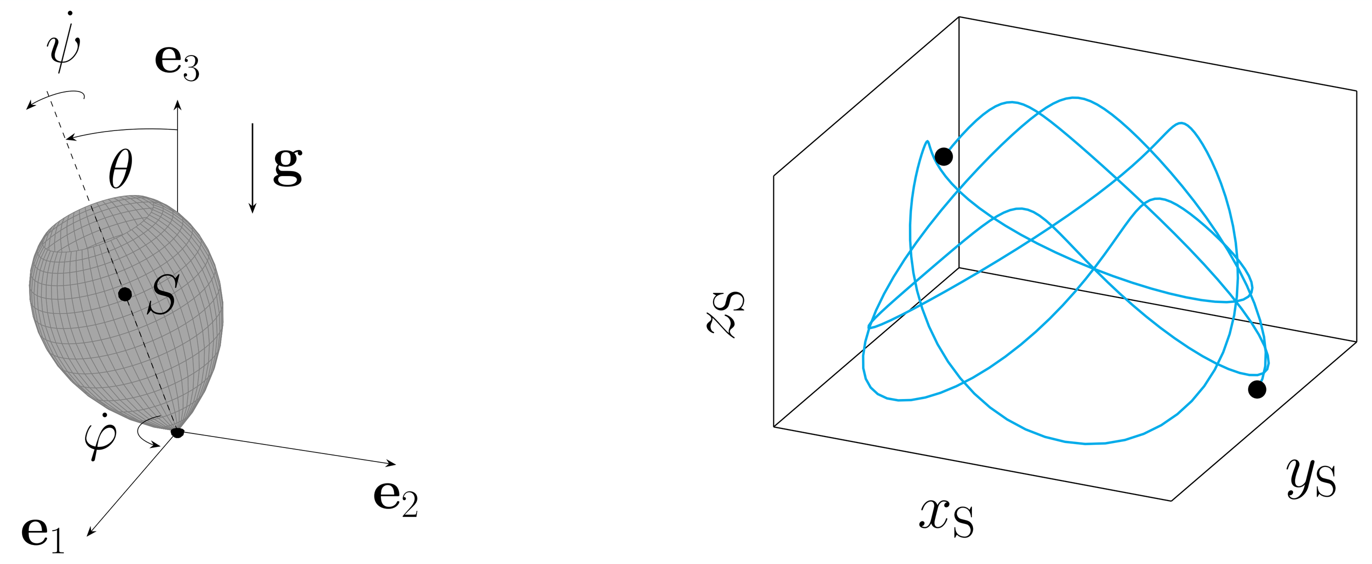
	Koordinaten	Impulse
nichtzyklisch	$\mathbf{q}_{nz}$	$\mathbf{p}_{nz}$
zyklisch	$\mathbf{q}_z$	$\mathbf{p}_z$

Das Verfahren ("DG$_{\text{mod}}$")

$$\tilde{\mathbf{q}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{q}}^n = h\overline{\partial}_{\tilde{\mathbf{p}}}H, \quad \begin{pmatrix}\mathbf{p}_{nz}^{n+1}\\ \mathbf{p}_z^{n+1}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\mathbf{p}_{nz}^{n}\\ \mathbf{p}_z^{n}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-h\overline{\partial}_{\mathbf{q}_{nz}}H\\ \mathbf{0}\end{pmatrix}$$

erhält die **Energie** und **Impulse zyklischer Koordinaten**: $H^{n+1} - H^n = 0$, $\mathbf{p}_z^{n+1} - \mathbf{p}_z^n = \mathbf{0}$.

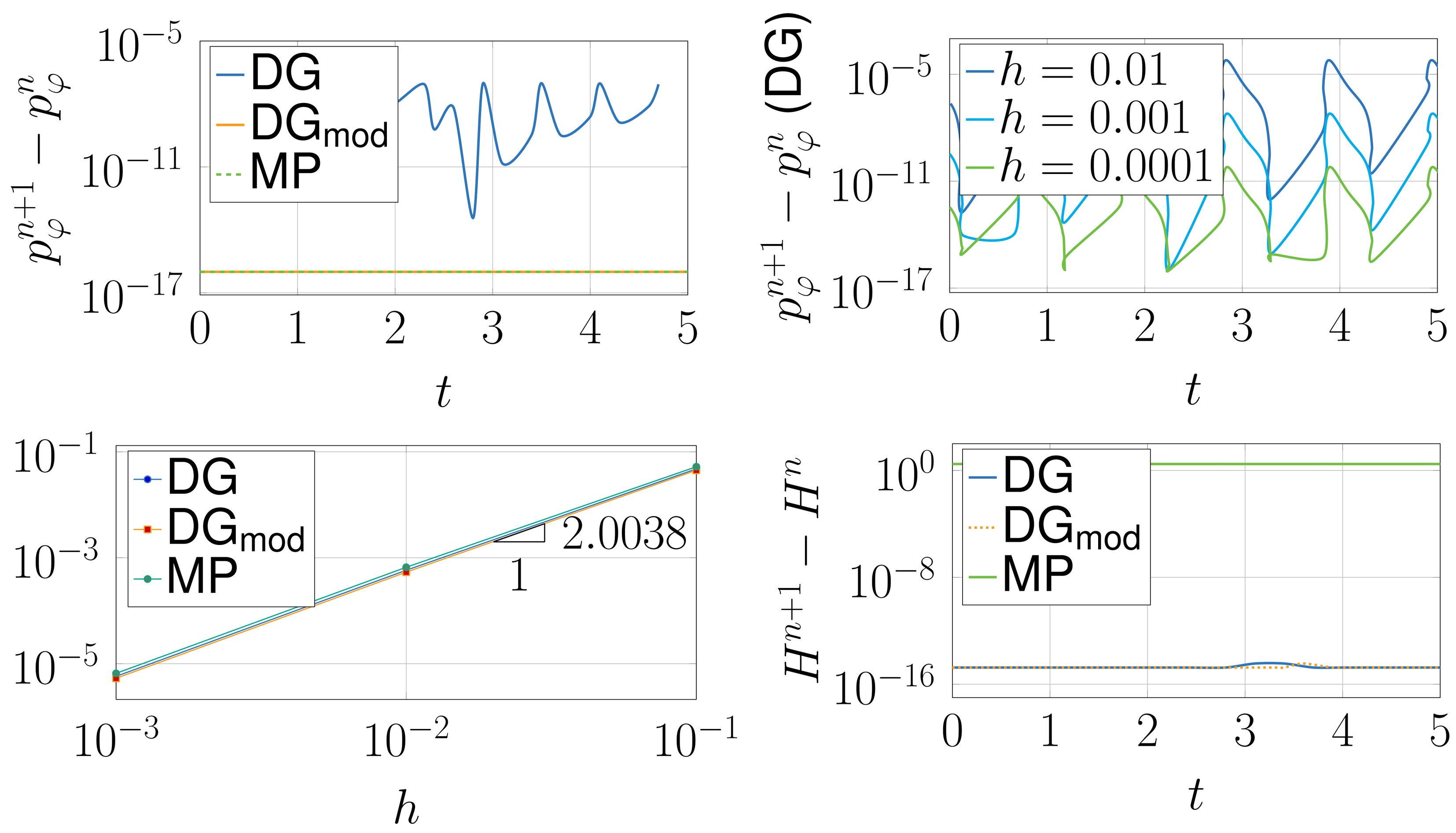
Simulationsergebnisse



Untersucht wird die Rotation eines schweren Kreisels [3]. Das Noether-Theorem liefert die Erhaltungsgrößen

$$\frac{\partial L}{\partial \psi} = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}p_\psi}{\mathrm{d}t} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}p_\varphi}{\mathrm{d}t} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0.$$

Impulse zyklischer Koordinaten werden von DG$_{\text{mod}}$ sowie von der Mittelpunktregel "MP" **zeitschrittweitenunabhängig** exakt erhalten. Für $h \to 0$ verhält sich das klassische Verfahren DG ähnlich, jedoch bei höherem Rechenaufwand. Alle Verfahren zeigen einen ähnlichen absoluten Fehler bei **quadratischer Konvergenz**.



Literatur

[1] Bartelmann, M., Feuerbacher, B., Krüger, T., Lüst, D., Rebhan, A. und Wipf, A. *Theoretische Physik 1*. 1. Aufl. Heidelberg: Springer, 2018.

[2] Gonzalez, O. Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems. In: *Journal of Nonlinear Science*, 6: 449–467, 1996.

[3] H. Goldstein C. Poole, J. S. *Classical Mechanics*. 3. Aufl. New York: Addison-Wesley, 2001.