Integration von Bewegungsgleichungen

Quellen:

G Sutmann, FZ Jülich ,Vorlesung Numerik

Quarteroni, Sacco, Saleri Numerical Mathematics (Springer). Umfassendes Lehrbuch

B. Leimkuhler, S. Reich: Simulating Hamiltonian Dynamics, Cambridge Monographs On Applied and Computational Mathematics

P. Deuflhard und A. Hohmann: Numerische Mathematik

R. Schaback und H. Wendland: Numerische Mathematik (Springer)

Numerical Recipes (Sammlung von C-Routinen fuer Numerik) auch online verfuegbar

Phasenraum:

- Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

$$\dot{q}_i = +\frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad ; \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

- beschreibt Bewegung im Phasenraum
- unabhaengige Variablen p und q (kanonische Orte und Impulse)

Satz von Liouville:

Phasenraumdichte ρ(q,p) bestimmt die Wahrscheinlichkeit ρ dqdp, dass sich das System im Zustand dqdp befindet.

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial \rho}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = 0.$$

Liouville Theorem

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial (\rho \dot{q}^i)}{\partial q^i} + \frac{\partial (\rho \dot{p}_i)}{\partial p_i} \right) = 0.$$

Kontinuitätsgleichung

$$\rho \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial \dot{q}^i}{\partial q^i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right) = \rho \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q^i \, \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q^i} \right) = 0,$$

Phasenraumvolumen ist divergenzfrei, also inkompressibel. Gültig für konservative Systeme, die mit Hamiltion-Gleichungen beschrieben werden können.

Integratoren, die diese Bedingung erfüllen, heissen symplektisch.

Bewegung eine Teilchens im Potential:

$$H = K + U$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{m_i} + \sum_{i,j>i}^{N} u\left(r_{ij}\right)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \rightarrow \quad \dot{r}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m_i}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \rightarrow \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\frac{\partial U}{\partial r_i} = F_i$$

entsprechen gewöhnlichen gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung

explizites Schema:

$$y(t+\delta t) = y(t) + \delta t \; f_y\left(y(t), \dot{y}(t), t\right)$$
$$\dot{y}(t+\delta t) = \dot{y}(t) + \delta t \; f_{\dot{y}}\left(y(t), \dot{y}(t), t\right)$$

implizites Schema:

$$y(t+\delta t) = y(t) + \delta t \; f_y\left(y(t+\delta t), \dot{y}(t+\delta t), t+\delta t\right)$$
$$\dot{y}(t+\delta t) = \dot{y}(t) + \delta t \; f_{\dot{y}}\left(y(t+\delta t), \dot{y}(t+\delta t), t+\delta t\right)$$

zusätzliche Gleichung muss gelöst werden! (etwa mit Newton-Raphson Verfahren)
dafür stabiler! d.h. man grösseren Zeitschritt verwenden

- erster Ansatz: Taylorentwicklung

$$r(t+\Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{F(t)}{m}\Delta t^2 + \ldots$$

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{F(t)}{m}\Delta t + \ldots$$

- führt auf explizites Euler-Verfahren erster Ordnung Ordnung
- Eigenschaften: Phasenraumvolumen nicht erhalten, nicht reversibel, starke Änderung der Gesamtenergie des Systems

– Expliziter Euler

$$q_{n+1} = q_n + dt \frac{\partial H(q_n, p_n)}{\partial p} \quad , \quad p_{n+1} = p_n - dt \frac{\partial H(q_n, p_n)}{\partial q}$$

es gibt explizite Verfahren höherer Ordnung, z.B Runge Kutta....

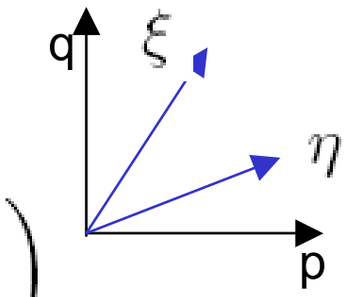
– Impliziter Euler

$$q_{n+1} = q_n + dt \frac{\partial H(q_{n+1}, p_{n+1})}{\partial p} \quad , \quad p_{n+1} = p_n - dt \frac{\partial H(q_{n+1}, p_{n+1})}{\partial q}$$

– Partitionierter Euler
(auch symplektischer Euler)

$$q_{n+1} = q_n + dt \frac{\partial H(q_n, p_{n+1})}{\partial p} \quad , \quad p_{n+1} = p_n - dt \frac{\partial H(q_n, p_{n+1})}{\partial q}$$

- Wie beweist man Symplektizität eines Integrators?



  – Betrachte zwei Vektoren $\xi = \begin{pmatrix} \xi^p \\ \xi^q \end{pmatrix} \qquad \eta = \begin{pmatrix} \eta^p \\ \eta^q \end{pmatrix}$

  – Die orientierte Fläche der Vektoren ist definiert als

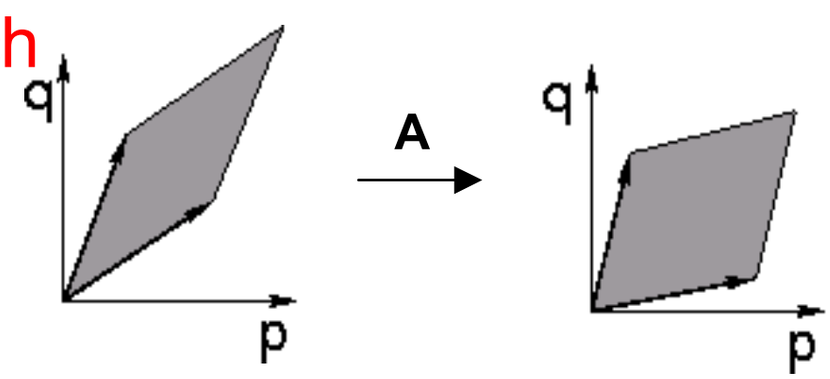
$$\omega(\xi, \eta) = \det \begin{pmatrix} \xi^p & \eta^p \\ \xi^q & \eta^q \end{pmatrix} = \xi^p \eta^q - \xi^q \eta^p$$

  was auch geschrieben werden kann als

$$\omega(\xi, \eta) = \xi^T J \eta \qquad \text{mit} \qquad J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

  – Eine lineare Abbildung wird symplectisch genannt, wenn

$$\omega(A\xi, A\eta) = \omega(\xi, \eta)$$



Symplektizität

– Da gilt

$$\begin{aligned}\omega(A\xi, A\eta) &= (A\xi)^T J A\,\eta \\ &= \xi^T A^T J A\eta\end{aligned}$$

ist es notwendig zu zeigen, dass gilt

$$A^T J A = J$$

– Für nicht-lineare Abbildungen gilt dies genauso für die Jacobi Matrix $g'(p,q)$

$$\omega(g'(p,q)\xi, g'(p,q)\eta) = \omega(\xi,\eta)$$

so dass man zu zeigen hat, dass gilt

$$g'(p,q)^T J g'(p,q) = J$$

Beispiel: Expliziter Euler

– Explizite Euler Schemen können geschrieben werden als

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + h\partial_p \mathcal{H}(q_n, p_n) \\ p_{n+1} &= p_n - h\partial_q \mathcal{H}(q_n, p_n) \end{aligned}$$

– Die Jacobi Matrix ist gegeben als

$$g'(p,q) = \begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix}$$

– Aufgabe: Bestimmung der partiellen Ableitungen

– Schreib das Euler Schema als implizite Funktion

$$\begin{aligned} G(q_n, q_{n+1}, g(q_n, p_n)) &= q_{n+1} - q_n - h\partial_p \mathcal{H}(q_n, p_n) = 0 \\ F(p_n, p_{n+1}, f(q_n, p_n)) &= p_{n+1} - p_n + h\partial_q \mathcal{H}(q_n, p_n) = 0 \end{aligned}$$

und forme die Ableitungen

$$\frac{dF}{dq_n} = 0 \quad , \quad \frac{dF}{dp_n} = 0 \quad , \quad \frac{dG}{dq_n} = 0 \quad , \quad \frac{dG}{dp_n} = 0$$

Beispiel: Expliziter Euler

– Man erhält

$$\frac{\partial G}{\partial q_n} + \frac{\partial G}{\partial q_{n+1}}\frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} + \frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial q_n} = 0 \qquad \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} = -\frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial q_n} - \frac{\partial G}{\partial q_n}$$

$$\frac{\partial G}{\partial p_n} + \frac{\partial G}{\partial q_{n+1}}\frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} + \frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial p_n} = 0 \qquad \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} = -\frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial p_n} - \frac{\partial G}{\partial p_n}$$

$$\frac{\partial F}{\partial q_n} + \frac{\partial F}{\partial p_{n+1}}\frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} + \frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial q_n} = 0 \qquad \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} = -\frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial q_n} - \frac{\partial F}{\partial q_n}$$

$$\frac{\partial F}{\partial p_n} + \frac{\partial F}{\partial p_{n+1}}\frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} + \frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial p_n} = 0 \qquad \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} = -\frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial p_n} - \frac{\partial F}{\partial p_n}$$

mit

$$\begin{aligned} g(q_n, p_n) &= h\partial_p \mathcal{H}(q_n, p_n) \\ f(q_n, p_n) &= h\partial_q \mathcal{H}(q_n, p_n) \end{aligned}$$

Example: Explicit Euler

– Die Jacobi Matrix ist daher gegeben als

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial p_n} - \frac{\partial F}{\partial p_n} & -\frac{\partial F}{\partial y}\frac{\partial f}{\partial q_n} - \frac{\partial F}{\partial q_n} \\ -\frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial p_n} - \frac{\partial G}{\partial p_n} & -\frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial q_n} - \frac{\partial G}{\partial q_n} \end{pmatrix}$$

und nach Berechnung der Ableitungen erhält man

$$g'(p,q) = \begin{pmatrix} I - 2h\partial_{pq}\mathcal{H} & -2h\partial_{qq}\mathcal{H} \\ 2h\partial_{pp}\mathcal{H} & I + 2h\partial_{qp}\mathcal{H} \end{pmatrix}$$

Beispiel: Expliziter Euler

– Jetzt hat man zu zeigen, dass gilt $g'(p,q)^T J g'(p,q) = J$

$$g'(p,q)^T J g'(p,q)$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & (I - 2h\partial_{pq}\mathcal{H})(I + 2h\partial_{qp}\mathcal{H}) + 4h^2\partial_{qq}\mathcal{H}\partial_{pp}\mathcal{H} \\ -(I - 2h\partial_{pq}\mathcal{H})(I + 2h\partial_{qp}\mathcal{H}) - 4h^2\partial_{qq}\mathcal{H}\partial_{pp}\mathcal{H} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\neq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Dies beweist, dass der explizite Euler Algorithmus nicht symplektisch ist

Beispiel: partitionierter Euler

$$q_{n+1} = q_n + dt\,\frac{\partial H(q_n, p_{n+1})}{\partial p} \quad , \quad p_{n+1} = p_n - dt\,\frac{\partial H(q_n, p_{n+1})}{\partial q}$$

- Zur Erinnerung
$$\begin{aligned} G(q_n, q_{n+1}, g(q_n, p_n)) &= q_{n+1} - q_n - h\partial_p \mathcal{H}(q_n, p_{n+1}) = 0 \\ F(p_n, p_{n+1}, f(q_n, p_n)) &= p_{n+1} - p_n + h\partial_q \mathcal{H}(q_n, p_{n+1}) = 0 \end{aligned}$$

- Der partionierte Euler kann in Formvon impliziten Funktionen geschrieben werden als
$$\frac{dF}{dq_n} = 0 \quad , \quad \frac{dF}{dp_n} = 0 \quad , \quad \frac{dG}{dq_n} = 0 \quad , \quad \frac{dG}{dp_n} = 0$$
  - Analog zu vorher bekommt man den Ausdruck für die Jacobi Matrix

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F}{\partial p_{n+1}} & \frac{\partial F}{\partial q_{n+1}} \\ \frac{\partial G}{\partial p_{n+1}} & \frac{\partial G}{\partial q_{n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{p_{n+1}}{\partial q_n} \\ \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial F}{\partial p_n} & -\frac{\partial F}{\partial q_n} \\ -\frac{\partial G}{\partial p_n} & -\frac{\partial G}{\partial q_n} \end{pmatrix}$$

Beispiel: partitionierter Euler

– Auflösung nach der Jacobi Matrix liefert

$$g'(p,q) = \begin{pmatrix} (I + h\partial_{pq}\mathcal{H})^{-1} & -h\partial_{qq}\mathcal{H}(I + h\partial_{pq}\mathcal{H})^{-1} \\ h\partial_{pp}\mathcal{H}(I + h\partial_{pq}\mathcal{H})^{-1} & I + h\partial_{qp}\mathcal{H} - h^2\partial_{qq}\mathcal{H}\partial_{pp}\mathcal{H}(I + h\partial_{pq}\mathcal{H})^{-1} \end{pmatrix}$$

– Und nach einiger Algebra erhält man

$$g'(p,q)^T J g'(p,q) = \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$$

– Dies beweist, dass das partitionierte Euler Schema symplektisch ist
– Daher wird es auch symplektischer Euler genannt

Integratoren (cont'd)

- Zweiter Ansatz, um einen Integrator zu konstruieren:

Loup Verlet

Wieder Taylor Entwicklung
(diesmal alber vorwärts UND rückwärts)

$$r(t+\Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{F(t)}{m}\Delta t^2 + \frac{1}{6}\dddot{r}(t)\Delta t^3 \ldots$$

$$r(t-\Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}\frac{F(t)}{m}\Delta t^2 - \frac{1}{6}\dddot{r}(t)\Delta t^3 \ldots$$

Addition von beiden liefert

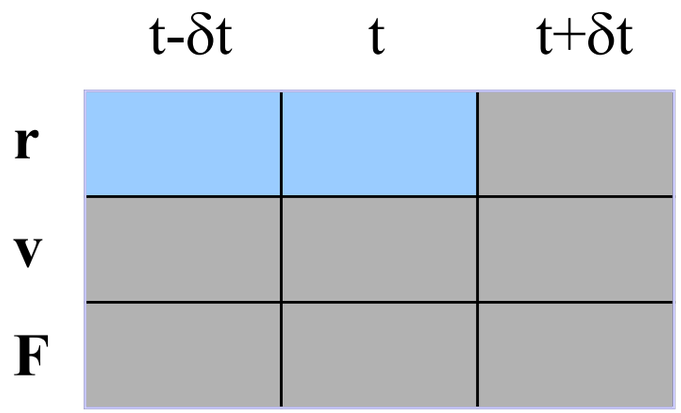
$$r(t+\Delta t) = 2r(t) - r(t-\Delta t) + \frac{F(t)}{m}\Delta t^2$$

Verlet Algorithmus
oder Störmer Schema

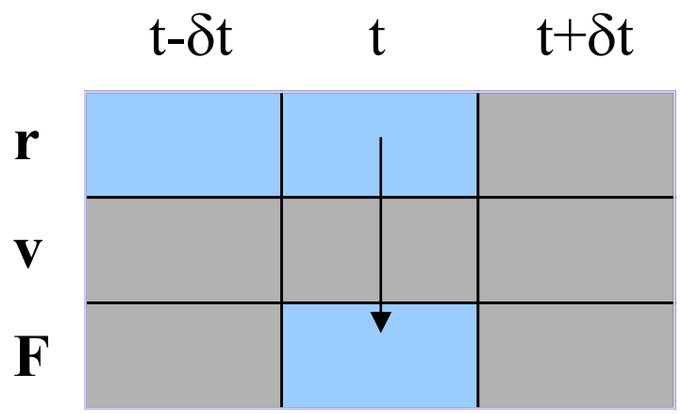
Geschwindigkeiten sind verfügbar als übliches Verfahren 2ter Ordnung

$$v(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

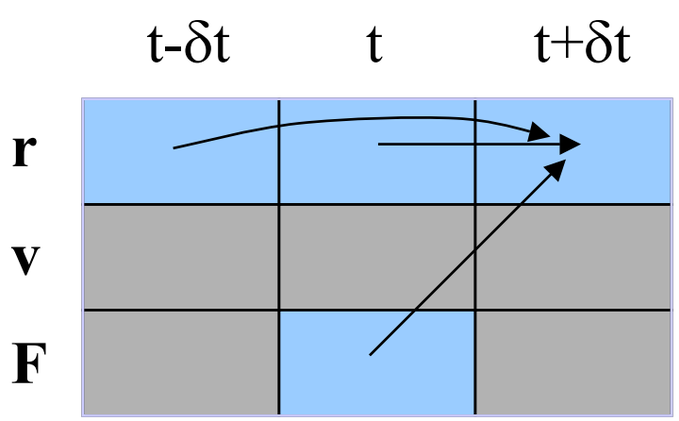
- Eigenschaften:
  - Zeit reversibel
  - Braucht nicht die Geschwindigkeiten für Positionsbestimmung
  - Zwei-Schritt Schema (Positionen sind notwendig zu zwei Zeitschritten)
  - Geschwindigkeit wird nur zu verschobener Zeit bestimmt



Positionen zum aktuellen und Vorhergehenden Zeitschritt bekannt



Bestimme die Kräfte in der aktuellen Position



Bestimme die neue Positionen von den aktuellen, den vorhergehenden Positionen und den aktuellen Kräften.

Integratoren (cont'd)

- **Dritter Ansatz für Integrator:**

  Definiere Geschwindigkeiten zu „Halbschritten"

$$v(t-\Delta t/2)=\frac{r(t)-r(t-\Delta t)}{\Delta t}$$

$$v(t+\Delta t/2)=\frac{r(t+\Delta t)-r(t)}{\Delta t}$$

  Aus der letzten Gleichung

$$r(t+\Delta t)=r(t)+\Delta t\; v(t+\Delta t/2)$$

  Aus dem Verlet-Algorithmus folgt:

$$\underbrace{r(t+\Delta t)-r(t)}_{v(t+\Delta t/2)\Delta t}=\underbrace{r(t)-r(t-\Delta t)}_{v(t-\Delta t/2)\Delta t}+\frac{F(t)}{m}\Delta t^2$$

Leapfrog-Algorithmus

$$\Rightarrow\quad v(t+\Delta t/2)=v(t-\Delta t/2)+\frac{F(t)}{m}\Delta t$$

Geschwindigkeiten immer noch nicht zur selben Zeit verfügbar

$$v(t)=\frac{v(t+\Delta t/2)+v(t-\Delta t/2)}{2}$$

Kann interpoliert werden