

Bachelorarbeit

Implementierung und Vergleich Variationeller Integratoren in der Strukturdynamik

Erik Döhler

Immatrikulationsnummer: 1981482

19. August 2019

Betreuer: M.Sc. Timo Ströhle

Prüfer: Prof. Dr.-Ing. habil. Peter Betsch

Karlsruher Institut für Technologie

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt und indirekt übernommenen Inhalte sind als solche kenntlich gemacht.

Ich weiß, dass die Arbeit in digitalisierter Form daraufhin überprüft werden kann, ob unerlaubte Hilfsmittel verwendet wurden und ob es sich insgesamt oder in Teilen um ein Plagiat handelt. Zum Vergleich meiner Arbeit mit existierenden Quellen darf sie in eine Datenbank eingestellt werden und nach der Überprüfung zum Vergleich mit künftig eingehenden Arbeiten dort verbleiben. Weitere Vervielfältigungs und Verwertungsrechte werden dadurch nicht eingeräumt. Die Arbeit wurde weder einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt noch veröffentlicht.

Darüber hinaus versichere ich, dass ich die „*Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis im Karlsruher Institut für Technologie (KIT)*“ in der gültigen Fassung beachtet habe.

Karlsruhe, 19. August 2019

.....

(Erik Döhler)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Zweikörperproblem	9
3	Numerische Verfahren	13
3.1	Standardverfahren	13
3.1.1	Euler-Verfahren	14
3.1.2	Mittelpunktsregel	16
3.2	Variationelle Integratoren	18
3.2.1	Generalized- α -Verfahren	21
3.2.2	Galerkin-basierte Variationelle Integratoren	23
4	Numerische Untersuchungen	31
4.1	Modell	31
4.2	Numerische Fehleranalyse	32
4.3	Energieerhaltung	34
4.4	Drehimpulserhaltung	39
4.5	Auswertung	41
5	Zusammenfassung und Ausblick	43
5.1	Zusammenfassung	43
5.2	Ausblick	44
	Literaturverzeichnis	45

Kapitel 1

Einleitung

Schwingende Tragwerke unter Erdbebenlasten, Vibration durch Maschinen oder dynamische Verhaltensweisen in der Luft- und Raumfahrt - das Lösen von strukturdynamischen Problemen ist in den Ingenieurwissenschaften von großer Bedeutung. Ob im Bauingenieurwesen, im Maschinenbau oder anderen Bereichen, sobald es um das Lösen von Problemen in der Strukturdynamik geht, werden numerische Verfahren benötigt, welche eine möglichst genaue und in der Zeit stabile Lösung liefern. Eine analytische Lösung ist bis auf wenige Ausnahmen meist nicht möglich. In dieser Arbeit werden daher verschiedene numerische Verfahren für die Lösung solcher Probleme vorgestellt und im Anschluss miteinander verglichen und auf strukturerhaltende Größen hin untersucht.

Als strukturdynamisches Problem wird zu Beginn dieser Arbeit das Zweikörperproblem, auch Keplerproblem genannt, vorgestellt. Beim Keplerproblem, welches Johannes Kepler durch die erste Dokumentation der genauen Bewegungsformen in seinen drei Keplerschen Gesetzen zwischen 1609 und 1618 seinen Namen gab [2], werden zwei Körper betrachtet, welche ohne den Einfluss äußerer Kräfte aufgrund ihrer gegenseitigen Anziehungskräfte miteinander wechselwirken. Das Zweikörperproblem beschreibt eine klassische Problematik in der Strukturdynamik und besitzt im Vergleich zu den meisten Bauingenieurproblemen den Vorteil, die Massen ohne numerische Vereinfachungen als Punktmassen betrachten zu können. Mit gegebenen Anfangswerten gilt es, die Position der beiden Massenpunkte in Abhängigkeit von der Zeit zu bestimmen.

Für die Lösung des Zweikörperproblems werden im Kapitel 3 verschiedene numerische Verfahren vorgestellt. Als Erstes werden mit den Euler-Verfahren und der Mittelpunktsregel Verfahren eingeführt, bei denen die Euler-Lagrange Gleichungen linear approximiert werden [4]. Aufgrund ihrer einfachen Struktur werden diese Verfahren vielfach in der Praxis angewendet. Anschließend wird mithilfe variationeller Integratoren gezeigt, wie die Diskretisierung des Wirkungsintegrals und des Hamiltonschen Prinzips zu den diskreten

Euler-Lagrange Gleichungen führt und somit zu der Möglichkeit, das Anfangswertproblem durch Wahl des Polynomgrades der Ansatzfunktionen beliebig genau, bereits bei großer Schrittweite, lösen zu können. Betrachtet werden das Generalized- α -Verfahren [8] und das Galerkin-basierte variationelle Integratoren Verfahren (GVI-Verfahren), das 2015 von S. Ober-Blöbaum und N. Saake in der Zeitschrift *Advances in Computational Mathematics* vorgestellt wurde [6].

Nach der theoretischen Einführung der Verfahren folgt die Anwendung auf das Zweikörperproblem und die numerische Fehleranalyse. Bei der Fehleranalyse werden die Verfahren mit einer Referenzlösung verglichen, um so deren lokale Fehler und die Konvergenzordnung analysieren zu können. Zum Schluss werden das Energie- und Drehimpulsverhalten als strukturerhaltende Eigenschaften betrachtet, um Aussagen über die Stabilität und Verfahrensanfälligkeit treffen zu können.

Alle betrachteten numerischen Verfahren und Analysen wurden mithilfe der Software MATLAB realisiert. Die Implementierung der Algorithmen wird im Folgenden lediglich als Pseudo-Code dargestellt.

Kapitel 2

Zweikörperproblem

Im Folgenden wird ein Zweikörperproblem betrachtet, mit den zwei Massen, $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$, welche aufgrund ihrer Massen eine gegenseitige Anziehung ausüben, jedoch durch keine weiteren Kräfte beeinflusst werden. Die folgenden Berechnungen basieren größten Teils auf [7].

In einem globalen Koordinatensystem ergibt sich der Ortsvektor \mathbf{q}_S des Schwerpunktes der beiden Massen und die Relativkoordinate \mathbf{q} aus den Ortsvektoren $\mathbf{q}^{(1)}$ und $\mathbf{q}^{(2)}$ der Massen $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$.

$$\mathbf{q}_S(t) = \frac{m^{(1)}\mathbf{q}^{(1)}(t) + m^{(2)}\mathbf{q}^{(2)}(t)}{m^{(1)} + m^{(2)}} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}^{(2)}(t) - \mathbf{q}^{(1)}(t) \quad (2.2)$$

Mit den Gleichungen (2.1) und (2.2) können die Ortsvektoren $\mathbf{q}^{(1)}$ und $\mathbf{q}^{(2)}$ in Abhängigkeit von \mathbf{q}_S und \mathbf{q} geschrieben werden.

$$\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{q}_S + \frac{m^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}}\mathbf{q}; \quad \mathbf{q}^{(2)} = \mathbf{q}_S - \frac{m^{(1)}}{m^{(1)} + m^{(2)}}\mathbf{q}$$

Da die beiden Ortsvektoren $\mathbf{q}^{(1)}$ und $\mathbf{q}^{(2)}$ aus \mathbf{q}_S und \mathbf{q} bestimmt werden können, kann das Zweikörperproblem auf ein Einkörperproblem reduziert werden und vereinfacht somit die analytische Berechnung. Daher wird im Folgenden nur der Schwerpunkt und die Relativkoordinate betrachtet.

Da sich der Schwerpunkt geradlinig und mit konstanter Geschwindigkeit fortbewegt, aufgrund des Impulserhaltungssatzes, ist es trivial $\mathbf{q}_S(t)$ zu bestimmen. Komplizierter gestaltet sich die Bestimmung der Relativkoordinate \mathbf{q} . Mit der Gravitationskonstante G und dem Abstand $\|\mathbf{q}\|$ zwischen den beiden Massen ergibt sich das Potential bzw. die

potentielle Energie des Schwerpunktes

$$V(\mathbf{q}) = -\frac{Gm^{(1)}m^{(2)}}{\|\mathbf{q}\|}. \quad (2.3)$$

Daraus folgt die allgemeine Gravitationskraft

$$\mathbf{f}^{(i)} = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}^{(i)}} = \frac{-k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{(-1)^{i+1} \cdot \mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|}$$

mit $k = Gm^{(1)}m^{(2)}$ und $i = 1, 2$, stehend für Masse 1 bzw. Masse 2.

Für die Relativkoordinate kann die Differenz der beiden Ortsvektoren $\mathbf{q} = \mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}$ eingesetzt werden. Somit ergeben sich die Gravitationskräfte der Massen $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ zu:

$$\mathbf{f}^{(1)} = \frac{k}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|}; \quad \mathbf{f}^{(2)} = -\frac{k}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|}$$

Mit den Schwerpunktsätzen lassen sich die Bewegungsgleichungen aufstellen:

$$\ddot{\mathbf{q}}^{(1)} = \frac{1}{m^{(1)}} \mathbf{f}^{(1)} = \frac{-1}{m^{(1)}} \cdot \frac{k}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}^{(1)} - \mathbf{q}^{(2)}}{\|\mathbf{q}^{(2)} - \mathbf{q}^{(1)}\|} = \frac{1}{m^{(1)}} \frac{k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|} \quad (2.4)$$

$$\ddot{\mathbf{q}}^{(2)} = \frac{-1}{m^{(2)}} \frac{k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|} \quad (2.5)$$

$$\ddot{\mathbf{q}} = \frac{-1}{\mu} \frac{k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|}$$

mit μ als reduzierte Masse des Schwerpunktes. Mit der zweifachen Ableitung nach t der Gleichung (2.2) und den Schwerpunktsätzen lässt sich die reduzierte Masse in Abhängigkeit von $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ beschreiben.

$$\begin{aligned} \ddot{\mathbf{q}} &= \ddot{\mathbf{q}}^{(2)} - \ddot{\mathbf{q}}^{(1)} = -\left(\frac{1}{m^{(1)}} + \frac{1}{m^{(2)}}\right) \frac{k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|} \stackrel{!}{=} \frac{-1}{\mu} \cdot \frac{k}{\|\mathbf{q}\|^2} \cdot \frac{\mathbf{q}}{\|\mathbf{q}\|} \\ \Rightarrow \mu &= \left(\frac{1}{m^{(1)}} + \frac{1}{m^{(2)}}\right)^{-1} = \frac{m^{(1)}m^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}} \end{aligned}$$

Der Energieerhaltungssatz sagt aus, dass

$$\begin{aligned} E = T + V &= \frac{1}{2}m^{(1)}(\dot{\mathbf{q}}^{(1)})^2 + \frac{1}{2}m^{(2)}(\dot{\mathbf{q}}^{(2)})^2 + V(\mathbf{q}) \\ &= \frac{1}{2}(m^{(1)} + m^{(2)})\dot{\mathbf{q}}_S^2 + \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{q}}^2 + V(\mathbf{q}) = \text{const.} \end{aligned}$$

ist. Mit $E' = E - \frac{1}{2}(m^{(1)} + m^{(2)})\dot{\mathbf{q}}_S^2$, der reinen Betrachtung der Relativbewegung, lässt sich der Energiesatz vereinfacht schreiben als

$$E' = \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{q}}^2 + V(\mathbf{q}).$$

Durch Einführen von Polarkoordinaten ergibt sich

$$\begin{aligned} E' &= \frac{1}{2}\mu\dot{\mathbf{q}}^2 + V(\mathbf{q}) = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\mu r^2\dot{\varphi}^2 + V(r) \\ \Rightarrow \dot{r}^2 &= \frac{2}{\mu} \left(E'_0 - \frac{1}{2}\mu r^2\dot{\varphi}^2 - V(r) \right) \\ \Rightarrow \frac{dr}{dt} &= \pm \sqrt{\frac{2}{\mu} \left(E'_0 - \frac{1}{2}\mu r^2\dot{\varphi}^2 - V(r) \right)} \\ \Rightarrow \int_{r_0}^r dt &= \pm \int_{r_0}^r \frac{dr'}{\sqrt{\frac{2}{\mu} \left(E'_0 - \frac{1}{2}\mu r'^2\dot{\varphi}^2 - V(r') \right)}} \\ \Rightarrow t(r) &= t(r_0) \pm \int_{r_0}^r \frac{dr'}{\sqrt{\frac{2}{\mu} \left(E'_0 - \frac{1}{2}\mu r'^2\dot{\varphi}^2 - V(r') \right)}}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Aufgrund des idealisierten Zweikörperproblems ist auch der Drehimpuls eine Erhaltungsgröße und mithilfe der Lagrange Gleichungen lässt sich der Drehimpuls folgendermaßen bestimmen:

$$\frac{d}{dt}p_\varphi = \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0.$$

Mit $L = \frac{1}{2}\mu\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\mu r^2\dot{\varphi}^2 - V(r)$ ergibt sich

$$p_\varphi = \mu r^2\dot{\varphi} = \text{const.}$$

und daraus folgt:

$$\Rightarrow \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{\mu r^2}. \quad (2.7)$$

Die Gleichungen (2.3) und (2.7) in (2.6) eingesetzt, ergeben

$$t(r) = t(r_0) \pm \int_{r_0}^r \frac{dr'}{\sqrt{\frac{2}{\mu} \left(E_0' + \frac{k}{r'} - \frac{p_\varphi^2}{2\mu r'^2} \right)}}. \quad (2.8)$$

Zusätzlich lässt sich $\varphi(t)$ aus Gleichung (2.7) beschreiben:

$$\varphi(t) = \varphi_0 + \frac{p_\varphi}{\mu} \int_{t_0}^t \frac{dt'}{r^2(t')}. \quad (2.9)$$

Wenn das Integral in Gleichung (2.8) gelöst und nach $r(t)$ aufgelöst werden kann, kann zusätzlich mit Gleichung (2.9) $\mathbf{q}(t)$ und somit $\mathbf{q}^{(1)}(t)$ und $\mathbf{q}^{(2)}(t)$ bestimmt werden und die analytische Lösung wäre abgeschlossen. Da es nicht möglich ist, Gleichung (2.8) nach $r(t)$ aufzulösen, ist eine analytische Lösung in Abhängigkeit von der Zeit nicht möglich. Ein weiteres Problem ist, dass die Stützweite unbekannt ist, weshalb das Integral aus Gleichung (2.8) auch nicht numerisch gelöst werden kann. An dieser Stelle wäre nur möglich, die Bahnkurven der beiden Massen analytisch zu bestimmen, unabhängig von der Zeit. Um in den folgenden Kapiteln die numerischen Verfahren auswerten und ihre Fehlergenauigkeiten bestimmen zu können, wird anstatt der analytischen Lösung ein numerisches Verfahren mit sehr kleiner Schrittweite gewählt.

Kapitel 3

Numerische Verfahren

Wie im vorherigen Kapitel zu erkennen, gibt es in der Mechanik etliche nichtlineare Anfangswertprobleme, die nicht exakt gelöst werden können. Anstatt der analytischen Berechnung werden daher meist numerische Verfahren für die näherungsweise Lösung herangezogen. Da in der Mechanik verschiedene Ansprüche an erhaltende Größen des Modells gestellt werden, können nicht immer die gleichen Verfahren verwendet werden. Daher werden in diesem Kapitel eine Reihe verschiedener Verfahren vorgestellt, welche unterschiedliche Herangehensweisen und Ergebnisse liefern. Als erstes werden die Verfahren betrachtet, welche auf einer Approximation der Bewegungsgleichung basieren. Diese Verfahren finden standardmäßig bei vielen Problemstellungen der Mechanik Anwendung. Anschließend wird mit variationellen Integratoren (VI) eine alternative Berechnung durch die numerische Annäherung an das Wirkungsintegral aufgezeigt. Zum Schluss folgt noch ein Verfahren durch die Galerkin-basierten variationellen Integratoren, welches bereits mit großer Schrittweite genaue und stabile Lösungen liefern kann.

3.1 Standardverfahren

Durch Einführung der Geschwindigkeit $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}}$ können die gewöhnlichen Differentialgleichungen 2. Ordnung (2.4) und (2.5) in ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung überführt werden.

$$\mathbf{v} - \dot{\mathbf{q}} = 0$$

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} + \nabla V(\mathbf{q}) \mathbf{q} = 0$$

Zu den elementaren und weitverbreiteten Verfahren zählen beispielsweise die Euler-Verfahren und die Mittelpunktsregel. Diese Verfahren sollen im Folgenden genauer betrachtet wer-

den und das System gewöhnlicher Differentialgleichungen 1. Ordnung numerisch lösen.

3.1.1 Euler-Verfahren

Die Euler-Verfahren sind Einschrittverfahren und basieren auf einer Approximation der kontinuierlichen Ableitung durch endliche Differenzenquotienten

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{y_{n+1} - y_n}{h} \quad \text{mit } h = t_{n+1} - t_n.$$

Explizites Euler-Verfahren

Beim expliziten Euler-Verfahren bezieht sich die Approximation jeweils auf den Zeitpunkt t_n . Die unbekannten Größen zum Zeitpunkt t_{n+1} können dann explizit in Abhängigkeit der bekannten Größen zum Zeitpunkt t_n berechnet werden.

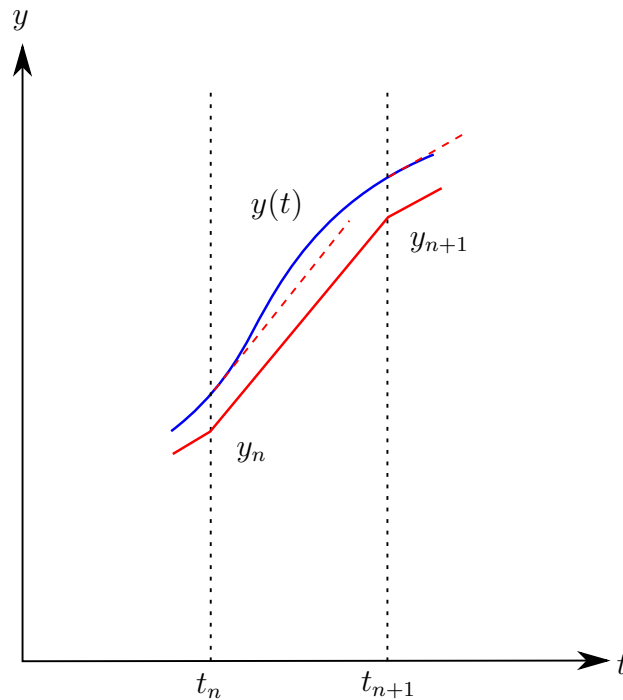


Abbildung 3.1: Explizites Euler-Verfahren

Für das hier betrachtete Modellproblem kann das explizite Euler-Verfahren folgendermaßen aufgestellt werden.

$$\begin{aligned} t_{n+1} &:= t_n + h \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{q}_n^{(i)} + h \mathbf{v}_n^{(i)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{v}_n^{(i)} + h \dot{\mathbf{v}}_n^{(i)} = \mathbf{v}_n^{(i)} + \frac{h}{m^{(i)}} \cdot \nabla_{\mathbf{q}_n^{(i)}} V \end{aligned}$$

Implizites Euler-Verfahren

Beim impliziten Euler-Verfahren bezieht sich der Differenzenquotient auf den Zeitpunkt t_{n+1} und aus dem expliziten wird ein implizites Verfahren.

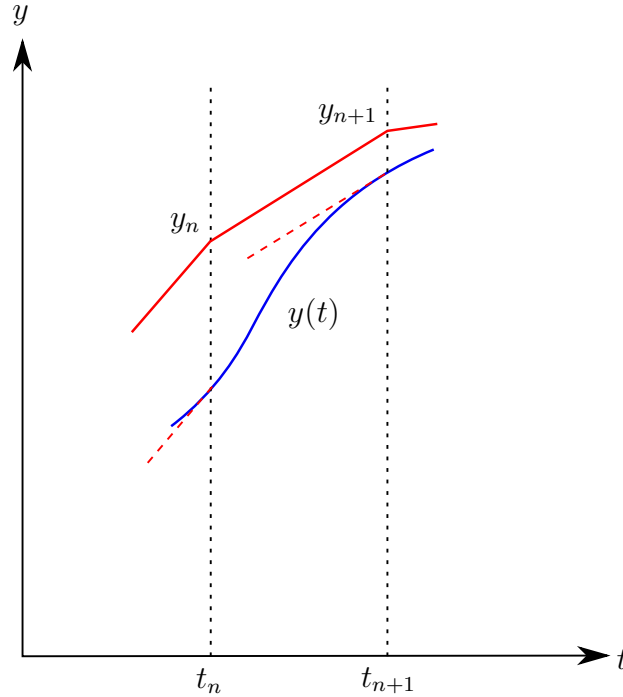


Abbildung 3.2: Implizites Euler-Verfahren

$$\begin{aligned}
 t_{n+1} &:= t_n + h \\
 \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{q}_n^{(i)} + h\mathbf{v}_{n+1}^{(i)} \\
 \mathbf{v}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{v}_n^{(i)} + h\dot{\mathbf{v}}_{n+1}^{(i)} = \mathbf{v}_n^{(i)} + \frac{h}{m^{(i)}} \cdot \nabla_{\mathbf{q}_{n+1}^{(i)}} V
 \end{aligned}$$

Da die Position $\mathbf{q}_{n+1}^{(i)}$ und der Geschwindigkeitsvektor $\mathbf{v}_{n+1}^{(i)}$ zum Zeitpunkt t_n nicht bekannt sind, kann der Algorithmus nicht ohne weiteres wie beim expliziten Euler durchgeführt werden. Es wird eine numerische Annäherung, beispielsweise durch das Newton-Verfahren, an den zu berechnenden Punkt benötigt. Für den eindimensionalen Fall besagt das Newton-Verfahren

$$x_1 = x_0 + \Delta x \quad \text{mit} \quad \Delta x = - \left(\frac{\partial f(x_0)}{\partial x} \right)^{-1} f(x_0).$$

Im Falle des Zweikörperproblems ist

$$\mathbf{x}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_n^{(1)} \\ \mathbf{v}_n^{(1)} \\ \mathbf{q}_n^{(2)} \\ \mathbf{v}_n^{(2)} \end{pmatrix} - \left(\frac{\partial(\mathbf{r}(\mathbf{x}_n))}{\partial \mathbf{x}_{n+1}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x}_n)$$

$$\text{mit } \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{q}_n^{(1)} - h\mathbf{v}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{v}_n^{(1)} - h\dot{\mathbf{v}}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{q}_n^{(2)} - h\mathbf{v}_{n+1}^{(2)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{v}_n^{(2)} - h\dot{\mathbf{v}}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \mathbf{0}.$$

3.1.2 Mittelpunktsregel

Die Mittelpunktsregel ist ebenfalls ein implizites Einschrittverfahren, bei dem die lineare Approximation durch die Tangente in Intervallmitte gebildet wird.

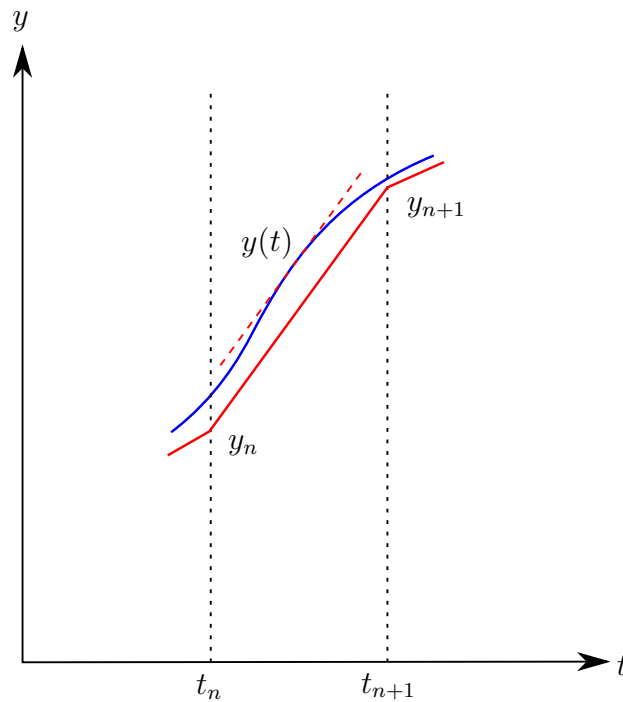


Abbildung 3.3: Mittelpunktsregel

Das Verfahren der Mittelpunktsregel lautet:

$$\begin{aligned} t_{n+1} &:= t_n + h \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{q}_n^{(i)} + h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(i)} &:= \mathbf{v}_n^{(i)} + h\dot{\mathbf{v}}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} = \mathbf{v}_n^{(i)} + \frac{h}{m^{(i)}} \cdot \nabla_{\mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)}} V \end{aligned}$$

Und das Newton-Verfahren mit Residuum $\mathbf{r}(\mathbf{x}_n)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{q}_n^{(1)} \\ \mathbf{v}_n^{(1)} \\ \mathbf{q}_n^{(2)} \\ \mathbf{v}_n^{(2)} \end{pmatrix} - \left(\frac{\partial(\mathbf{r}(\mathbf{x}_n))}{\partial \mathbf{x}_{n+1}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) \\ \text{mit } \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) &= \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{q}_n^{(1)} - h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{v}_n^{(1)} - h\dot{\mathbf{v}}_{n+\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{q}_n^{(2)} - h\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \mathbf{v}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{v}_n^{(2)} - h\dot{\mathbf{v}}_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \mathbf{0} \end{aligned}$$

Die numerische Implementierung der impliziten numerischen Verfahren mit eingebautem Newton-Verfahren kann in folgendem Pseudo-Code zusammengefasst werden:

```

ZEITSCHRITTVERFAHREN IMPLIZITER EULER/MITTELPUNKTSREGEL
INPUT Systemparameter: G, M1, M2
INPUT Modellparameter: T, dt, tol
INPUT Anfangsbedingungen  $\mathbf{q}_0^{(1)}, \mathbf{v}_0^{(1)}, \mathbf{q}_0^{(2)}, \mathbf{v}_0^{(2)}$ 
SET  $\mathbf{q}^{(i)} = \mathbf{q}_0^{(i)}, \mathbf{v}^{(i)} = \mathbf{v}_0^{(i)}$ 
DO i=1,N
    SET  $\mathbf{q}_n^{(i)} = \mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{v}_n^{(i)} = \mathbf{v}^{(i)}, \|\mathbf{r}\|=1$ 
    WHILE  $\|\mathbf{r}\| > \text{tol}$  :
        COMPUTE  $\mathbf{r}, \text{Dr}[\mathbf{x}]$ 
        UPDATE  $\mathbf{x} = \mathbf{x} - [\text{Dr}[\mathbf{x}]]^{-1} \mathbf{r}$ 
                 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{v}^{(i)}$ 
    SAVE  $\mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{v}^{(i)}$ 

```

3.2 Variationelle Integratoren

Bei den variationellen Integratoren (VI) wird anstatt der Bewegungsgleichung das Wirkungsintegral approximiert. Warum dies von Vorteil sein kann, wird in diesem und in Kapitel 4 gezeigt. Um die Bedeutung variationeller Integratoren zum Ausdruck zu bringen, wird zu Beginn dieses Kapitels mit dem Generalized- α -Verfahren eine Methode vorgestellt, welches vergleichbare Ergebnisse zu den Standardverfahren liefert. Anschließend wird noch anhand Galerkin-basierten variationellen Integratoren erläutert, wie man bereits mit großen Schrittweiten genaue und stabile Ergebnisse erreichen kann.

Das bei variationellen Integratoren zu approximierende Wirkungsintegral S ist das Zeitintegral über die Lagrangefunktion eines mechanischen Systems (vgl. [6])

$$S = \int_0^T L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) dt.$$

Beim Hamiltonschen Prinzip wird die Funktionen \mathbf{q} gesucht, welche das Wirkungsintegral zwischen zwei Endpunkten minimiert.

$$\delta S(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = 0 \quad (3.1)$$

Wenn $\mathbf{q}(t)$ die Gleichung (3.1) löst, können sämtliche Funktionen $\mathbf{q}_\alpha(t)$ durch $\mathbf{q}_\alpha(t) = \mathbf{q}(t) + \alpha \delta \mathbf{q}(t)$, $\alpha \in \mathbb{R}$, beschrieben werden. Die Funktion $\delta \mathbf{q}(t)$ kann hierfür beliebig gewählt werden. Alleine an den Rändern muss die Endpunktbedingung $\delta \mathbf{q}(0) = \delta \mathbf{q}(T) = 0$ eingehalten werden. Damit ergibt sich das Hamiltonsche Prinzip zu (vgl. [3])

$$\delta S(\mathbf{q}_\alpha) = \int_0^T L(\mathbf{q}(t) + \alpha \delta \mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t) + \alpha \frac{d}{dt} \delta \mathbf{q}(t)) dt = 0$$

mit der notwendigen Bedingung

$$\left. \frac{d}{d\alpha} \int_0^T L(\mathbf{q} + \alpha \delta \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} + \alpha \frac{d}{dt} \delta \mathbf{q}) dt \right|_{\alpha=0} = 0$$

und der Kettenregel

$$\int_0^T \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \mathbf{q} + \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \frac{d}{dt} \delta \mathbf{q} dt = 0. \quad (3.2)$$

Mit der partiellen Integration

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \mathbf{q} \right) &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \right) \cdot \delta \mathbf{q} + \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \frac{d}{dt} \delta \mathbf{q} \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \dot{\mathbf{q}} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \mathbf{q} \right) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \right) \cdot \delta \mathbf{q} \end{aligned}$$

lässt sich (3.2) weiter vereinfachen zu

$$\int_0^T \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \mathbf{q} dt + \left. \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \cdot \delta \mathbf{q} \right|_0^T - \int_0^T \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \right) \cdot \delta \mathbf{q} dt = 0.$$

Aufgrund der Endpunktbedingung $\delta \mathbf{q}(0) = \delta \mathbf{q}(T) = 0$ folgt:

$$\int_0^T \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{q}}} L(\mathbf{q}) \right) \right) \cdot \delta \mathbf{q} dt = 0. \quad (3.3)$$

Da $\delta \mathbf{q}(t)$ beliebig sein kann, folgen aus (3.3) die *Euler-Lagrange-Gleichungen*.

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} = 0}$$

Die *Euler-Lagrange Gleichungen* charakterisieren die Bewegung eines mechanischen Systems, welche bei den Standardverfahren approximiert werden. Bei den variationellen Integratoren-Verfahren erfolgt die Approximation jedoch über die *Diskreten Euler-Lagrange Gleichungen* [6].

Für die Approximation wird das Zeitintegral in N Teilintervalle diskretisiert und das Wirkungsintegral durch die diskrete Lagrangefunktion ersetzt, welche durch die Anzahl der Stützstellen pro Intervall vom Polynomgrad s der Ansatzfunktionen \mathbf{q}_d abhängt.

$$L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+\frac{s-1}{s}}, \mathbf{q}_{n+1}) \approx \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt$$

Somit wird das Wirkungsintegral diskretisiert zur Summe über die gesamte Funktion

$$S_d = \sum_{n=0}^{N-1} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+\frac{s-1}{s}}, \mathbf{q}_{n+1}) dt$$

und das diskrete Hamiltonsche Prinzip besagt

$$\begin{aligned}
 \delta S_d &= \delta \sum_{n=0}^{N-1} L_d \\
 &= \sum_{n=0}^{N-1} \delta L_d \\
 &= \sum_{n=0}^{N-1} \frac{d}{d\alpha} L_d(\mathbf{q}_n + \alpha \delta \mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}} + \alpha \delta \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1} + \alpha \delta \mathbf{q}_{n+1}) \Big|_{\alpha=0} \\
 &= \sum_{n=0}^{N-1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d \underbrace{\frac{\partial(\mathbf{q}_n + \alpha \delta \mathbf{q}_n)}{\partial \alpha}}_{\delta \mathbf{q}_n} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}} L_d \cdot \delta \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}} + \dots + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d \cdot \delta \mathbf{q}_{n+1} \right) \stackrel{!}{=} 0.
 \end{aligned}$$

Da $\delta \mathbf{q}_0 = \delta \mathbf{q}_N = 0$, ergeben sich die *Diskreten Euler-Lagrange Gleichungen*:

$$\begin{aligned}
 \delta S_d &= \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_{n-\frac{s-1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_n) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1}) \right) \delta \mathbf{q}_n \\
 &\quad + \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1}) \right) \delta \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}} \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad + \sum_{n=1}^{N-1} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{s-1}{s}}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1}) \right) \delta \mathbf{q}_{n+\frac{s-1}{s}} \\
 &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\frac{1}{s}}} L_d(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_{\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_1) \delta \mathbf{q}_{\frac{1}{s}}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

$$\vdots \tag{3.5}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\frac{s-1}{s}}} L_d(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_{\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_1) \delta \mathbf{q}_{\frac{s-1}{s}} = 0. \tag{3.6}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_{n-\frac{s-1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_n) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1}) = 0} \tag{3.7}$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{1}{k}}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{s}}, \dots, \mathbf{q}_{n+1}) = 0 \quad \forall k = 2, \dots, s} \tag{3.8}$$

Die Summanden (3.4), (3.5) und (3.6) sind in den *Diskreten Euler-Lagrange Gleichungen* nicht enthalten, werden aber für die Berechnung der zusätzlichen Anfangsbedingungen eines Zweischnittverfahrens, falls nur Anfangsbedingungen für ein Einschnittverfahren gegeben sind, benötigt.

3.2.1 Generalized- α -Verfahren

Nach der Herleitung der *Diskreten Euler-Lagrange Gleichungen*, wird beim variationellen Generalized- α -Verfahren die diskrete Lagrangefunktion linear approximiert [1].

$$L_d^\alpha = h \cdot L\left(\mathbf{q}_{n+\alpha}, \frac{\mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n}{h}\right) \quad \text{mit } \mathbf{q}_{n+\alpha} = (1 - \alpha)\mathbf{q}_n + \alpha\mathbf{q}_{n+1} \quad (3.9)$$

Für die lineare Approximation werden außer den Randstellen keine weiteren Stützstellen innerhalb des Teilintervalls benötigt. Darum werden die *Diskreten Euler-Lagrange Gleichungen* auf die Gleichung (3.7) reduziert.

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) = 0} \quad (3.10)$$

Die Gleichung (3.10) bildet bereits ein Zweischnittverfahren, mit dem strukturdynamische Probleme gelöst werden können. Für ein klassisches Anfangswertproblem in der Mechanik, bei dem nur \mathbf{q} und \mathbf{v} zum Zeitpunkt $t = t_0$ gegeben sind, muss jedoch das Zweischnittverfahren in ein Einschnittverfahren überführt werden. Zusätzlich wäre die abschließende Energie- und Drehimpulsbetrachtung in Kapitel 4 mit einem Zweischnittverfahren nicht möglich, da die Geschwindigkeit zu einem diskreten Wert nicht bekannt ist und somit Energie und Drehimpuls nur näherungsweise mit dem Differenzenquotient bestimmt werden können. Für die Transformation werden diskrete Impulse eingeführt (vgl. [6]).

$$\mathbf{p}_n := -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}). \quad (3.11)$$

(3.11) eingesetzt in (3.10) ergibt

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n) - \mathbf{p}_n = 0 \quad \xrightarrow{n \rightarrow n+1} \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1}) - \mathbf{p}_{n+1} = 0.$$

Es stehen somit zwei vektorwertige Gleichungen zur Berechnung der Unbekannten \mathbf{q}_{n+1} und \mathbf{p}_{n+1} zur Verfügung.

$$\boxed{\mathbf{p}_n = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1})} \quad (3.12)$$

$$\boxed{\mathbf{p}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+1})} \quad (3.13)$$

Aus den beiden Gleichung (3.12) und (3.13) lässt sich zusammen mit (3.9) die gesuchte Variable \mathbf{x}_{n+1} und das Residuum $\mathbf{r}(\mathbf{x}_n)$ des Newton-Verfahrens bestimmen:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_n^{(1)} \\ \mathbf{p}_n^{(1)} \\ \mathbf{q}_n^{(2)} \\ \mathbf{p}_n^{(2)} \end{pmatrix} - \left(\frac{\partial(\mathbf{r}(\mathbf{x}_n))}{\partial \mathbf{x}_{n+1}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x}_n)$$

$$\text{mit } \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) = \begin{pmatrix} \mathbf{p}_n^{(1)} - m^{(1)} \frac{\mathbf{q}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{q}_n^{(1)}}{h} + (1 - \alpha) h \frac{k}{\|\mathbf{a}\|^2} \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(1)} - m^{(1)} \frac{\mathbf{q}_{n+1}^{(1)} - \mathbf{q}_n^{(1)}}{h} - \alpha h \frac{k}{\|\mathbf{a}\|^2} \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \\ \mathbf{p}_n^{(2)} - m^{(2)} \frac{\mathbf{q}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{q}_n^{(2)}}{h} - (1 - \alpha) h \frac{k}{\|\mathbf{a}\|^2} \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(2)} - m^{(2)} \frac{\mathbf{q}_{n+1}^{(2)} - \mathbf{q}_n^{(2)}}{h} + \alpha h \frac{k}{\|\mathbf{a}\|^2} \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \mathbf{0}$$

wobei $\mathbf{a} = (1 - \alpha)\mathbf{q}_n^{(2)} + \alpha\mathbf{q}_{n+1}^{(2)} - (1 - \alpha)\mathbf{q}_n^{(1)} - \alpha\mathbf{q}_{n+1}^{(1)}$

ZEITSCHRITTVERFAHREN GENERALIZED- α -VERFAHREN

```

INPUT Systemparameter: G, M1, M2
INPUT Modellparameter: T, dt, tol,  $\alpha$ 
INPUT Anfangsbedingungen  $q_0^{(1)}$ ,  $v_0^{(1)}$ ,  $q_0^{(2)}$ ,  $v_0^{(2)}$ 
COMPUTE  $p_0^{(1)}(v_0^{(1)})$ ,  $p_0^{(2)}(v_0^{(2)})$ 
SET  $q^{(i)}=q_0^{(i)}$ ,  $p^{(i)}=p_0^{(i)}$ 
DO i=1,N
    SET  $q_n^{(i)}=q^{(i)}$ ,  $p_n^{(i)}=p^{(i)}$ ,  $\|r\|=1$ 
    WHILE  $\|r\| > tol$  :
        COMPUTE  $r$ ,  $Dr[x]$ 
        UPDATE  $x = x - [Dr[x]]^{-1}r$ 
         $x \rightarrow q^{(i)}$ ,  $p^{(i)}$ 
    SAVE  $q^{(i)}$ ,  $p^{(i)}$ 

```

3.2.2 Galerkin-basierte Variationelle Integratoren

Beim Galerkin-basierten variationellen Integratoren Verfahren (GVI-Verfahren) werden anstatt der linearen Ansatzfunktionen, wie beim Generalized- α -Verfahren, für die Approximation der diskreten Lagrangefunktion Lagrange Interpolationspolynome gewählt (vgl. [6])

$$N_j(t) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{s+1} \frac{t - t_i}{t_j - t_i}; \quad j \in [1, s+1] \subset \mathbb{N}. \quad (3.14)$$

Hier entspricht s dem Polynomgrad und j der durchnummerierten Position im Zeitelement.

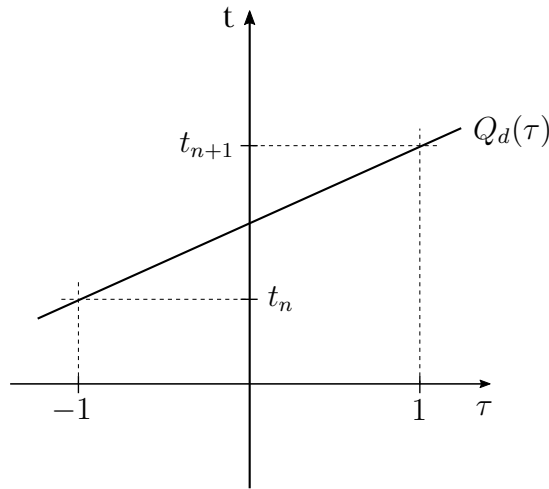
Die Lagrange'schen Interpolationspolynome besitzen folgende Kollokationseigenschaft:

$$\delta_{nj} = \begin{cases} 1 & n = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Die Diskretisierung der Lagrangefunktion für ein einzelnes Zeitelement lautet

$$L_d = \int_{t_n}^{t_{n+1}} L(\mathbf{q}_d, \dot{\mathbf{q}}_d) dt, \quad \mathbf{q}_d \approx \sum_{j=1}^{s+1} N_j \mathbf{q}_j. \quad (3.15)$$

Für die Diskretisierung der Lagrangefunktion (3.15) mit den Ansatzfunktionen (3.14) werden die Zeitelemente linear affin auf ein Referenzzeitelement transformiert.


 Abbildung 3.4: Transformation $t \rightarrow \tau$

Die Transformationsvorschrift lautet:

$$t = Q_d(\tau) = \frac{h}{2} \cdot \tau + \frac{t_{n+1} + t_n}{2}$$

$$\frac{dt}{d\tau} = \frac{h}{2} \quad \Leftrightarrow \quad dt = \frac{h}{2} d\tau.$$

Die Integrale über $L(\mathbf{q}_d, \dot{\mathbf{q}}_d)$ bei den linearen kinetischen Energieanteilen werden soweit vereinfacht, dass nur noch über die Interpolationspolynome integriert wird und somit das Integral analytisch gelöst werden kann.

Bei den nichtlinearen potentiellen Energieanteilen ist eine analytische Lösung der Integrale nicht möglich, weshalb ein numerisches Verfahren benötigt wird.

Durch die linear affine Transformation bietet sich die Gauß-Legendre-Quadratur an.

$$\int_{-1}^1 f(t) dt \approx \sum_{i=1}^{n_{gp}} f(t_i) \cdot W(t_i)$$

Zwei Gaußpunkte lösen das Integral eines Polynoms exakt bis zu einem Polynomgrad von $s = 2n - 1 = 2 \cdot 2 - 1 = 3$. Durch die Wahl des Polynomgrades der Ansatzfunktionen lässt sich die Genauigkeit des GVI-Verfahrens frei wählen. In dieser Arbeit wird sich jedoch auf eine quadratische Approximation der Lösungsfunktionen q_d beschränkt. Dies ist der Übersichtlichkeit geschuldet, schließt andere aber keinen Falls aus (siehe Abb. 3.5). Für die Gauß-Quadratur bedeutet dies, dass 2 oder mehr Gaußpunkte das Integral der quadratischen Interpolationspolynome exakt lösen.

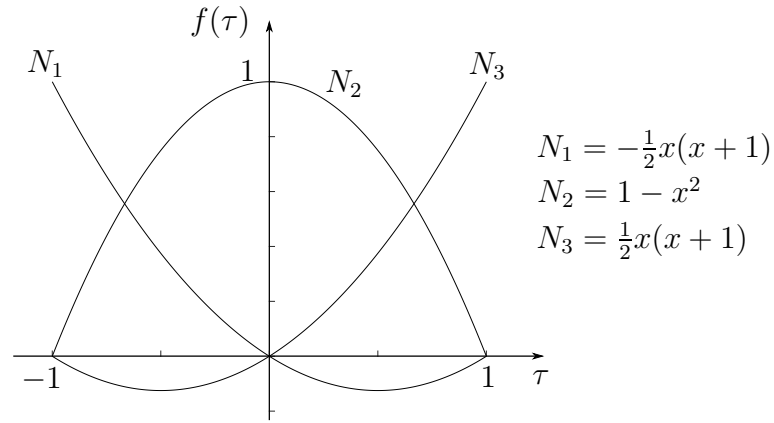


Abbildung 3.5: Quadratische Ansatzfunktionen auf Referenzintervall

Die *Diskreten Euler-Lagrange-Gleichungen* (3.7) und (3.8) vereinfachen sich dann zu:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) = 0 \quad (3.17)$$

Die Gleichungen (3.16) und (3.17) stellen nun wieder ein Zweischnittverfahren dar. Bei bekannten \mathbf{q}_{n-1} , $\mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}$ und \mathbf{q}_n kann die Konfiguration zu den Zeitpunkten $t_{n+\frac{1}{2}}$ und t_{n+1} berechnet werden.

Einschrittverfahren

Wie beim Generalized- α -Verfahren kann der 2-Schritt Variationsintegrator aus (3.16) und (3.17) in ein Einschrittverfahren umgeformt werden. Um das Zweischnittverfahren in ein Einschrittverfahren umzuformen, wird Gleichung (3.16) durch die diskreten Impulse ersetzt.

$$\mathbf{p}_n := -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) \quad (3.18)$$

(3.18) in (3.16) eingesetzt:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_n) - \mathbf{p}_n = 0$$

$$\xrightarrow{n \rightarrow n+1} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) - \mathbf{p}_{n+1} = 0.$$

So ergeben sich die ersten beiden Gleichungen des Einschrittverfahrens zu

$$\mathbf{p}_n = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) \quad (3.19)$$

$$\mathbf{p}_{n+1} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}). \quad (3.20)$$

Für die weiteren Unbekannten, zusätzliche Stützstellen des Intervalls, werden die Gleichungen aus (3.8) aus dem Zweischnittverfahren übernommen. So bildet sich das Einschrittverfahren für den speziellen Fall der quadratischen Ansatzfunktionen mit folgenden Gleichungen:

$$\mathbf{p}_n + \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_n} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) = 0 \quad (3.21)$$

$$\mathbf{p}_{n+1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) = 0 \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}} L_d(\mathbf{q}_n, \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_{n+1}) = 0. \quad (3.23)$$

Die Umformung von einem Zweischnitt- in ein Einschrittverfahren ist somit unabhängig vom Polynomgrad der Ansatzfunktionen und für alle GVI-Verfahren anwendbar. Das Newton-Verfahren für das GVI-Einschrittverfahren ergibt sich somit zu:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}_{n+1} &= \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{q}_n^{(1)} \\ \mathbf{p}_n^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \mathbf{q}_n^{(2)} \\ \mathbf{p}_n^{(2)} \end{pmatrix} - \left(\frac{\partial \mathbf{r}(\mathbf{x}_n)}{\partial \mathbf{x}_{n+1}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) \\
 \mathbf{r}(\mathbf{x}_n) &= \begin{pmatrix} \mathbf{p}_n^{(1)} + \left(2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{a}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{b} dt \right) \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(1)} - \left(2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{c}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{d} dt \right) \\ 2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{e}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{f} dt \\ \mathbf{p}_n^{(2)} + \left(2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{b} dt \right) \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(2)} - \left(2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{c}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{d} dt \right) \\ 2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{e}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{f} dt \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} 0
 \end{aligned}$$

mit

$$\mathbf{a}^{(i)} = \mathbf{q}_n^{(i)} N_{1,\tau} N_{1,\tau} + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{1,\tau} + \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} N_{3,\tau} N_{1,\tau}$$

$$\mathbf{b} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_n N_1 N_1 + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} N_2 N_1 + \mathbf{q}_{n+1} N_3 N_1), \forall k, l = n, n + \frac{1}{2}, n + 1$$

$$\mathbf{c}^{(i)} = \mathbf{q}_n^{(i)} N_{1,\tau} N_{3,\tau} + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{3,\tau} + \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} N_{3,\tau} N_{3,\tau}$$

$$\mathbf{d} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_n N_1 N_3 + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} N_2 N_3 + \mathbf{q}_{n+1} N_3 N_3), \forall k, l = n, n + \frac{1}{2}, n + 1$$

$$\mathbf{e}^{(i)} = \mathbf{q}_n^{(i)} N_{1,\tau} N_{2,\tau} + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{2,\tau} + \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} N_{3,\tau} N_{2,\tau}$$

$$\mathbf{f} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_n N_1 N_2 + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} N_2 N_2 + \mathbf{q}_{n+1} N_3 N_2), \forall k, l = n, n + \frac{1}{2}, n + 1$$

und

$$\mathbf{N} = (N_i N_j) \mathbf{I}^2 \quad \forall i, j = 1, 2, 3.$$

Zweischrittverfahren

Da das GVI-Verfahren abgesehen von der Energie- und Drehimpulserhaltung ebenfalls als Zweischrittverfahren durchführbar ist und bei passenden Anfangsbedingungen keine Einführung von diskreten Impulsen bedarf, ist im Folgenden ebenso das Newton-Verfahren für das Zweischrittverfahren dargestellt.

$$\mathbf{x}_{n+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \mathbf{q}_{n+1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}^{(1)} \\ \mathbf{q}_n^{(1)} \\ \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}^{(2)} \\ \mathbf{q}_n^{(2)} \end{pmatrix} - \left(\frac{\partial \mathbf{r}(\mathbf{x}_n)}{\partial \mathbf{x}_{n+1}} \right)^{-1} \cdot \mathbf{r}(\mathbf{x}_n)$$

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}_n) = \begin{pmatrix} 2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{a}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{b} dt + 2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{c}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{d} dt \\ 2\frac{m^{(1)}}{h}\mathbf{e}^{(1)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{f} dt \\ 2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{b} dt + 2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{c}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{d} dt \\ 2\frac{m^{(2)}}{h}\mathbf{e}^{(2)} + \frac{kh}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{f} dt \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \mathbf{0}$$

mit

$$\mathbf{a}^{(i)} = \mathbf{q}_{n-1}^{(i)} N_{1,\tau} N_{3,\tau} + \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{3,\tau} + \mathbf{q}_n^{(i)} N_{3,\tau} N_{3,\tau}$$

$$\mathbf{b} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_{n-1} N_1 N_3 + \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} N_2 N_3 + \mathbf{q}_n N_3 N_3), \quad \forall k, l = n-1, n-\frac{1}{2}, n$$

$$\mathbf{c}^{(i)} = \mathbf{q}_n^{(i)} N_{1,\tau} N_{1,\tau} + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{1,\tau} + \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} N_{3,\tau} N_{1,\tau}$$

$$\mathbf{d} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_n N_1 N_1 + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} N_2 N_1 + \mathbf{q}_{n+1} N_3 N_1), \quad \forall k, l = n, n+\frac{1}{2}, n+1$$

$$\mathbf{e}^{(i)} = \mathbf{q}_n^{(i)} N_{1,\tau} N_{2,\tau} + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}}^{(i)} N_{2,\tau} N_{2,\tau} + \mathbf{q}_{n+1}^{(i)} N_{3,\tau} N_{2,\tau}$$

$$\mathbf{f} = [(\mathbf{q}_k)^T \cdot \mathbf{N} \cdot \mathbf{q}_l]^{-\frac{3}{2}} \cdot (\mathbf{q}_n N_1 N_2 + \mathbf{q}_{n+\frac{1}{2}} N_2 N_2 + \mathbf{q}_{n+1} N_3 N_2), \quad \forall k, l = n, n+\frac{1}{2}, n+1$$

und

$$\mathbf{N} = (N_i N_j) \mathbf{I}^2 \quad \forall i, j = 1, 2, 3.$$

Für den Fall, dass Anfangsbedingungen für ein Einschrittverfahren, Orts- und Geschwindigkeitsvektor zum Zeitpunkt $t = 0$, bekannt sein sollten, lässt sich der erste Zeitschritt mithilfe des Impulses und dem in den *Diskreten Euler-Lagrange-Gleichungen* nicht enthaltene erste Summand (3.4) berechnen.

$$p(0) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_0} L_d(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_{\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_1), \quad \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_{\frac{1}{2}}} L_d(\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_{\frac{1}{2}}, \mathbf{q}_1) = 0 \quad (3.24)$$

ZEITSCHRITTVERFAHREN HIGHER-ORDER-Galerkin-VI-VERFAHREN

```

INPUT Systemparameter: G, M1, M2
INPUT Modellparameter: T, dt, tol
INPUT Anfangsbedingungen  $\mathbf{q}_0^{(1)}, \mathbf{v}_0^{(1)}, \mathbf{q}_0^{(2)}, \mathbf{v}_0^{(2)}$ 
SET  $\mathbf{q}_1^{(1)} = \mathbf{q}_0^{(1)}, \mathbf{q}_2^{(1)} = \mathbf{q}_0^{(1)}, \mathbf{q}_1^{(2)} = \mathbf{q}_0^{(2)}, \mathbf{q}_2^{(2)} = \mathbf{q}_0^{(2)}, \|\mathbf{r}\| = 1$ 
IF Zweischritt
    Initialisierung  $\mathbf{q}_1^{(1)}, \mathbf{q}_2^{(1)}, \mathbf{q}_1^{(2)}, \mathbf{q}_2^{(2)}$ 
DO i=1,N
    SET  $\mathbf{q}_{n-1} = \mathbf{q}_0, \mathbf{q}_{n-\frac{1}{2}} = \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_n = \mathbf{q}_2, \|\mathbf{r}\| = 1$ 
    SET  $\mathbf{q}_0 = \mathbf{q}_2$ 
    WHILE  $\|\mathbf{r}\| > \text{tol}$  :
        CALL element(Gauß)
        COMPUTE  $\mathbf{r}, \mathbf{Dr}[\mathbf{x}]$ 
        UPDATE  $\mathbf{x} = \mathbf{x} - [\mathbf{Dr}[\mathbf{x}]]^{-1} \mathbf{r}$ 
             $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}_1^{(1)}, \mathbf{q}_2^{(1)}, \mathbf{q}_1^{(2)}, \mathbf{q}_2^{(2)}$ 
    SAVE  $\mathbf{q}_1^{(1)}, \mathbf{q}_2^{(1)}, \mathbf{q}_1^{(2)}, \mathbf{q}_2^{(2)}$ 

```

Kapitel 4

Numerische Untersuchungen

Für die numerische Lösung eines strukturdynamischen Problems ist es entscheidend, ein geeignetes numerisches Verfahren zu wählen, um möglichst effizient zuverlässige Ergebnisse zu bekommen. Daher ist es von entscheidender Bedeutung, welches Konvergenzverhalten die in dieser Arbeit behandelten Verfahren aufweisen, um Anzahl der Rechenschritte mit Rechenkomplexität abwägen zu können. Ein weiterer wichtiger Aspekt liegt im Verhalten der strukturerhaltenden Eigenschaften eines Verfahrens. Die Energie- und Drehimpulserhaltung geben Aussage über die Stabilität des Verfahrens und die Zuverlässigkeit der Ergebnisse. Daher werden in diesem Kapitel die in Kapitel 3 vorgestellten numerischen Verfahren auf ihr Verhalten hin untersucht.

4.1 Modell

Für die numerischen Untersuchungen in diesem Kapitel wird das Zweikörperproblem mit den in Kapitel 3 vorgestellten numerischen Verfahren näherungsweise gelöst. Für das Zweikörperproblem wurden folgende fiktiven Werte angenommen:

$$m^{(1)} = 1, \quad m^{(2)} = 100, \quad G = 10, \quad \Rightarrow k = 100$$
$$t = 0 : q_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad q_0^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 15 \end{pmatrix}, \quad v_0^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Die Position der beiden Massen $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ bis $T = 10$ mithilfe der Mittelpunktsregel berechnet, ergibt mit den zuvor genannten fiktiven Werten folgende Bahnkurven

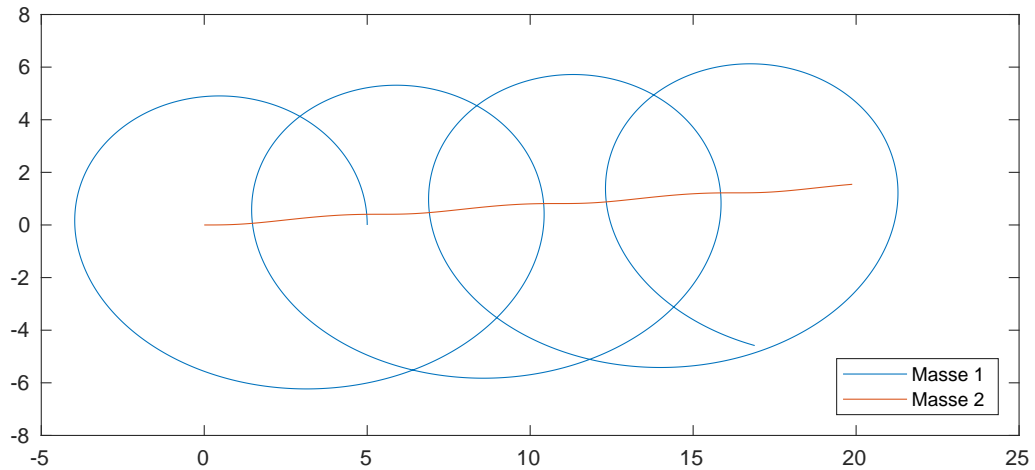


Abbildung 4.1: Bahnkurven der Massen $m^{(1)}$ und $m^{(2)}$ bis Zeitpunkt $T = 10$

In Abbildung 4.1 ist deutlich zu erkennen, dass die Bahn von Masse $m^{(1)}$ stark von Masse $m^{(2)}$, aufgrund der 100-fach größeren Masse von $m^{(2)}$, beeinflusst wird, währenddessen die Bahnkurve von Masse $m^{(2)}$ kaum durch Masse $m^{(1)}$ bestimmt wird. Im Folgenden wird für die numerischen Untersuchungen nur Masse $m^{(1)}$ betrachtet.

4.2 Numerische Fehleranalyse

Um die Fehleranalyse der numerischen Verfahren in Abhängigkeit von der Zeitschrittweite untersuchen zu können, wird in der Regel eine analytische Lösung benötigt. Da eine analytische Lösung für das Zweikörperproblem in Abhängigkeit der Zeit nicht zu bestimmen ist, wird anstelle der analytischen Lösung ein numerisches Verfahren gewählt, welches aufgrund einer sehr kleinen Schrittweite nahe an die analytische Lösung herankommt. Für die folgenden Untersuchungen wird als Referenzverfahren die Mittelpunktsregel mit einer Schrittweite von $h = 2^{-20} \approx 10^{-6}$ genommen. Um ausreichend Funktionswerte für die folgenden Analysen zu bekommen, wird die Schrittweite immer halbiert.

In Abbildung 4.2 und Abbildung 4.3 sind die relativen Fehler der numerischen Verfahren zur Referenzlösung in Abhängigkeit zur Zeitschrittweite h auf logarithmischen Achsen dargestellt, welche sich folgendermaßen berechnet:

$$\epsilon(h) = \frac{\|\mathbf{q}^{ref}(t^*) - \mathbf{q}(t^*)\|}{\|\mathbf{q}^{ref}(t^*)\|}.$$

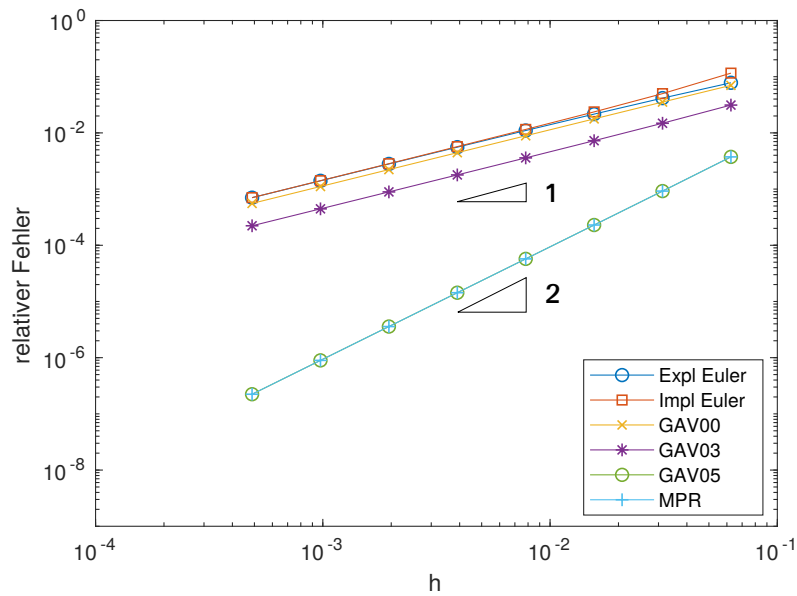


Abbildung 4.2: Fehleranalyse zum Zeitpunkt $t=0.25$; GAV0x: Generalized- α -Verfahren mit $\alpha=0.x$, MPR: Mittelpunktsregel

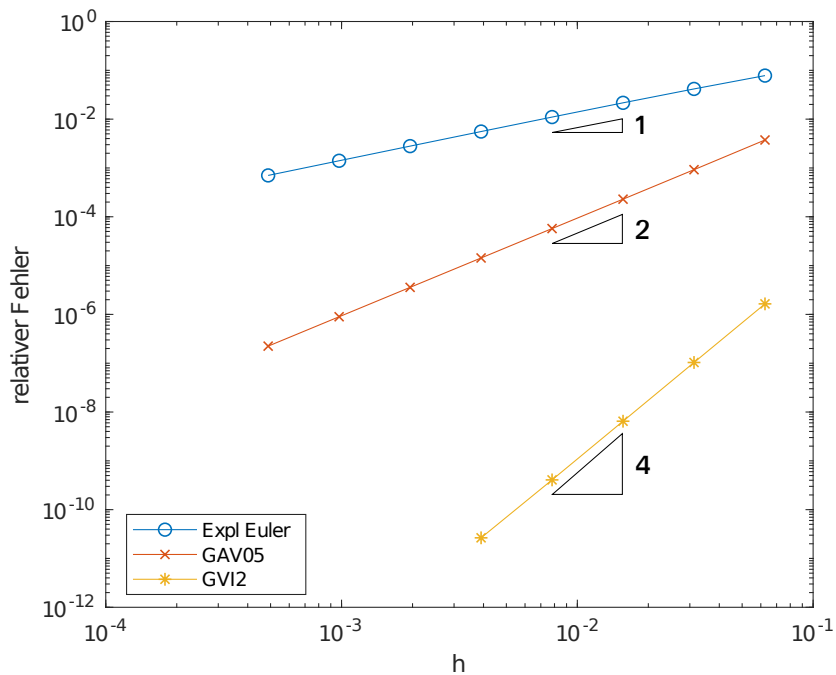


Abbildung 4.3: Fehleranalyse zum Zeitpunkt $t=0.25$; GAV0x: Generalized- α -Verfahren mit $\alpha=0.x$, GVI2: GVI-Verfahren mit quadratischen Ansatzfunktionen

Die Euler-Verfahren haben von den numerischen Verfahren den größten relativen Fehler und Genauigkeitsordnung 1. Durch die näherungsweise Berechnung der Geschwindigkeit

in Intervallmitte der Mittelpunktsregel durch

$$\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{v}_{n+1} + \mathbf{v}_n}{2}, \quad (4.1)$$

entspricht die Mittelpunktsregel dem Generalized- α -Verfahren mit $\alpha = 0.5$. Es handelt sich somit um das gleiche numerische Verfahren und beide Verfahren weisen die gemeinsame Genauigkeitsordnung 2 auf.

Sobald sich α dem Wert 0 oder 1 annähert, entspricht das Generalized- α -Verfahren einem Verfahren erster Ordnung mit einem größeren relativen Fehler als mit $\alpha = 0.5$. In der Abbildung 4.3 ist zusätzlich zu den Standardverfahren und dem Generalized- α -Verfahren auch die Ordnung des GVI-Verfahrens mit quadratischen Ansatzfunktionen zu erkennen. Aus der Definition der Konvergenzordnung p ,

$$\|f(x_n) - f_n\| \leq K \cdot h^p \quad (4.2)$$

mit der Zeitschrittweite h und einer von h unabhängigen Zahl K , folgt, dass der globale Verfahrensfehler bei einem Verfahren mit $p = 2$ und einer Zeitschrittweite von $h = 10^{-6}$ der gleiche sein muss, wie bei einem Verfahren 1. Ordnung und $h = 10^{-12}$ oder $p = 4$ und $h = 10^{-3}$ (vgl. [5]).

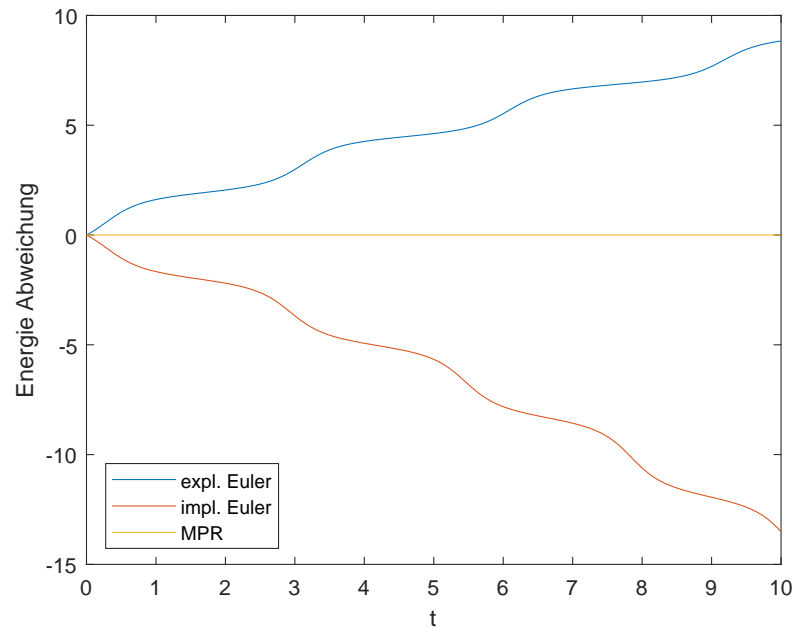
$$h^p = (10^{-6})^2 = 10^{-12} = (10^{-12})^1 = (10^{-3})^4 \quad (4.3)$$

Daraus folgt beispielsweise, dass eine Auswertung der Verfahren 4. Ordnung mit der oben genannten Referenzlösung nur für $h \leq 10^{-3}$ aussagekräftig ist, was mit 2^{-9} noch eingehalten ist, mit 2^{-10} jedoch nicht mehr.

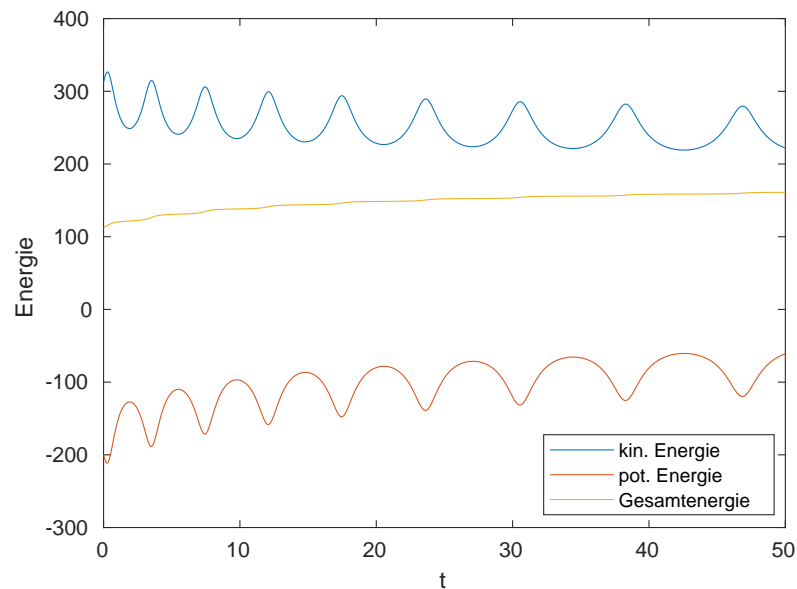
Die Definition (4.2) bestätigt zusätzlich die aus den Abbildungen 4.2 und 4.3 gezogenen Schlüsse. Ein Verfahren mit Konvergenzordnung p dividiert den Verfahrensfehler durch 2^p , wenn die Schrittweite halbiert wird.

4.3 Energieerhaltung

Nach der numerischen Fehleranalyse erfolgt in diesem Abschnitt nun der Vergleich zwischen den Verfahren in Bezug auf ihre strukturerhaltenden Eigenschaften. Die erste zu untersuchende Eigenschaft ist die Energieerhaltung. Bei Betrachtung der Standardverfahren ist deutlich zu erkennen, dass die Euler-Verfahren die Energie nicht erhalten.

Abbildung 4.4: Gesamtenergien mit Schrittweite $h = 10^{-3}$

Beim expliziten Euler-Verfahren entfernen sich die beiden Massen immer weiter voneinander, das heißt, die negative potentielle Energie wird betragsmäßig immer kleiner, weshalb die Gesamtenergie des Systems trotz sinkender kinetischen Energie größer wird.

Abbildung 4.5: Energien beim expliziten Euler-Verfahren bis $t=50$, $h = 10^{-3}$

Beim impliziten Euler-Verfahren ist es genau umgekehrt. Die beiden Massen bewegen sich aufeinander zu, weshalb beim impliziten Euler-Verfahren bei einem zu großen Fehler

die beiden Massen aufeinanderstoßen und das Verfahren nicht mehr aussagekräftig wird.

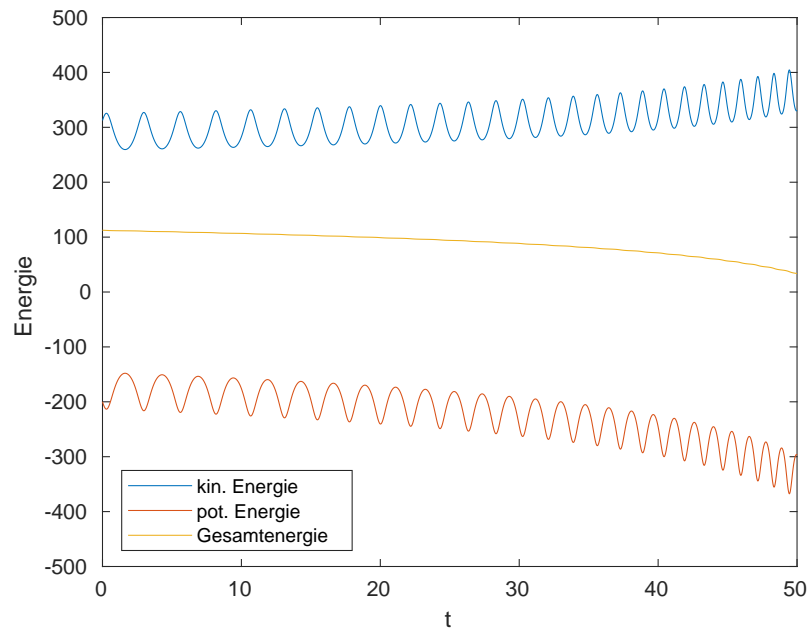
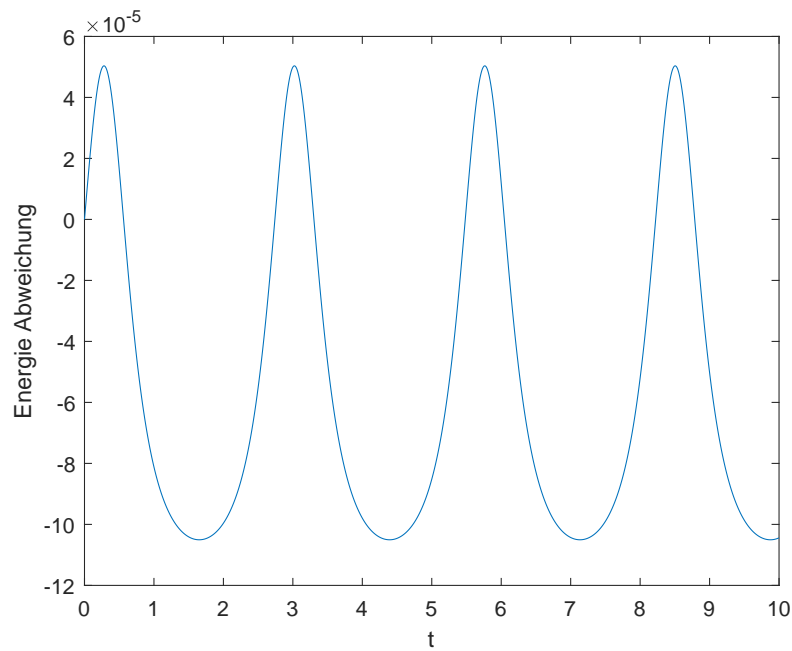


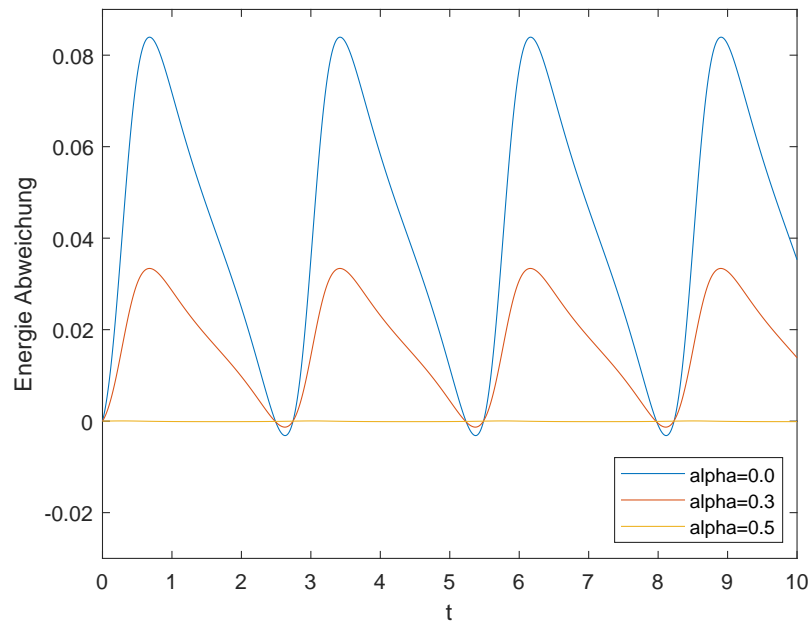
Abbildung 4.6: Energien beim impliziten Euler-Verfahren bis $t=50$, $h = 10^{-4}$

In Abbildung 4.4 ist neben den Euler-Verfahren auch das Energieverhalten der Mittelpunktsregel zu erkennen. Bei der Mittelpunktsregel handelt es sich um ein gutmütiges Verhalten, da es sich nicht um Energieerhaltung handelt, sondern die Gesamtenergie des Systems um den exakten Wert oszilliert (siehe Abb. 4.11).

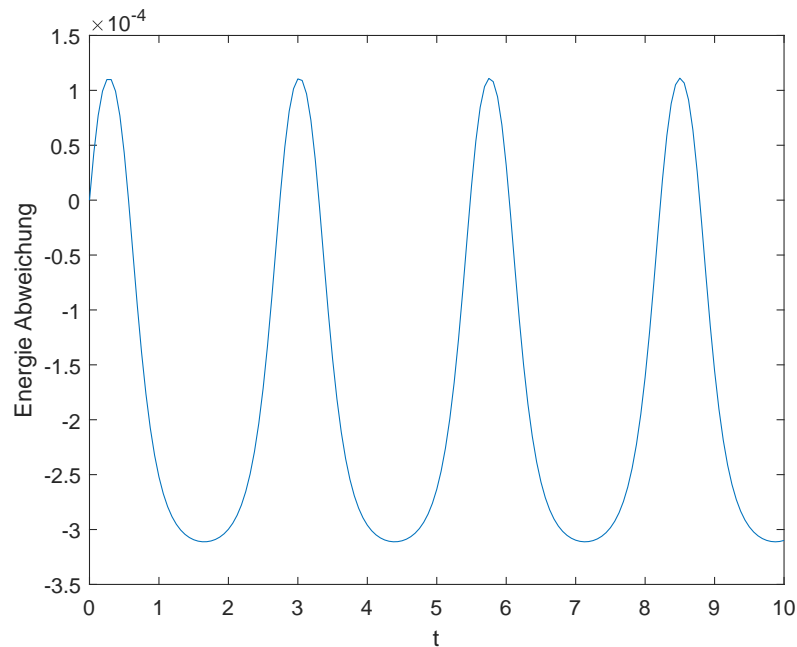
Abbildung 4.7: Gesamtenergie MPR mit $h = 10^{-3}$

Bei der numerischen Fehleranalyse wiesen das Generalized- α -Verfahren mit $\alpha = 0.0$ und $\alpha = 1.0$ nur einen gering kleineren Fehler als die Euler-Verfahren auf, doch im Gegensatz zu diesen erhält das Generalized- α -Verfahren durch sein symplektisches Verhalten die Energie (Abb. 4.8).

Die Amplitude der Oszillierung nimmt mit kleiner werdender Schrittweite und kleinerer Differenz $dif = \|\frac{1}{2} - \alpha\|$ ab.


 Abbildung 4.8: Energien beim Generalized- α -Verfahren, $h = 10^{-3}$

Wie bei den Verfahren 2. Ordnung oszilliert auch beim Verfahren 4. Ordnung die Energie und es handelt sich um ein gutmütiges Energieverhalten.


 Abbildung 4.9: Gesamtenergie Galerkin VI 4. Ordnung, $h = 2^{-4}$

Mit zunehmender Ordnung wird jedoch die Abweichung zum exakten Wert deutlich kleiner, was am Vergleich zwischen dem GVI-Verfahren und dem Generalized- α -Verfahren

mit $\alpha = 0.5$ deutlich wird.

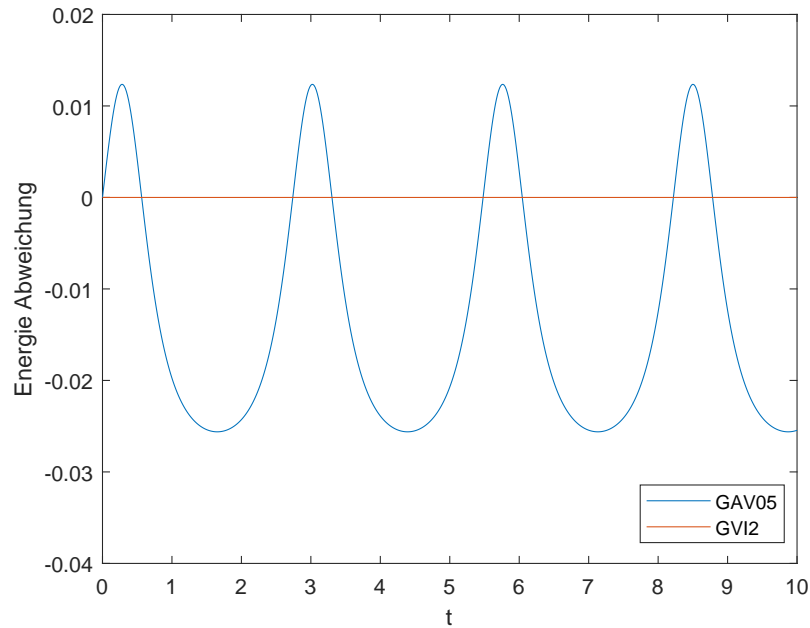


Abbildung 4.10: Gesamtenergien mit Schrittweite $h = 2^{-6}$

Für die Energie- und folgende Drehimpulsbetrachtung wurde beim Generalized- α -Verfahren und dem GVI-Verfahren nur das Einschrittverfahren angewendet, da bei einem Zweischnittverfahren die Geschwindigkeit und somit Energie- und Drehimpuls zu einem Zeitpunkt nicht bekannt sind. Durch eine näherungsweise Berechnung der Geschwindigkeit würde der Fehler des Differenzenquotients, als ungenaueres Verfahren, relevant und das eigentliche Verhalten des Verfahrens nicht sichtbar werden.

4.4 Drehimpulserhaltung

Bei der Drehimpulsbetrachtung der Euler-Verfahren zeigt sich das gleiche Verhalten, wie bei der Energiebetrachtung. Der Drehimpuls beim expliziten Euler wird immer größer und beim impliziten Euler immer kleiner, bis die Massen aufeinander stoßen.

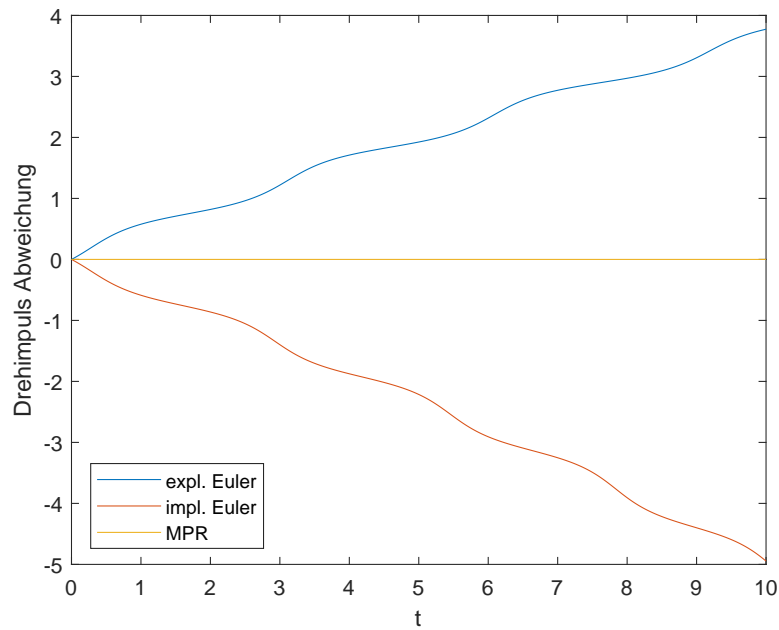


Abbildung 4.11: Drehimpuls mit $h = 10^{-3}$

In Abbildung 4.12 ist zu erkennen, dass die Mittelpunktsregel und das Generalized- α -Verfahren, unabhängig vom Parameter α , nicht nur ein gutmütiges Verhalten aufweisen, sondern drehimpulserhaltend sind.

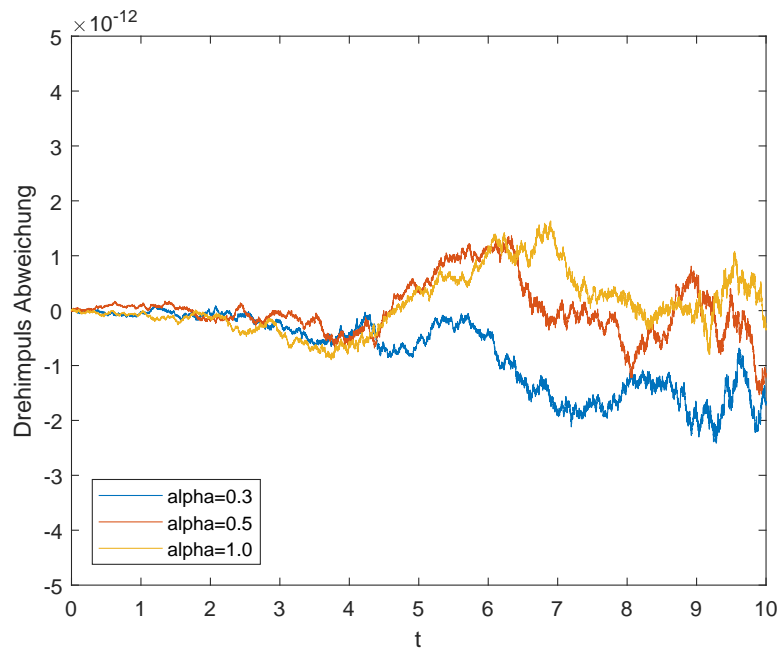


Abbildung 4.12: Drehimpuls beim Generalized- α -Verfahren, $h = 10^{-3}$

Das GVI-Verfahren verhält sich bei der Drehimpulsbetrachtung wie das Generalized- α -

Verfahren, welches ebenfalls ein variationelles Integratoren-Verfahren ist. In der folgenden Abbildung ist die Drehimpulsimpulserhaltung des GVI-Verfahrens zu erkennen.

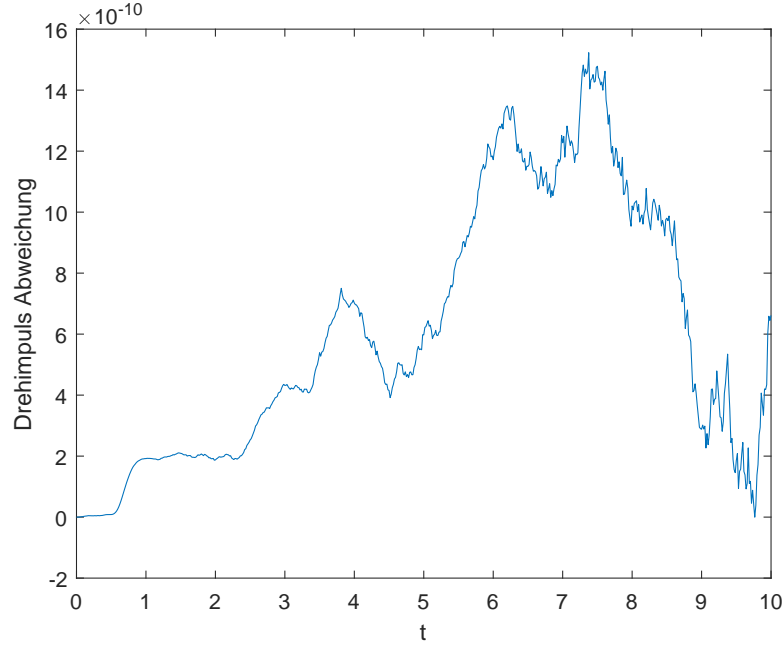


Abbildung 4.13: Drehimpuls GVI 4. Ordnung, $h = 2^{-6}$

Die Abweichungen vom exakten Wert sind auf Rundungsfehler und beschränkte Genauigkeit des Newton-Verfahrens zurückzuführen.

4.5 Auswertung

Wie in Abbildung 4.2 und 4.3 zu erkennen ist, ist in einem Diagramm mit logarithmischen Achsen die Ordnung eines Verfahrens an der Steigung der Geraden des relativen Fehlers abzulesen. Die Euler-Verfahren und das Generalized- α -Verfahren für $\alpha \neq 0.5$ weisen die Steigung 1 auf und bestätigen somit die bereits bekannten Konvergenzordnungen. Die Geraden der Mittelpunktsregel und des Generalized- α -Verfahrens für $\alpha = 0.5$, welche identisch sind, haben abgesehen von der vertikalen Verschiebung nach unten die doppelte Steigung und besitzen folglich die Ordnung 2. Beim GVI-Verfahren lassen sich, durch die Wahl eines höheren Polynomgrades der Ansatzfunktionen, auch höhere Ordnungen erzielen. Für quadratische Lagrange Interpolationspolynome ergibt sich Ordnung 4, was dem Verhältnis zwischen Konvergenzordnung p und Polynomgrad s , $p = 2s$ (vgl. [1] S. 981), entspricht.

Zwischen den verschiedenen Verfahren ändert sich nicht nur der lokale Fehler, sondern auch Energie- und Drehimpulsverhalten. Während bei den Euler-Verfahren das System

Energie gewinnt bzw. verliert, weisen die variationellen Integratoren-Verfahren aufgrund ihres symplektischen Verhaltens ein gutmütiges Energieverhalten auf. Die Gesamtenergie oszilliert dabei um den genauen Wert. Der Wertebereich, innerhalb dem die Energie oszilliert, nimmt mit steigender Genauigkeit des Verfahrens ab. In Bezug auf den Drehimpuls kann man bei den VI-Verfahren sogar von einer Drehimpulserhaltung sprechen.

Diese zwei strukturerhaltenden Eigenschaften der VI-Verfahren ermöglicht eine vom Betrachtungszeitraum T unabhängige Durchführung der numerischen Verfahren, wohingegen die Euler-Verfahren bei länger andauernden Zeitspannen keine verlässlichen Ergebnisse mehr liefern.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

5.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden anhand des Zweikörperproblems zwei verschiedene Möglichkeiten gezeigt, ein strukturdynamisches Anfangswertproblem zu lösen. Die erste Möglichkeit besteht darin, die Euler-Lagrange Gleichungen, welche die Bewegungsgleichungen eines mechanischen Systems darstellen, geeignet zu approximieren. Auf diese Weise können Standardverfahren, wie die Euler-Verfahren oder die Mittelpunktsregel, erstellt werden. Bei der zweiten Variante, den variationellen Integratoren, werden die numerischen Verfahren auf Basis der diskreten Euler-Lagrange Gleichungen gebildet, welche durch eine Diskretisierung des Wirkungsintegrals hergeleitet werden. Durch die Wahl der Ansatzfunktionen für die diskreten Euler-Lagrange Gleichungen ist eine beliebige Ordnung des numerischen Verfahrens möglich.

Die Euler-Verfahren finden trotz ihrer geringen Ordnung häufig in der Praxis Anwendung, da es sich um sehr einfache Verfahren handelt und mit kleineren Schrittweiten gleiche Ergebnisse erzielen lassen wie mit Verfahren höherer Ordnung. Dennoch haben sie den großen Nachteil, nicht Energie- und Drehimpulserhaltend zu sein. Das hat zur Folge, dass bei zu großen Zeitschritten oder Zeitspannen die Verfahren keine sinnvollen Ergebnisse mehr liefern, während die variationellen Integratoren-Verfahren stabil und unabhängig von der Zeit durchführbar sind.

5.2 Ausblick

In dieser Arbeit wurden neben Standardverfahren auch die komplexeren Galerkin-basierten variationellen Integratoren für quadratische Ansätze implementiert und mit anderen Verfahren verglichen. Die Anwendung hierarchischer Ansatzfunktionen wäre eine interessante Erweiterung zu den in Kapitel 3 eingeführten Verfahren. Neben der Untersuchung weiterer Verfahren wäre es ebenfalls von großer Bedeutung, die bereits behandelten Verfahren auf ein komplexeres Problem zu übertragen. Angefangen mit dem N-Körper-Problem, welches nur eine Erweiterung zu dieser Arbeit bilden würde, wäre sicherlich das Ziel, die Verfahren auf realitätsorientierte Problemstellungen im Bauingenieurwesen zu übertragen.

Bei jeglichem Schwingungsverhalten von Platten, Balken und anderen Trägern müssen Differentialgleichungen numerisch gelöst werden und energie- und drehipulserhaltende Verfahren spielen dabei eine wichtige Rolle. Die Anwendung variationeller Integratoren auf komplexere Systeme stellt somit eine weitere Herausforderung, die ein mögliches Thema für eine Masterarbeit sein könnte.

Literaturverzeichnis

- [1] P. Betsch. *Numerische Strukturdynamik*. Mitschrift zur Vorlesung, 2015.
- [2] V. Bialas. *Johannes Kepler*. Verlag C.H.Beck, 2004.
- [3] J.C. Clegg. *Variationsrechnung*. Teubner Studienbücher, 1970.
- [4] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian Dynamics*. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, 2005.
- [5] M. Neher. *Höhere Mathematik 4 für die Fachrichtung Bauingenieurwesen*. Skriptum zur Vorlesung, 2013.
- [6] S. Ober-Blöbaum and N. Saake. *Construction and analysis of higher order Galerkin variational integrators*. Advances in Computational Mathematics, 2014. 41:955-986.
- [7] A. Schadschneider. *Theoretische Physik: Grundlagen*. 2015.
- [8] T. Ströhle. *Galerkin-basierte gemischte Finite Elemente in der Zeit für die Strukturdynamik*. Karlsruher Institut für Technologie, 2017.