Mecánica Computacional Volumen XV
Compilado por A. Larreteguy y M. Vénere
Bariloche, noviembre de 1995

SOBRE LOS INTEGRADORES SIMPLECTICOS

Paulo F. Porta, Marcelo Kloster
Laboratorio de Mecánica de los Fluidos, U.T.N., Facultad Regional Haedo
Paris 532, 1706, Haedo, Pcia. de Buenos Aires, Argentina

RESUMEN

En el presente trabajo, deseamos poner en evidencia las propiedades topológicas de la familia de integradores simplécticos. En particular, se resalta el hecho de que conservan la energía, lo que los hace particularmente aptos para la integración de sistemas conservativos por largos períodos.

ABSTRACT

In this paper, we wish to put in evidence the topological properties of the simplectic family of integrators. It is made special mention of the fact that they intrinsically conserve the energy, a fact that makes them particularly useful for long term integration of conservative systems.

INTRODUCCION

Supongamos una estructura elástica, pero con una relación constitutiva no lineal, es decir un material del tipo caucho, del cual queremos estudiar su comportamiento dinámico. Un modelo posible para un sistema tal puede escribirse en términos de tres matrices caracterizadoras del sistema discretizado: M matriz de masa, K matriz de rigidez y Λ una matriz que describirá los apartamientos del régimen lineal. De este modo, la formulación dinámica se hace a través de la ecuación de movimiento:

$$M\ddot{x}(t) + Kx(t) + \Lambda x^3(t) = P(x,t) \tag{1}$$

o bien en términos del sistema equivalente:

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = v(t) \\ M\dot{v}(t) = P(x,t) - Kx(t) - \Lambda x^3(t) \end{cases} \tag{2}$$

donde $\dot{x}(t) = v(t)$ es el vector de aceleraciones nodales, $x(t)$ es el vector de desplazamientos nodales y $P(x,t)$ es el vector de cargas, que puede ser nulo si se desea estudiar el problema de oscilaciones libres. Vale la pena aclarar que nuestro modelo simula la estructura no lineal como suma de una lineal más un término de tercer orden; independientemente de esto el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (E.D.O.s) dado por (2) describe la dinámica de un sistema de osciladores no lineales acoplados en el espacio de fases; un sistema como este conserva la energía o en términos más generales tiene asociada una forma conservativa del tipo de Liouville (Ref. [3]), de la forma:

$$\int d\Gamma = ctte \tag{3}$$

donde $d\Gamma = dq_1 dq_2 \ldots dq_n \; dp_1 dp_2 \ldots dp_n$ es un elemento de volumen en el espacio de fases, las q_i son las coordenadas generalizadas y los p_i son los impulsos generalizados.

Para conocer los desplazamientos $x(t)$, se hace necesario integrar el sistema (2) para lo que se utilizan esquemas en diferencias ya sean explícitos o implícitos. Estos esquemas en diferencias para la integración suelen resultar simples y robustos; sin embargo suelen mostrar algunas características que hacen necesario un análisis de sus reales aptitudes para el estudio de determinados problemas. En lo que sigue, discutiremos ciertos esquemas numéricos de integración que tienen asociada una forma conservativa del tipo Liouville, hecho que los hace inherentemente conservativos y en consecuencia especialmente aptos para la integración de este tipo de problemas. Estos esquemas reciben el nombre de *simplécticos*.

ALGUNAS PROPIEDADES

Comencemos por comentar que el comportamiento de un sistema dinámico conservativo - o hamiltoniano, como lo denominaremos de aquí en más - admite una descripción, equivalente a la dada por la mecánica de Newton, en términos de una función escalar H, que para este tipo de sistemas coincide con la energía y que se denomina función de Hamilton o Hamiltoniano. Las ecuaciones dinámicas en términos de H toman la forma (Ref. [1]):

$$\begin{cases} \dot{q} = H_p \\ \dot{p} = -H_q \end{cases} \tag{4}$$

dende el subíndice denota derivación parcial respecto de la variable indicada. Si pensamos que el cambio sufrido por el sistema al pasar del estado (q,p) en $t = 0$ al estado (q',p') en $t = \tau$ es una transformación, la propiedad que exhiben los sistemas hamiltonianos es que esta transformación es canónica, siendo H un invariante del sistema. Análogamente, diremos que un esquema de integración es simpléctico si al realizar la integración en un paso de tiempo, el estado aproximado se transforma mediante una transformación canónica. Esta propiedad del esquema es importante ya que los sistemas hamiltonianos no son por lo general estructuralmente estables; esto es que un desplazamiento arbitrario en el espacio de fases no es necesariamente consistente con las (4).

Veamos ahora como verificar si un esquema es simpléctico o no: para ello definamos la matriz jacobiana de la tranformación en el espacio de fase, desde el estado inicial (i) al final (f) como:

$$J = \frac{\partial(q^f, p^f)}{\partial(q^i, p^i)} \tag{5}$$

(J será una matriz de $\dim(P) \times \dim(P)$, donde $\dim(P)$ es la dimensión del espacio de fases, que es el doble de la dimensión del espacio de configuración: $\dim(P) = 2 \times \dim(C)$). Introduzcamos ahora una matriz B, tal que:

$$B = \begin{bmatrix} \varnothing_{\dim(C)} & I_{\dim(C)} \\ -I_{\dim(C)} & \varnothing_{\dim(C)} \end{bmatrix} \tag{6}$$

donde $\varnothing_{\dim(C)}$ es la matriz nula de $\dim(C)\times\dim(C)$ y $I_{\dim(C)}$ es la matriz identidad de $\dim(C)\times\dim(C)$. Esta matriz B, representa la relación entre los corchetes de Poisson antes y después de la transformación. La transformación, y en consecuencia el esquema de integración que representa serán simplécticos si se verifica que:

$$J^T B J = B. \tag{7}$$

En las referencias [2] y [3], se pueden encontrar más propiedades de los integradores simplécticos.

UN EJEMPLO

A continuación, daremos un ejemplo académico para ilustrar los alcances de lo anteriormente establecido. Para ello tomaremos un oscilador como el propuesto para modelar la dinámica de una estructura elástica no lineal pero de un sólo grado de libertad, y compararemos dos esquemas del mismo orden $\left(O(\Delta t)^2\right)$, para integrar la ecuación de movimiento; el primero de ellos es un esquema en diferencias conocido como de punto medio explícito o *leap-frog* [4]:

$$\begin{aligned} v_{n+1/2} &= v_n + \Delta t\, f(x_n) \\ x_{n+1} &= x_n + \Delta t\, v_{n+1/2} \end{aligned} \tag{8}$$

mientras que el segundo es un esquema predictor-corrector de la forma:

$$\begin{aligned} x_p &= x_n + \Delta t\, v_n \\ v_{n+1} &= v_n + \frac{\Delta t}{2}\left[f(x_n) + f(x_p)\right] \\ x_{n+1} &= x_n + \frac{\Delta t}{2}\left[v_n + v_{n+1}\right] \end{aligned} \tag{9}$$

Para verificar si se trata de un esquema simpléctico, procedemos como sugerimos antes, es decir verificamos si se cumple la relación dada por (7). Calculemos J para el *leap-frog*:

$$J = \begin{bmatrix} 1 + \Delta t^2 f'(x_n) & \Delta t \\ \Delta t\, f'(x_n) & 1 \end{bmatrix} \tag{10}$$

el cual verifica la relación (7). Hagamos lo propio para el esquema predictor-corrector:

$$J = \begin{bmatrix} 1 + \frac{\Delta t^2}{4}[f'(x_n) + f'(x_n + v_n\,\Delta t)] & \Delta t\left[1 + \frac{\Delta t^2}{4} f'(x_n + v_n\,\Delta t)\right] \\ \frac{\Delta t}{2}[f'(x_n) + f'(x_n + v_n\,\Delta t)] & 1 + \frac{\Delta t^2}{2} f'(x_n + v_n\,\Delta t) \end{bmatrix} \tag{11}$$

Para este esquema, $J^T BJ = B\left[1+\frac{\Delta t^2}{4}[f'(x_n+v_n\ \Delta t)-f'(x_n)]\right]$. Las opciones para que el esquema sea simpléctico son, o bien hacer cero el paso de integración, lo que carece de sentido, o bien exigir que:

$$f'(x_n)=f'(x_n+v_n\ \Delta t) \tag{12}$$

que es lo mismo que exigir que el oscilador sea un oscilador armónico libre; para casos más generales, el integrador no es simpléctico.

COMENTARIOS FINALES

1. Podemos descubrir una cierta sensibilidad del método de integración respecto del tipo de problema para el que se desea emplear. Esta característica rara vez se pone de manifiesto en el análisis convencional de la estabilidad del esquema.
2. El presente trabajo se enmarca dentro del Subproyecto de Tecnologías de Control Activo, del grupo de Tecnología Aero Espacial, Dpto. de Ingeniería Aeronáutica, Facultad Regional Haedo, Universidad Tecnológica Nacional.

REFERENCIAS

[1] **Landau, L. y Lifshitz** *Mecánica*, Vol. 1 del Curso de Física Teórica, Ed. Reverté, 1965

[2] **Yoshida, H.** *Symplectic Integrators for Hamiltonian Systems: Basic Theory* en Chaos, Resonance and Collective Dynamical Phenomena in the Solar System, Ferraz Melo (Ed.), I.A.U, 1992

[3] **Yoshida, H.** *Conserved Quantities of Symplectic Integrators for Hamiltonian Systems*, Physica D., 1993

[4] **Dahlquist, G y Björk, A.** *Numerical Methods*, Prentice-Hall, 1969