Optimierung & Numerik — Vorlesung 20

12.5.3 Variationelle Integratoren sind symplektisch

Wir schreiben die diskrete Wirkung jetzt wieder als Funktion von Anfangs- und Endzustand

$$S_h(q_0, q_N) = \sum_{k=0}^{N-1} L_h(q_k, q_{k+1}).$$

Dabei ist $\{q_k\}$ die dazugehörige Lösung des variationellen Integrators.

Wir rechnen wieder die partiellen Ableitungen aus. Es bezeichne $\frac{\partial L_h}{\partial x}$, $\frac{\partial L_h}{\partial y}$ die partiellen Ableitungen von L_h nach dem ersten bzw. zweiten Argument:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_h}{\partial q_0} &= \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{\partial L_h}{\partial x} \cdot \frac{\partial q_k}{\partial q_0} + \frac{\partial L_h}{\partial y} \cdot \frac{\partial q_{k+1}}{\partial q_0} \right] \\
&= \frac{\partial L}{\partial x}(q_0, q_1) \cdot \underbrace{\frac{\partial q_0}{\partial q_0}}_{=1} \\
&\qquad + \sum_{k=1}^{N-1} \left[\underbrace{\frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{k-1}, q_k) \cdot \frac{\partial q_k}{\partial q_0} + \frac{\partial L_h}{\partial x}(q_k, q_{k+1}) \cdot \frac{\partial q_k}{\partial q_0}}_{=0, \text{ wg. diskreter Lagrange-Gleichung}} \right] \\
&\qquad\quad + \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{N-1}, q_N) \cdot \underbrace{\frac{\partial q_N}{\partial q_0}}_{=0} \\
&= \frac{\partial L}{\partial x}(q_0, q_1)
\end{aligned}$$

Ebenso

$$\frac{\partial S_h}{\partial q_N} = \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{N-1}, q_N)$$

Jetzt führen wir die **diskreten Impulse** durch eine **diskrete Legendre-Transformation** ein:

$$p_k := -\frac{\partial L_h}{\partial x}(q_k, q_{k+1}) = \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{k-1}, q_k) \tag{12.6}$$

Die Gleichheit ist gerade die diskrete Euler–Lagrange-Gleichung.

[Vergleiche: $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q, \dot{q})$]

Für $k = N$ erhalten wir

$$p_N = \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{N-1}, q_N).$$

Zusammen also:

$$\nabla S_h = \begin{pmatrix} \frac{\partial S_h}{\partial q_0} \\ \frac{\partial S_h}{\partial q_N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial L_h}{\partial x}(q_0, q_1) \\ \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{N-1}, q_N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p_0 \\ p_N \end{pmatrix}$$

Nach Satz **??** ist S_h also eine Erzeugendenfunktion für die symplektische Abbildung

$$(p_0, q_0) \mapsto (p_N, q_N)$$

12.5.4 Variationelle Integratoren als klassische Einschrittverfahren

Jetzt bauen wir uns ein klassisches Zeitschrittverfahren:

Angenommen die diskrete Legendre-Transformation (12.6) sei eine Bijektion zwischen p_k und q_{k+1}.

Einschrittverfahren:

$$\begin{array}{c} (p_k, q_k) \\ \Big\downarrow \text{inv. disk. Legendre-Transformation} \\ (q_k, q_{k+1}) \\ \Big\downarrow \text{diskrete Euler–Lagrange-Gleichung} \\ (q_{k+1}, q_{k+2}) \\ \Big\downarrow \text{diskrete Legendre-Transformation} \\ (p_{k+1}, q_{k+1}) \end{array}$$

Schritt 2 und 3 schreibt man als

$$p_{k+1} = \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_k, q_{k+1}).$$

Satz 12.9. Das diskrete Hamilton Prinzip erzeugt das Zeitschrittverfahren

$$(p_k, q_k) \mapsto (p_{k+1}, q_{k+1}), \qquad p_k = -\frac{\partial L_h}{\partial x}(q_k, q_{k+1}), \qquad p_{k+1} = \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_k, q_{k+1}).$$

Die erste Gleichung ist dabei als implizite Gleichung für q_{k+1} zu verstehen.

(i) Dieses Verfahren ist symplektisch.

(ii) Jedes symplektische Verfahren lässt sich auf diese Art darstellen.

Beweis.

(i) L_h ist Erzeugendenfunktion für die symplektische Abbildung $(p_k, q_k) \mapsto (p_{k+1}, q_{k+1})$

(ii) Jede symplektische Abbildung hat eine Erzeugendenfunktion. Wähle diese als diskrete Lagrange-Funktion. □

Beispiel. Das Verfahren von [Mac92]:

$$L_h(q_k, q_{k+1}) = \frac{\tau}{2} L(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\tau}{2} L(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}})$$

mit $v_{k+\frac{1}{2}} := \frac{1}{\tau}(q_{k+1} - q_k)$.

Man erhält das Verfahren:

$$\begin{aligned}
p_k &= -\frac{\partial L_h}{\partial x}(q_k, q_{k+1}) \\
&= -\frac{\tau}{2}\Big[\frac{\partial L}{\partial q}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) \cdot \Big(-\frac{1}{\tau}\Big) \\
&\quad + \frac{\partial L}{\partial q}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}) \cdot \underbrace{\frac{\partial q_{k+1}}{\partial q_n}}_{=0} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}) \cdot \Big(-\frac{1}{\tau}\Big)\Big] \\
&= -\frac{\tau}{2}\frac{\partial L}{\partial q}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}),
\end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned}
p_{k+1} &= \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_k, q_{k+1}) \\
&= \frac{\tau}{2}\frac{\partial L}{\partial q}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}).
\end{aligned}$$

Wir betrachten das mechanische System

$$L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}^T M \dot{q} - U(q) \quad \text{mit } M \text{ s.p.d}$$

Damit ist

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) = M v_{k+\frac{1}{2}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q_{k+1}, v_{k+\frac{1}{2}}) \\
&\frac{\partial L}{\partial q}(q_k, v_{k+\frac{1}{2}}) = -\nabla U(q_k) = F(q_k) \quad \text{(Kraftfeld an der Stelle } q_k\text{)}
\end{aligned}$$

Das Verfahren wird also zu:

$$\begin{aligned}
p_k &= -\frac{\tau}{2}F(q_k) + \frac{1}{2}M v_{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}M v_{k+\frac{1}{2}} \\
p_{k+1} &= \frac{\tau}{2}F(q_{k+1}) + \frac{1}{2}M v_{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}M v_{k+\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

Umschreiben:

$$\begin{aligned}
M v_{k+\frac{1}{2}} &= p_k + \frac{\tau}{2}F(q_k) && \text{(erste Gleichung)} \\
q_{k+1} &= q_k + \tau v_{k+\frac{1}{2}} && \text{(Definition von } v_{k+\frac{1}{2}}\text{)} \\
p_{k+1} &= M v_{k+\frac{1}{2}} + \frac{\tau}{2}F(q_{k+1}) && \text{(zweite Gleichung)}
\end{aligned}$$

Das ist gerade das **Störmer-Verlet-Verfahren**!

Diskrete Lagrange-Gleichung in diesem Fall:

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial L_h}{\partial y}(q_{k-1}, q_k) + \frac{\partial L_h}{\partial x}(q_k, q_{k+1}) \\ \Leftrightarrow M \underbrace{\frac{(q_{k+1} - 2q_k + q_{k-1})}{\tau^2}}_{\approx \ddot{q}_k} &= F(q_k) \end{aligned}$$

Kann also als direkte Diskretisierung der Bewegungsgleichung $M\ddot{q} = F(q)$ interpretiert werden!

Literaturverzeichnis

[Mac92] R. MacKay. Some aspects of the dynamics of hamiltonian systems. In D.S. Broomhead and Arie Iserles, editors, *The Dynamics of Numerics and the Numerics of Dynamics*, pages 137–193. Clarendon Press, Oxford, 1992.