Optimierung & Numerik — Vorlesung 12

12.1 Hamilton-Systeme

Extrem wichtige Klasse von Differentialgleichungen entstammen der klassischen Mechanik, Quantenmechanik und relativistische Mechanik. Dazu gehören auch spezielle numerische Verfahren — eine „schöne Mathematik“.

„Vereinigendes Prinzip“: Bringt ganz unterschiedliche Gleichungen auf eine gemeinsame Form.

Beispiel. Mathematisches Pendel – Fadenpendel

- Koordinate: Winkel α
- Masse m, Fadenlänge l, Erdbeschleunigung g

Bewegungsgleichungen: $\ddot{\alpha} + \frac{g}{l}\sin\alpha = 0$

Beispiel. Teilchen in einem Kraftfeld $F(x)$

$$m\ddot{x} = F(x) \qquad \text{(Newtons Gesetz)}$$

Beispiel. 1d-Wellengleichung — Longitudinale Auslenkung einer elastischen Schnur

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} && x \in [a,b], t \geq 0 \\ u(a,t) = u(b,t) &= 0 && \forall t \geq 0 \end{aligned}$$

12.1.1 Die Lagrange-Gleichungen

Wir betrachten ein mechanisches System mit d Freiheitsgraden $q = (q_1, \dots, q_d)$.

- Kinetische Energie: $T = T(q, \dot{q})$ (häufig: $T(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}^T M(q)\dot{q}$ mit $M(q)$ s.p.d.)
- Potentielle Energie: $U = U(q)$

Definition. Die Lagrange-Funktion eines mechanischen Systems ist $L = T - U$.

Das mechanische System löst die Lagrange-Gleichungen

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

Warum? Es gilt das Prinzip der stationären Wirkung.

Definition (Prinzip der stationären Wirkung / Hamilton'sches Prinzip). Sei $q : [t_0, t_1] \to \mathbb{R}^d$ eine Trajektorie eines mechanischen Systems. Für die in der Natur vorkommenden Trajektorien ist die *Wirkung*

$$W := \int_{t_0}^{t_1} L(q(t)\ \dot{q}(t))\ \mathrm{d}t$$

stationär.

Sei q eine Trajektorie, und δq eine Variation davon, die die Endpunkte fest lässt, also $\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0$. Stationarität von q heißt dann, dass für alle solche δq

$$\frac{d}{d\epsilon} S(q + \epsilon \delta q)|_{\epsilon=0} = 0.$$

gilt. Ausrechnen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\epsilon} \int_{t_0}^{t_1} L(q + \epsilon \delta q, \dot{q} + \epsilon \delta \dot{q})\ \mathrm{d}t|_{\epsilon=0} &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q}\, dt \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right)\ \mathrm{d}t \qquad \text{(partielle Integration)} \\ &= \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q\ \mathrm{d}t. \end{aligned}$$

Da dieser Ausdruck für alle hinreichend glatten Funktionen δq gleich Null sein muss, erhält man die Lagrange-Gleichung

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

Beispiel (Pendel).

- Kinetische Energie

$$T = \frac{1}{2} m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2} m l^2 \dot{\alpha}^2$$

- Potentielle Energie

$$U = mgy = -mgl \cos \alpha$$

- Lagrange-Funktion

$$L(\alpha, \dot{\alpha}) = \frac{1}{2} m l^2 \dot{\alpha}^2 + mgl \cos \alpha$$

- Lagrange-Gleichung

$$0 = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = \frac{d}{dt} (m l^2 \dot{\alpha}) + mgl \sin \alpha = m l^2 \ddot{\alpha} + mgl \sin \alpha.$$

Beispiel (Teilchen in einem Kraftfeld). Angenommen das Kraftfeld ist **konservativ**, d.h. es gibt ein $U : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$, so dass $F(x) = -\nabla U(x)$.

- Kinetische Energie

$$T(x, \dot{x}) = \frac{1}{2} m \langle \dot{x}, \dot{x} \rangle$$

- Potentielle Energie

$$U$$

- Lagrange-Gleichung

$$0 = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q} = \frac{d}{dt}(m\dot{x}) + \nabla U(x) = m\ddot{x} - F(x)$$

Beispiel (Eindimensionale Wellengleichung). Ein unendlich-dimensionales System wird nicht beschrieben durch d Freiheitsgrade $(q_1, \ldots, q_d)$, sondern durch die Funktion $u : [a, b] \to \mathbb{R}$. Diese beschreibt die transversale Auslenkung einer Saite.

- Kinetische Energie

  $$T(u, \dot{u}) = \frac{1}{2}\int_a^b m\dot{u}(x)^2 dx$$

  Dabei ist m die Massendichte.

- Potentielle Energie

  $$U(u) = \int_a^b S\Big[\sqrt{1 + u'(x)^2} - 1\Big]dx \approx \int_a^b S\frac{u'(x)^2}{2}dx$$

  Dabei ist S die Zugsteifigkeit.

- Lagrange-Funktion

  $$L(u, \dot{u}) = T(u, \dot{u}) - U(u)$$

- Lagrange-Gleichung

  $$\frac{\partial L}{\partial u} = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial L}{\partial u'} + \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{u}}$$

  Einsetzen:

  $$0 = \frac{\partial}{\partial x}\Big(- Su'(x)\Big) + \frac{\partial}{\partial t}m\dot{u}$$

  Umstellen:

  $$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{S}{m}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

  Das ist die eindimensionale Wellengleichung.

Literaturverzeichnis

[HLW16] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. *Geometric Numerical Integration—Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.* Springer, zweite auflage edition, 2016.