Optimierung & Numerik — Vorlesung 19

12.5.1 Idee der variationellen Integratoren

Wir ersetzen das Integral im Hamiltonschen Prinzip durch eine diskrete Approximation:

Wir führen ein Zeitgitter $t_0 < t_1 < \ldots < t_N = T$ und die approximative Wirkung

$$L_h(q_k, q_{k+1}) \approx \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q(t), \dot{q}(t))\, dt$$

ein (z.B. durch eine Quadraturformel).

Hier könnte man denken dass L_h ein schlechtes Symbol ist, weil es sich ja schließlich um eine Wirkung handelt. Andererseits fungiert L_h später bei der Definition der diskreten Impulse wie eine Lagrange-Funktion (siehe (**??**)).

q ist hier die Lösung der Lagrange-Gleichung auf $[t_k, t_{k+1}]$ mit gegebenen Start- und Endwerten q_k, q_{k+1}.

Definiere das diskrete Wirkungsfunktional

$$S_h\Big(\{q_k\}_{k=0}^N\Big) := \sum_{k=0}^{N-1} L_h(q_k, q_{k+1})$$

Definition (Diskretes Hamilton-Prinzip). Finde $\{q_k\}_{k=0}^N$ mit gegebenen q_0, q_N, so dass S_h stationär wird.

Wie kann man L_h wählen?

Beispiel ([Mac92, 1992]). Approximiere q auf $[t_k, t_{k+1}]$ als linear Interpolierende von q_k und q_{k+1}.

Approximiere das Integral durch die Trapezregel

$$L_h(q_k, q_{k+1}) = \tau \cdot \frac{1}{2}\Big[L\Big(q_k, \frac{q_{k+1} - q_k}{\tau}\Big) + L\Big(q_{k+1}, \frac{q_{k+1} - q_k}{\tau}\Big)\Big].$$

Beispiel ([WM97, 1997]). Nimm statt der Trapezregel die Mittelpunktsregel

$$L_h(q_k, q_{k+1}) = \tau\Big[L\Big(\frac{q_{k+1} + q_k}{2}, \frac{q_{k+1} - q_k}{\tau}\Big)\Big].$$

Wie kommen wir an stationäre Punkte von S_h?

Wir können die Ableitung ausrechnen und gleich Null setzen — partielle Ableitung für $k = 1, \dots, N-1$:

$$\frac{\partial S_h}{\partial q_k} = \frac{\partial}{\partial q_k} \sum_{i=0}^{N-1} L_h(q_i, q_{i+1}) = \frac{\partial}{\partial q_k} L_h(q_{k-1}, q_k) + \frac{\partial}{\partial q_k} L_h(q_k, q_{k+1})$$

Dieser Ausdruck = 0 sind die **diskreten Euler–Lagrange-Gleichungen** – ein System von algebraischen Gleichungen (mit Bandstruktur).

Fragen:

- Wann kriege ich mit diesem Ansatz symplektische Integratoren?
- Kann ich das Verfahren so umschreiben dass ich wieder einen Zeitschritt nach dem anderen berechnen kann?

12.5.2 Erzeugendenfunktionen

Wir brauchen ein weiteres Kriterium für Symplektizität:

- Betrachte ein gegebenes Hamiltonsches System H auf einem festen Zeitintervall $[t_0, t_1]$
- Seien $p_0 \in \mathbb{R}^d$ und $q_0 \in \mathbb{R}^d$ die Startwerte zur Zeit t_0
- Bezeichne die Werte zur Zeit t_1 mit $p_1 \in \mathbb{R}^d$ und $q_1 \in \mathbb{R}^d$
- Es gibt eine Abbildung $\Phi^{t_0,t_1}(p_0, q_0) = (p_1, q_1)$.

Wie wir wissen, ist diese symplektisch. [Achtung: der folgende Satz enthält überdurchschnittlich viel didaktische Reduktion]

Satz 12.9 ([HLW16, Satz VI.5.1]). Eine Abbildung $\varphi\colon (p_0, q_0) \mapsto (p_1, q_1)$ ist genau dann symplektisch, wenn lokal eine Funktion

$$S\colon (q_0, q_1) \mapsto S(q_0, q_1) \in \mathbb{R}$$

existiert, so dass

$$\nabla S0 \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial q_0} \\ \frac{\partial S}{\partial q_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p_0 \\ p_1 \end{pmatrix} \tag{12.5}$$

Wenn man eine symplektische Abbildung $(p_0, q_0) \mapsto (p_1, q_1)$ hat, dann kann sie durch (12.5) aus der Funktion S rekonstruiert werden.

Aber der obige Satz ist vom Typ „Äquivalenz“. Es gilt also auch die Umkehrung: Jede hinreichen glatte (und in einem gewissen Sinne nicht degenerierte) Funktion S **erzeugt** via (12.5) eine symplektische Abbildung $(p_0, q_0) \mapsto (p_1, q_1)$.

Man kann also auf systematische Art symplektische Abbildungen erzeugen. Die Funktion S heißt deshalb Erzeugendenfunktion.

Wir betrachten jetzt das Wirkungsintegral S als Funktion der Start- und Endposition

q_k und q_{k+1} sind zwei Zustände, dazwischen existiert genau ein Pfad q, der die Lagrange-Gleichungen löst.

$$S(q_0, q_1) = \int_{t_0}^{t_1} L(q(t), \dot{q}(t))\, dt$$

Dabei ist q die zu q_0, q_1 gehörige Lösung der Lagrange-Gleichung.

Große Überraschung: Diese Funktion S ist gerade die Erzeugendenfunktion einer symplektischen Abbildung!

Berechne die partielle Ableitung:

$$\frac{\partial S}{\partial q_0} = \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial q_0} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial \dot{q}}{\partial q_0} \right) dt$$

Partielle Integration des zweiten Terms in der Klammer liefert

$$\begin{aligned}
&= \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\partial q}{\partial q_0} \right|_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} \underbrace{\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)}_{=0} \frac{\partial q}{\partial q_0} \, dt \\
&= \frac{\partial L(q_1, \dot{q}_1)}{\partial \dot{q}} \cdot \underbrace{\frac{\partial q_1}{\partial q_0}}_{=0} - \frac{\partial L(q_0, \dot{q}_0)}{\partial \dot{q}} \cdot \underbrace{\frac{\partial q_0}{\partial q_0}}_{=1} \\
&= -\frac{\partial L(q_0, \dot{q}_0)}{\partial \dot{q}} \\
&= -p_0 && \text{(Def. des Impulses)}
\end{aligned}$$

Ebenso berechnet man

$$\frac{\partial S}{\partial q_1} = p_1.$$

Wir erhalten also

$$\nabla S = \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial q_0} \\ \frac{\partial S}{\partial q_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p_0 \\ p_1 \end{pmatrix} \tag{12.6}$$

Dies ist gerade die Formel (12.5) für Erzeugendenfunktionen von symplektischen Abbildungen.

Daraus folgt dass die entsprechende Abbildung $(p_0, q_0) \mapsto (p_1, q_1)$ symplektisch ist.

Literaturverzeichnis

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

[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.

[WM97] J.M. Wendlandt and J.E. Marsden. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. *Physica D*, 106:223–246, 1997.