

# Optimierung & Numerik — Vorlesung 19

## 12.5.1 Idee der variationellen Integratoren . . . . . 1

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

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

Ebenso berechnet man

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

Wir erhalten also

$$\nabla S = \begin{pmatrix} \frac{\partial S}{\partial q_0} \\ \frac{\partial S}{\partial q_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p_0 \\ p_1 \end{pmatrix} \quad (12.5)$$

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

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

## 12.5.1 Idee der variationellen Integratoren

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

Wir führen ein Zeitgitter  $t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$  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

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

**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

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

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

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

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?

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