

Optimale Steuerung der relativistischen  
Maxwell-Newton-Lorentz Gleichungen

**Dissertation**

zur Erlangung des Grades  
eines Doktors der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)

Der Fakultät für Mathematik  
der Technischen Universität Dortmund  
vorgelegt von

Dipl.-Math. **Oliver Thoma**

aus Alzenau

Dortmund 2015

Die vorliegende Arbeit wurde von der Fakultät für Mathematik der Technischen Universität Dortmund als Dissertation zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften genehmigt.

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. Franz Kalhoff  
Erster Gutachter: Prof. Dr. Christian Meyer  
Zweiter Gutachter: Prof. Dr. Irwin Yousept  
Zusätzlicher Prüfer: Prof. Dr. Christoph Buchheim

Tag der Einreichung: 08.06.2015  
Tag der Disputation: 02.09.2015  
Veröffentlichte Version vom 18.11.2015

## INHALTSVERZEICHNIS

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>6</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>7</b>
<b>Danksagung</b>	<b>8</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>9</b>
1.1 Motivation und Überblick über die Arbeit . . . . .	9
1.2 Ziel und mögliche Anwendungen . . . . .	10
1.3 Einordnung der Arbeit . . . . .	12
<b>2 Notationen und Definitionen</b>	<b>13</b>
2.1 Funktionenräume . . . . .	13
2.2 Grundlegende Definitionen und Sätze . . . . .	16
<b>3 Das physikalische Modell</b>	<b>19</b>
3.1 Annahmen . . . . .	19
3.2 Die inhomogenen Maxwell Gleichungen - Modellierung der elektromagnetischen Felder . . . . .	20
3.2.1 Die Maxwell Gleichungen aus physikalischer Sicht . . . . .	20
3.2.2 Die Maxwell Gleichungen, Ladungserhaltung und Überbestimmtheit . . . . .	21
3.2.3 Die Maxwell Gleichungen und Übergangsbedingungen . . . . .	25
3.2.4 Die Maxwell Gleichungen und Punktladungen . . . . .	26
3.3 Die relativistische Newton-Lorentz Bewegungsgleichungen - Modellierung der Teilchendynamik . . . . .	28
3.4 Das gekoppelte Maxwell Newton Lorentz System . . . . .	29
3.4.1 Formulierung des gekoppelten Maxwell Newton Lorentz Systems . . . . .	29
3.4.2 Repräsentation mittels Skalar- und Vektorpotentialen . . . . .	30
3.5 Schwächen des gekoppelten Modells . . . . .	32
<b>4 Analytische Behandlung der relativistischen Maxwell Newton Lorentz Gleichungen und deren optimale Steuerung</b>	<b>33</b>
4.1 Aufstellen eines modifizierten Zustandssystems . . . . .	33
4.1.1 Das semi-relativistische Abraham Modell . . . . .	33
4.1.2 Die externen EM-Felder und die homogene Maxwell Gleichung . . . . .	35
4.1.3 Formulierung des äußeren Magnetfeldes als Vektorfeld eines Skalarpotentials . . . . .	35

4.1.4	Schranken an die Position des Partikels . . . . .	36
4.2	Formulierung des Optimalsteuerproblems . . . . .	37
4.2.1	Das Optimalsteuerproblem . . . . .	37
4.2.2	Benötigte Funktionenräume und Spursätze . . . . .	38
4.2.3	Annahmen an das Gebiet und die Daten . . . . .	40
4.2.4	Einordnung des Optimalsteuerproblems . . . . .	41
4.3	Existenz von Lösungen der Zustandsgleichungen . . . . .	42
4.3.1	Diskussion der Maxwell Gleichungen . . . . .	42
4.3.2	Diskussion der Newton-Lorentz-Gleichungen . . . . .	49
4.3.3	Diskussion der Poisson-Gleichung . . . . .	49
4.4	Diskussion des Zustandssystems . . . . .	51
4.4.1	Aufstellung des Optimalsteuerproblems . . . . .	52
4.4.2	Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des reduzierten Systems . . . . .	53
4.5	Existenz einer optimalen Lösung . . . . .	63
4.6	Optimalitätsbedingungen erster Ordnung . . . . .	66
4.6.1	Das linearisierte System: Fréchet Differenzierbarkeit der reduzierten Form . . . . .	67
4.6.2	Das linearisierte System: Existenz und Eindeutigkeit . . . . .	71
4.6.3	Constraint Qualifications und Robinson's Regularitätsbedingung . . . . .	73
4.6.4	Notwendige Optimalitätsbedingungen . . . . .	75
4.6.5	KKT-Bedingungen . . . . .	91
4.7	Formulierung der adjungierten Maxwell Gleichungen . . . . .	93
4.8	Divergenzfreie Erweiterung des externen Magnetfelds . . . . .	97
<b>5</b>	<b>Numerische Lösung des Optimalsteuerproblems</b>	<b>101</b>
5.1	Diskretisierung der Zustandsgleichungen . . . . .	101
5.1.1	Diskretisierung der Maxwell Gleichungen . . . . .	102
5.1.2	Diskretisierung der Poisson Gleichung . . . . .	102
5.1.3	Diskretisierung der Newton-Lorentz-Gleichungen . . . . .	102
5.2	Praktische Aspekte bei der numerischen Lösung der Zustandsgleichungen . . . . .	103
5.2.1	Umsetzung bei den Maxwell-Gleichungen . . . . .	104
5.2.2	Umsetzung bei der Poisson-Gleichung . . . . .	106
5.2.3	Umsetzung bei den Newton-Lorentz-Gleichungen . . . . .	109
5.3	Beschreibung des Optimierungsalgorithmus . . . . .	117

5.3.1	Behandlung der Zustandsbeschränkungen durch eine Barriere-Methode . . . . .	118
5.3.2	Behandlung des Optimalsteuerproblems . . . . .	118
5.3.3	Die Formulierung des diskreten Optimierungsproblems . . . . .	120
5.3.4	Das globalisierte BFGS-Innere-Punkte Verfahren . . . . .	122
5.4	Automatisches (Algorithmisches) Differenzieren . . . . .	124
5.4.1	Einführung . . . . .	124
5.4.2	Operatorenüberladen . . . . .	125
5.4.3	Quelltransformation . . . . .	125
5.4.4	Die verschiedenen AD Modi: Vorwärts - vs. Rückwärts Modus	126
5.4.5	Verwendetes AD-Tool ADiMat . . . . .	130
5.4.6	Umsetzung in ADiMat . . . . .	130
5.4.7	AD für das Optimalsteuerproblem . . . . .	135
5.5	Initialisierung der numerischen Beispiele . . . . .	139
5.6	Numerische Resultate . . . . .	140
5.6.1	Testbeispiel 1: Vorgegebener Endzustand . . . . .	141
5.6.2	Testbeispiel 2: Vorgegebene Trajektorie und Endzustand . . . . .	144
5.6.3	Testbeispiel 3: Vorgegebene erreichbare Trajektorie . . . . .	148
5.6.4	Ergebnisse für zwei Partikel . . . . .	150
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>153</b>
6.1	Zusammenfassung der wichtigsten Resultate . . . . .	153
6.2	Ausblick . . . . .	154
<b>A</b>	<b>Anmerkungen zur Halbgruppentheorie</b>	<b>155</b>
<b>B</b>	<b>Anmerkungen zu Funktionen von beschränkter Variation</b>	<b>159</b>
<b>C</b>	<b>Anmerkungen zum Riemann Stieltjes Integral</b>	<b>161</b>
	<b>Literatur</b>	<b>162</b>

## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

1.1	Quadrupol Magnet mit Röhre. . . . .	10
1.2	Magnetfeldlinien eines Quadrupols. . . . .	10
1.3	Partikeltrajektorien und externe Magnete. . . . .	11
1.4	Partikeltrajektorien im Magnetfeld. . . . .	11
1.5	Partikeltrajektorien zum Endzeitpunkt. . . . .	11
3.1	Übergangsbedingung: $S$ , Gebiet $\Omega'$ und Teilgebiete . . . . .	25
5.1	Referenzelement und lokale Nummerierung. . . . .	107
5.2	Uniforme Diskretisierung mit Hexaedern. . . . .	107
5.3	Leapfrog Zeitschrittverfahren . . . . .	109
5.4	In einer Ebene senkrecht zu $\mathbf{B}^i \parallel \mathbf{s}^i$ . . . . .	112
5.5	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 0. . . . .	141
5.6	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 1. . . . .	141
5.7	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 5. . . . .	142
5.8	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 20. . . . .	142
5.9	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 40. . . . .	142
5.10	Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 47. . . . .	142
5.11	Testbeispiel 1: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	143
5.12	Testbeispiel 1: Rückansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	143
5.13	Testbeispiel 2: Initialisierung der vorgegebenen Trajektorie. . . . .	144
5.14	Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 0. . . . .	144
5.15	Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 6. . . . .	146
5.16	Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 31. . . . .	146
5.17	Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 51. . . . .	146
5.18	Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 81. . . . .	146
5.19	Testbeispiel 2: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	147
5.20	Testbeispiel 2: Rückansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	147
5.21	Anfangskonfiguration: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	148
5.22	Anfangskonfiguration: Rückansicht auf das externe Magnetfeld. . . . .	148
5.23	Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 0. . . . .	148
5.24	Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 1. . . . .	148
5.25	Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 21. . . . .	149
5.26	Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 51. . . . .	149
5.27	Zwei Partikel: Vorgegebene Endposition und Iteration 0. . . . .	151
5.28	Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 10. . . . .	151

5.29 Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 40. . . . .	151
5.30 Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 50. . . . .	151

#### TABELLENVERZEICHNIS

3.1 Überblick über die Konstanten . . . . .	28
4.1 Überblick über verwendete Variablen . . . . .	53
5.1 Überblick über verwendete Größen und deren Bedeutung . . . . .	122
5.2 Physikalische Konstanten. . . . .	140
5.3 Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 1. . . .	143
5.4 Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 2. . . .	145
5.5 Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 3. . . .	149

## Danksagung

Der größte Dank gebührt meinem Betreuer, Prof. Dr. Christian Meyer, der mich über die letzten Jahre begleitet hat, unterstützt hat und der zur jeder Zeit ansprechbar war. Vielen Dank.

Des Weiteren bedanke ich mich bei Dr. Sascha Schnepf, der uns bei der Entwicklung, dem Verständnis des physikalischen Modells und der Implementierung entscheidend geholfen hat. Darüber hinaus möchte ich mich bei Prof. Dr. Thomas Slawig bedanken, der uns bei der richtigen Anwendung des Automatischen Differenzierens beratend zur Seite gestanden hat.

Abschließend möchte ich noch von ganzen Herzen einen großen Dank an Dr. Simeon Steinig, Dr. Lucia Panizzi, Dr. Laura Klein und Dr. Long Trieu aussprechen. Meine fünf Jahre andauernde Promotionszeit durfte ich im ersten Jahr an der *Graduate School CE* der TU Darmstadt beginnen und diese danach an der TU Dortmund fortsetzen. Deswegen zuallerletzt ein Dank an die Menschen, die mich in den vergangenen Jahren an den jeweiligen Instituten begleitet haben.

## 1 Einleitung

In zahlreichen und häufig sehr unterschiedlichen Wissenschaftsgebieten begegnen uns Problemstellungen, die mit Hilfe der *Optimalen Steuerung* gelöst werden können. Optimalsteuerprobleme finden sich so z.B. in Bereichen wie der Robotik, Strömungsmechanik und Aeronautik. Oftmals zur Modellierung von Bewegungen dienen gewöhnliche Differentialgleichungen, deren optimale Steuerung ein großes Forschungsgebiet darstellen. Häufig werden in den physikalischen Modellen partielle Differentialgleichungen benötigt, sodass sich Optimalsteuerprobleme ergeben, die von komplex gekoppelter sowohl partieller als auch gewöhnlicher Differentialgleichungsnatur sind. Diese gekoppelten Systeme sind vonnöten, um Phänomene hinreichend genau beschreiben zu können. Als natürliche Bedingungen ergeben sich zusätzlich in vielen Fällen Zustands- und (oder) Steuerbeschränkungen im Rahmen dieser Optimierungsprobleme. Den Optimierungsproblemen liegt die Existenz einer Steuerung zugrunde, die auf einen Zustand wirkt. Dieser Zustand ist durch oben beschriebene Differentialgleichungen gegeben.

In der vorliegenden Dissertation beschäftigen wir uns mit einem Phänomen aus der klassischen Elektrodynamik. Die von uns in der Arbeit vorgestellten Gleichungen modellieren die Bewegung von elektrischen Ladungen in elektromagnetischen, zeitlich veränderlichen Feldern. Diese beschriebenen Variablen werden unser Zustände darstellen. Als Steuerung für die Zustände dient ein Magnetfeld.

Die Dissertation besteht im Wesentlichen aus zwei Hauptbestandteilen:

1. Im ersten Teil der Arbeit beschäftigen wir uns, nachdem das physikalische Modell vorgestellt wurde, mit der analytischen Untersuchung des sich ergebenden Zustandssystems. Auf die Existenz von Lösungen dieses System wird detailliert eingegangen. Die exakte Formulierung des Optimalsteuerproblems wird präsentiert und Optimalitätsbedingungen erster Ordnung in Form der KKT-Bedingungen werden diskutiert.
2. Im zweiten Teil der Ausarbeitung führen wir die numerische Umsetzung des Optimalsteuerproblems aus. Hierbei wird im Detail auf die einzelnen Aspekte der Diskretisierung des Problems eingegangen. Das Zeitdiskretisierungsschema wird ausführlich untersucht. Darüber hinaus stellen wir den von uns implementierten globalen BFGS-Innere-Punkte Algorithmus vor.

### 1.1. Motivation und Überblick über die Arbeit.

In der vorliegenden Arbeit wird die optimale Steuerung der relativistischen Maxwell Newton Lorentz Gleichungen studiert. Die relativistischen Maxwell-Newton-Lorentz Gleichungen bestehen aus dem gekoppelten System eines hyperbolischen PDE Systems, den Maxwell Gleichungen, und einem nichtlinearen ODE Systems, den relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen. Die betrachteten Gleichungen modellieren die Bewegung eines elektrisch geladenen Partikels unter dem Einfluss elektromagnetischer Felder und sind somit für die Simulation von Teilchenbeschleunigern notwendig. Das zugrundeliegende Modell und die physikalischen Grundgleichungen werden in Kapitel 3 behandelt.

Als Steuerung soll ein externes, stationäres Magnetfeld dienen. Dieses Magnetfeld unterliegt den homogenen Maxwell Gleichungen, sodass sich physikalisch Bedingungen an die Steuerung ergeben. Durch Einführung eines skalaren, magnetischen Potentials lassen sich diese Steuerbeschränkungen erfüllen. Die Randdaten des skalaren, magnetischen Potentials werden die neuen Steuervariablen, und das Zustandssystem wird damit durch eine Poisson Gleichung erweitert. Des Weiteren

werden die Nebenbedingungen des Optimalsteuerproblems durch punktweise Zustandsbeschränkungen an die Position der Partikel ergänzt, um diese im Inneren des Teilchenbeschleunigers zu halten. Die Untersuchung dieses sich so ergebenden Zustandssystems findet in Kapitel 4 statt. Darunter verstehen wir die analytische Untersuchung auf Existenz von Lösungen der betreffenden Gleichungen, das Aufstellen des exakten Optimalsteuerproblems, den Beweis der Existenz von optimalen Lösungen und das Herleiten des dazugehörigen Optimalitätssystems, den KKT-Bedingungen.

In Kapitel 5 blicken wir auf die numerische Umsetzung und Lösung des beschriebenen Optimalsteuerproblems. Von der Diskretisierung des Optimierungsproblems bis zu der Implementierung eines globalisierten Optimierungsalgorithmus werden die wichtigsten Aspekte in diesem Kapitel behandelt. Der Optimierungsalgorithmus, der implementiert wurde, ist ein globalisiertes BFGS-Innere-Punkte Verfahren. Bei der Lösung des Optimalsteuerproblems hilft uns zur Bestimmung von Ableitungen das Konzept des Automatischen Differenzierens weiter, welches im Rahmen der Arbeit genauer betrachtet werden wird. Abschließend werden numerische Resultate präsentiert und in Kapitel 6 wird sowohl eine Zusammenfassung als auch ein kurzer Ausblick gegeben.

## 1.2. Ziel und mögliche Anwendungen.

Um das Ziel der Arbeit

- Die Steuerung eines Partikelstrahls auf eine vorgegebenen Bahntrajektorie mit Hilfe der optimalen Steuerung eines externen Magnetfelds -

deutlich hervorzuheben, wollen wir potentielle Anwendungsgebiete skizzieren. Eine Vielzahl an möglichen Anwendungen ist vorstellbar, so findet man Partikelbeschleuniger in unterschiedlichen komplexen Ausführungen:

- In der Teilchenphysik: speziell wissenschaftliche Partikelbeschleuniger
- In medizinischen Apparaturen: bei der Strahlentherapie im Hinblick auf die Fokussierung von Protonenstrahlen etc.
- In elektrischen Geräten: in Haushaltsgeräten wie z.B. in Mikrowellen.

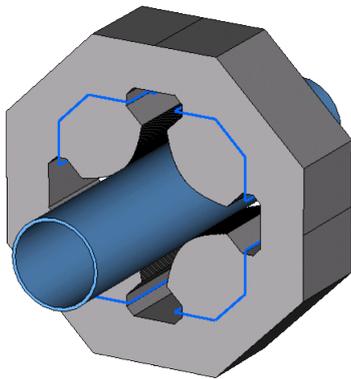


ABBILDUNG 1.1. Quadrupol Magnet mit Röhre.

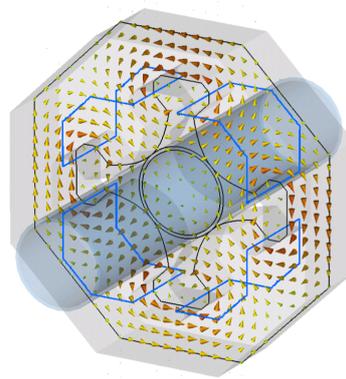


ABBILDUNG 1.2. Magnetfeldlinien eines Quadrupols.

Darüber hinaus sind zu einer besseren Einordnung der Gestalt von möglichen externen Magneten und sich darin befindlichen Partikelröhren die Abbildungen 1.1 und

1.2 (bereitgestellt von Dr. Sascha Schnepf, Institut für Geophysik, ETH Zürich) gegeben. In diesen Abbildungen ist ein Quadrupol Magnet mit seinen Feldlinien und eine darin verlaufende Röhre, in der die Partikelbahnen verlaufen, dargestellt.

Ein möglicher Verlauf der Trajektorien von Partikeln im Feld eines Magnets (Q1-Q3) ist in den Abbildungen 1.3-1.5 (bereitgestellt von Dr. Sascha Schnepf, Institut für Geophysik, ETH Zürich) zusehen. Hierbei steht jede einzelne Linie für eine Partikeltrajektorie, wobei die x- und y-Komponente der Position der Partikel der z-Koordinate gegenübergestellt wird.

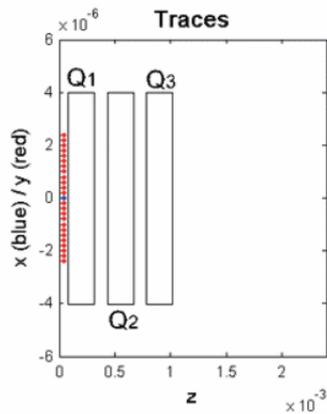


ABBILDUNG 1.3. Partikeltrajektorien und externe Magnete.

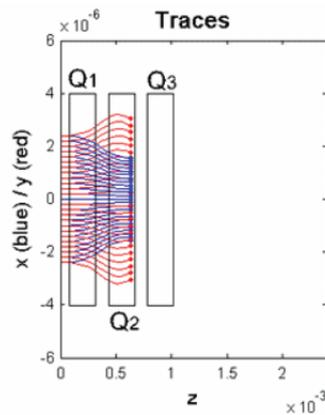


ABBILDUNG 1.4. Partikeltrajektorien im Magnetfeld.

Durch die Wechselwirkung der Magnetfelder mit dem Bündel von Partikeln und die daraus resultierende Lorentzkraft erreicht man eine Ablenkung des Strahls. Die Änderung der Magnetfeldstärke und Polung steuert somit die Partikel. Der Partikelstrahl in Abbildung 1.3-1.5 wird aufgrund der Einstellung der Magnete auf einen Raumpunkt gelenkt/fokussiert.

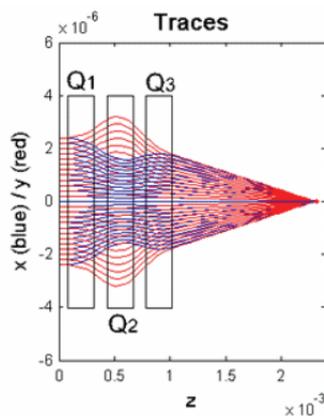


ABBILDUNG 1.5. Partikeltrajektorien zum Endzeitpunkt.

### 1.3. Einordnung der Arbeit.

Das zugrundeliegende physikalische Modell findet seine Anwendung in der Simulation von Teilchenbeschleunigern, wie in der Literatur [1, 37, 42, 66] beschrieben wird. Das anliegende erwähnte externe Magnetfeld, das die Rolle der Steuerung übernehmen wird, wird in der Praxis durch extern an den Beschleunigerröhren angebrachte Magnete (z.B. von der Bauform eines Dipol oder Quadrupol Magnets) erzeugt [90, 110].

Die analytische Diskussion der Maxwell Gleichungen für offene Mengen im dreidimensionalen Raum findet sich in dem Buch [27, Kapitel XVII. B. 4] von Dautray und Lions wieder und die Existenz von einer Lösung in  $\mathbb{R}^3$  im Artikel [63] von Herbert Spohn. Die zeitharmonischen Maxwell Gleichungen werden in [62] aufgearbeitet. Magneto-quasistatische Approximationen der Maxwell Gleichungen (*eddy current* Approximationen) werden in [89] behandelt. Außerdem ist in der Literatur die optimale Steuerung der Maxwell Gleichungen und in diesem Zusammenhang deren Auftreten in gekoppelten System in vielen Arbeiten der vergangenen Jahre Forschungsgegenstand. Es seien hier die Arbeiten von Tröltzsch et al. [31, 78, 79, 80, 105] und Yousept [112, 113, 114, 116, 115] genannt. Die meisten der oben genannten Arbeiten behandeln die stationären oder zeitharmonischen Maxwell Gleichungen. Des Weiteren wird in [43] die optimale Steuerung eines magneto-hydrodynamischen Systems behandelt, in dem die Maxwell Gleichungen stationär eingehen. In [80] werden die evolutionären Maxwell Gleichungen in degenerierter, parabolischer Form studiert. In der vorliegenden Dissertation werden wir im Gegensatz dazu das hyperbolische System erster Ordnung betrachten. Eine Diskussion der zeitabhängigen Maxwell Gleichungen im Hinblick auf die Optimalesteuerung findet sich außerdem in [16], in dem die Stromdichte und deren zeitabhängige Amplitude optimiert werden.

Darüber hinaus koppeln wir die hyperbolische PDE mit den relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen. Die Analysis dieses gekoppelten Systems lässt sich in [11, 35, 60, 100] und in den darin enthaltenen Referenzen nachlesen. Wir verweisen für die numerische Lösung auf [37, 42, 66]. Eine Untersuchung von diesem System im Kontext der optimalen Steuerung hat bislang, nach unserem Wissen, nicht stattgefunden. Sowohl vom analytischen als auch numerischen Standpunkt aus gibt es keine vergleichbare Arbeit.

Das betrachtete Optimalsteuerproblem beinhaltet Steuerbeschränkungen, wie in Kapitel 1.1 erwähnt, an das externe stationäre Magnetfeld, die mittels Einführung eines skalaren magnetischen Potentials zu einem Dirichlet Randsteuerproblem führen. Die optimale Steuerung solcher Problem war und ist Gegenstand der Forschung, so z.B. zu finden in [22, 30, 64, 69, 83]. Aufgrund der Wahl von  $L^2(\Gamma)$  als Kontrollraum tritt die vorkommende Poisson Gleichung in ihrer sehr schwachen Formulierung auf. Diese ist z.B. in [69] Forschungsgegenstand. Das Vorhandensein der Zustandsbeschränkungen in den Nebenbedingungen führt dazu, dass die dazugehörigen Lagrange Multiplikatoren nur sehr schwache Regularität aufweisen, im Allgemeinen nur Maße sind, was in [20, 21] für PDEs und in [52] für ODEs und den darin enthaltenen Referenzen aufgezeigt wird. Die numerische Umsetzung solcher Zustandsbeschränkungen findet oft, wie in [55, 71, 94] beschrieben, mittels Regularisierungen und Relaxationsmethoden statt. In unserer Ausarbeitung wird ein Innere-Punkte-Verfahren aufgesetzt, um die Partikelpositionsbeschränkungen zu realisieren.

## 2 Notationen und Definitionen

Wir beginnen mit der Einführung und Definition verschiedener Funktionenräume, die im Laufe der Arbeit häufig verwendet werden.

### 2.1. Funktionenräume.

**Definition 2.1.1** (Abstrakte Funktionen).

Sei  $Y$  mit  $\|\cdot\|_Y$  ein reeller Banachraum. Wir nennen die Abbildung  $y : [a, b] \rightarrow Y$  mit dem Intervall  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ , die in  $Y$  abbildet, eine abstrakte Funktion oder vektorwertige Funktion. Die abstrakte Funktion  $y$  ist stetig in  $t \in [a, b]$ , wenn aus  $\tau \rightarrow t, \tau \in [a, b]$  folgt

$$\lim_{\tau \rightarrow t} \|y(\tau) - y(t)\|_Y = 0.$$

Man bezeichnet mit  $C([a, b]; Y)$  den Raum aller stetigen, abstrakten Funktionen  $y : [a, b] \rightarrow Y$  mit der Norm

$$\|y\|_{C([a, b]; Y)} = \max_{t \in [a, b]} \|y(t)\|_Y$$

ausgestattet. Des Weiteren definieren wir uns

$$C_{\{0\}}([a, b]; Y) := \{y \in C([a, b]; Y) : y(a) \equiv 0\},$$

und den Raum  $C_{\{0\}}^1([a, b]; Y)$  analog.

**Definition 2.1.2** ( $L^p(\Omega; \mathbb{R}^n)$ -Räume).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  offen. Wir bezeichnen mit  $L^p(\Omega; \mathbb{R}^n)$  das  $n$ -dimensionale Analogon des Raumes aller  $p$  integrierbaren Funktionen  $L^p(\Omega)$ , d.h.  $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$  und

$$\int_{\Omega} |y(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} < \infty$$

mit zugehöriger Norm  $\|y\|_{L^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |y(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x}\right)^{\frac{1}{p}}$  für  $1 \leq p < \infty$ . Mit der Notation  $L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^n)$  benennen wir den Raum aller essentiell beschränkten und messbaren Funktionen  $\mathbf{y} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$  mit der Norm  $\|\mathbf{y}\|_{L^\infty(\Omega; \mathbb{R}^n)} = \text{ess sup}_{\mathbf{x} \in \Omega} |\mathbf{y}(\mathbf{x})|_{\mathbb{R}^n}$ . Des Weiteren definieren wir das innere Produkt in  $L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$  zweier Vektorfunktionen  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^\top \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$  und  $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_n)^\top \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$  als

$$(\mathbf{y}, \mathbf{z})_X := \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n y_i z_i d\mathbf{x}$$

wobei wir  $X := L^2(\Omega; \mathbb{R}^n)$  setzen.

**Definition 2.1.3** (Multiindex).

Wir bezeichnen den Vektor der nichtnegativen ganzen Zahlen

$$\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N) \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^N$$

als Multiindex. Die Ordnung des Multiindex ist definiert als  $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_N$ . Man setzt somit für die partielle Ableitung

$$D^\alpha := \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \dots \partial_N^{\alpha_N}.$$

**Definition 2.1.4** (Schwache Ableitungen).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ , sei  $f \in L_{loc}^1(\Omega)$  und sei ein Multiindex  $\alpha$  gegeben. Existiert eine Funktion  $g \in L_{loc}^1(\Omega)$  mit der Eigenschaft

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) D^\alpha \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} g(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega),$$

so heißt  $g$  schwache Ableitung von  $f$  und wird mit  $D^\alpha f$  bezeichnet.

**Bemerkung 2.1.5.** Die Menge aller in  $\Omega$  lokal integrierbaren Funktionen wird hierbei durch  $L^1_{loc}(\Omega)$  bezeichnet. Eine Funktion heißt lokal integrierbar, wenn sie auf jeder kompakten Teilmenge von  $\Omega$  integrierbar ist.

**Definition 2.1.6** (Sobolev Räume  $W^{k,p}(\Omega; \mathbb{R}^n)$ ).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  offen. Der Raum  $W^{k,p}(\Omega)$  ist der lineare Raum aller  $y \in L^p(\Omega)$  für den alle schwachen Ableitungen  $D^\alpha y$  mit  $|\alpha| \leq k$  existieren und zu  $L^p(\Omega)$  gehören mit der Norm

$$\|y\|_{W^{k,p}(\Omega)} = \left( \sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} |D^\alpha y(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Der Sobolev Raum  $W^{k,\infty}(\Omega)$  ist mit der Norm

$$\|y\|_{W^{k,\infty}(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha y\|_{L^\infty(\Omega)}$$

verknüpft. Die Räume  $W^{k,p}(\Omega; \mathbb{R}^n)$  sind das  $n$ -dimensionale Analogon. Für  $p = 2$  setzen wir  $H^k(\Omega; \mathbb{R}^n) := W^{k,2}(\Omega; \mathbb{R}^n)$ .

**Definition 2.1.7** (Stark messbare Funktionen).

Seien  $\mathcal{X}$  ein Banachraum und  $T > 0$ . Eine Funktion  $y : [0, T] \rightarrow \mathcal{X}$  heißt stark messbar, falls zu ihr eine Folge von einfachen Funktionen  $\{y_k\}_{k=1}^\infty$  mit  $y_k : [0, T] \rightarrow \mathcal{X}$  existieren, so dass  $\lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t) = y(t)$  in  $\mathcal{X}$  für fast alle  $t \in [0, T]$  gilt.

**Definition 2.1.8** (Bochner-Raum).

Seien  $\mathcal{X}$  ein Banachraum,  $T > 0$  und  $p \in [1, \infty)$ , dann definieren wir  $L^p([0, T]; \mathcal{X})$  als den Raum der stark messbaren Funktionen  $y : [0, T] \rightarrow \mathcal{X}$  mit

$$\|y\|_{L^p([0, T]; \mathcal{X})} := \left( \int_0^T \|y(t)\|_{\mathcal{X}}^p dt \right)^{1/p} < \infty.$$

Der Raum  $L^\infty([0, T]; \mathcal{X})$  ist der Raum der stark messbaren Funktionen  $y$  definiert mit

$$\|y\|_{L^\infty([0, T]; \mathcal{X})} := \operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \|y(t)\|_{\mathcal{X}} < \infty.$$

**Definition 2.1.9** (Der Bochner Raum  $W^{1,p}(0, T; \mathcal{X})$  und die Zeitableitung).

Seien  $\mathcal{X}$  ein Banachraum und  $T > 0$ . Damit ist die Zeitableitung einer Funktion  $y \in L^p([0, T]; \mathcal{X})$  im distributionellen Sinn wie folgt definiert:

Für  $y \in L^p([0, T]; \mathcal{X})$  ist  $\partial_t y$  die Abbildung

$$\partial_t y : C_0^\infty([0, T]; \mathbb{R}) \ni \phi \mapsto - \int_0^T y(t) \partial_t \phi(t) dt \in \mathcal{X},$$

wobei  $C_0^\infty([0, T]; \mathbb{R})$  den Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger bezeichnet. Damit schreiben wir  $\partial_t y = z$ , falls

$$- \int_0^T y(t) \partial_t \phi(t) dt = \int_0^T z(t) \phi(t) dt \quad \forall \phi \in C_0^\infty([0, T]; \mathbb{R}).$$

Dann ist eine Funktion  $y \in L^p([0, T]; \mathcal{X})$  im Raum  $W^{1,p}([0, T]; \mathcal{X})$ , falls für ein  $z \in L^p([0, T]; \mathcal{X})$  die Relation  $\partial_t y = z$  gilt. Die Norm ist durch

$$\|y\|_{W^{1,p}([0, T]; \mathcal{X})} := \|y\|_{L^p([0, T]; \mathcal{X})} + \|\partial_t y\|_{L^p([0, T]; \mathcal{X})}$$

gegeben.

**Definition 2.1.10.** Seien  $\mathcal{X}$  und  $\mathcal{Y}$  linear, normierte Räume, dann schreiben wir im Folgenden für den Raum der linear, beschränkten Operatoren von  $\mathcal{X}$  nach  $\mathcal{Y}$  die Notation  $\mathcal{L}(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ . Eine Abbildung  $A : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$  heißt linearer Operator, falls  $A(x + y) = Ax + Ay$  sowie  $A(\lambda x) = \lambda Ax$  für alle  $x, y \in \mathcal{X}$  und für alle  $\lambda \in \mathbb{R}$  gilt. Der lineare Operator  $A$  heißt beschränkt, falls gilt

$$\|Ax\|_{\mathcal{Y}} \leq C\|x\|_{\mathcal{X}} \quad \forall x \in \mathcal{X}$$

mit einer von  $x \in \mathcal{X}$  unabhängigen Konstante  $C$ . Der Operator  $A$  heißt stetig, wenn aus  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x \in \mathcal{X}$  die Konvergenz  $\lim_{n \rightarrow \infty} Ax_n = Ax \in \mathcal{Y}$  folgt. Die Operatornorm eines linear stetigen Operators  $A$  ist durch

$$\|A\|_{\mathcal{L}(\mathcal{X}, \mathcal{Y})} := \sup_{\|x\|_{\mathcal{X}}=1} \|Ax\|_{\mathcal{Y}}$$

gegeben.

Die euklidische Norm eines Vektors  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  sei mit  $|\mathbf{x}|_2$  bezeichnet. Die euklidische Norm auf  $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$  ist gegeben durch  $|(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_2 := \sqrt{|\mathbf{x}|_2^2 + |\mathbf{y}|_2^2}$ . Falls  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  ist, dann wird die Frobenius Norm der Matrix mit  $|A|_F$  gekennzeichnet.

**Definition 2.1.11** (Funktional).

Wir nennen eine Abbildung  $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$  lineares Funktional. Der lineare Raum aller auf  $\{\mathcal{X} \parallel \cdot \|_{\mathcal{X}}\}$  definierten lineare Funktionale nennt man Dualraum  $\mathcal{X}^* = \mathcal{L}(\mathcal{X}, \mathbb{R})$  mit Norm

$$\|f\|_{\mathcal{X}^*} := \sup_{\|x\|_{\mathcal{X}}=1} |f(x)|.$$

**Definition 2.1.12** (Schwache Konvergenz).

Sei  $\mathcal{X}$  ein reeller Banachraum. Eine Folge  $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$  heißt schwach konvergent gegen  $x \in \mathcal{X}$ , wenn

$$f(x_n) \rightarrow f(x) \quad \forall f \in \mathcal{X}^*, n \rightarrow \infty.$$

Dabei bezeichnet man die schwache Konvergenz mit  $\rightharpoonup$ .

**Bemerkung 2.1.13.** In dem Buch [2] von Adams findet sich eine ausführliche Behandlung von Sobolev Räumen. Ein Beschreibung von Bochner Räumen findet sich z.B. in [97, Kapitel 10].

**Definition 2.1.14** (Raum der Distributionen).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  offen. Des Weitern sei  $\mathcal{D}(\Omega)$  der Raum aller unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompakten Träger in  $\Omega$ . Die Elemente von  $\mathcal{D}(\Omega)$  nennen wir Testfunktionen. Wir nennen ein lineares Funktional  $F : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}$  Distribution auf der Menge  $\Omega$ , falls gilt:

Existiert eine Folge  $\{\phi_k\}_{k \in \mathbb{N}}$  in  $\mathcal{D}(\Omega)$  mit der Eigenschaft

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\partial^\alpha \phi_k\|_{\infty} = 0$$

für jeden Multiindex  $\alpha$ , und gibt es eine kompakte Menge  $K \subset \Omega$  mit Träger  $\text{supp}(\phi_k) \subset K$  für alle  $k \in \mathbb{N}$ , so dass gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F(\phi_k) = 0.$$

Der Raum aller Distributionen auf  $\Omega$  wird mit  $\mathcal{D}'(\Omega)$  benannt.

## 2.2. Grundlegende Definitionen und Sätze.

**Definition 2.2.1.** Wir schreiben in der Arbeit einen Vektor  $\vec{v}$  aus  $\mathbb{R}^n$ ,  $n \geq 2$ , fettgedruckt durch  $\mathbf{v}$ . Von dieser Regel ausgenommen sind die griechischen Buchstaben.

Den Definitionen von Dautray/Lions [28, Kapitel IX, A, §1] folgend, definieren wir

**Definition 2.2.2** (Der Gradient, die Rotation und die Divergenz).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  offen.

- Der Gradient einer Funktion  $w \in \mathcal{D}(\Omega)$  ist durch

$$\nabla : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3), \quad \nabla w := \left( \frac{\partial w}{\partial x_1}, \frac{\partial w}{\partial x_2}, \frac{\partial w}{\partial x_3} \right)$$

gegeben und somit ein linearer Differentialoperator.

- Die Rotation einer drei-dimensionalen Vektorfunktion  $\mathbf{u} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  ist durch

$$\operatorname{curl} : \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3), \quad \operatorname{curl} \mathbf{u} := \left( \frac{\partial u_3}{\partial x_2} - \frac{\partial u_2}{\partial x_3}, \frac{\partial u_1}{\partial x_3} - \frac{\partial u_3}{\partial x_1}, \frac{\partial u_2}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right),$$

gegeben und somit ein linearer Differentialoperator.

- Die Divergenz einer drei-dimensionalen Vektorfunktion  $\mathbf{q} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  ist durch

$$\operatorname{div} : \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}(\Omega), \quad \operatorname{div} \mathbf{q} := \sum_{i=1}^3 \frac{\partial q_i}{\partial x_i},$$

gegeben und somit ein linearer Differentialoperator.

**Definition 2.2.3** (Die Operatoren  $\nabla$ ,  $\operatorname{curl}$  und  $\operatorname{div}$  im distributionellen Sinn).

- Der distributionelle Gradient ist definiert durch

$$\nabla : \mathcal{D}'(\Omega) \rightarrow \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3), \quad \langle \nabla \mathbf{y}, \phi \rangle := - \langle \mathbf{y}, \operatorname{div} \phi \rangle \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3).$$

- Der distributionelle curl-Operator ist gegeben durch

$$\operatorname{curl} : \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3), \quad \langle \operatorname{curl} \mathbf{y}, \phi \rangle := \langle \mathbf{y}, \operatorname{curl} \phi \rangle \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3).$$

- Der distributionelle Divergenzoperator ist definiert durch

$$\operatorname{div} : \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}'(\Omega), \quad \langle \operatorname{div} \mathbf{y}, \phi \rangle := - \langle \mathbf{y}, \nabla \phi \rangle \quad \text{für alle } \phi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

**Bemerkung 2.2.4.** Im weiteren Verlauf der Arbeit verwenden wir je nach Regularität die Definitionen 2.2.2 bzw. 2.2.3. Falls eine Funktion hinreichend glatt ist, sind die Definition 2.2.2 und Definition 2.2.3 äquivalent.

**Bemerkung 2.2.5.** Mit der Definition 2.2.3 gilt

$$\operatorname{curl}(\nabla \mathbf{y}) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathcal{D}'(\Omega), \quad \operatorname{div}(\operatorname{curl} \mathbf{y}) = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3).$$

Durch Anwenden der Definition der distributionellen Ableitung und unter Ausnutzung der Gleichungen  $\operatorname{curl}(\nabla \phi) = 0$ ,  $\operatorname{div}(\operatorname{curl}(\phi)) = 0$  für glatte Funktionen kann der Beweis geführt werden.

**Theorem 2.2.6** (Divergenz Theorem).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes Lipschitz Gebiet mit Rand  $\Gamma$  und äußere Normale  $\mathbf{n}$ . Sei ein Vektorfeld  $\mathbf{F} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit  $\mathbf{F} \in C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$  gegeben. Dann gilt

$$\int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{F} \, d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, d\varsigma.$$

**Theorem 2.2.7** (Stoke's Theorem).

Sei  $S \subset \mathbb{R}^2$  ein beschränktes Lipschitz Gebiet mit Einheitstangente  $\tau$  zu  $\partial S$ . Falls  $\mathbf{z} \in C^1(\bar{S}; \mathbb{R}^2)$  und  $\xi \in C^1(\bar{S})$ , dann gilt

$$\int_S \operatorname{curl}_S(\xi \mathbf{z}) \, d\zeta = \int_S \mathbf{z} \cdot \vec{\operatorname{curl}}_S \xi \, d\zeta + \int_{\partial S} \tau \cdot (\xi \mathbf{z}) \, ds,$$

mit der Oberflächenskalarrotation  $\operatorname{curl}_S(\xi \mathbf{z}) := \frac{\partial \xi z_2}{\partial x_1} - \frac{\partial \xi z_1}{\partial x_2}$  und Oberflächenrotation  $\vec{\operatorname{curl}}_S \xi := \left( \frac{\partial \xi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \xi}{\partial x_1} \right)^\top$ .

**Bemerkung 2.2.8.** Als Gebiet wird hierbei ein Lipschitz Gebiet (Lipschitzrand) benötigt, dessen Definition z.B. in [4, Kapitel A6.2] nachzulesen ist.

Als eine wichtige Eigenschaft des Gebietes benötigt man die der einfach zusammenhängende Menge. Wir greifen hierzu auf die Definitionen, in [5, Kapitel VIII. 4] beschrieben, zurück.

**Definition 2.2.9.** (Einfach zusammenhängendes Gebiet)

Ein Gebiet  $\Omega$  nennen wir einfach zusammenhängend, falls jede Schleife in  $\Omega$  nullhomotop ist. Hierbei ist eine Schleife im Gebiet  $\Omega$  jeder geschlossen stetige Weg und jede Schleife, die zu einer Punktschleife homotop ist, nennen wir nullhomotop.

**Definition 2.2.10.** (Skalar- $\mathcal{E}$  Vektorpotential)

Wir nennen ein Skalarfeld  $\phi$  ein Skalarpotential, falls es in einem einfach zusammenhängenden Gebiet stetig differenzierbar ist und zu ihm ein Vektorfeld  $\mathbf{V}$  existiert, sodass

$$\mathbf{V} = \nabla \phi.$$

Ein stetig differenzierbares Vektorfeld  $\mathbf{A}$  heißt Vektorpotential zu einem Vektorfeld  $\mathbf{V}$ , falls  $\mathbf{V} = \operatorname{curl} \mathbf{A}$  im Gebiet  $\Omega$  gilt. Des Weiteren nennen wir ein Vektorfeld  $\mathbf{V}$  konservativ, genau dann falls ein Skalarfeld  $\phi$  existiert mit  $\mathbf{V} = \nabla \phi$ .

**Definition 2.2.11.** Ein Vektorfeld  $\mathbf{V}$  nennt man rotationsfreies Vektorfeld, falls  $\operatorname{curl} \mathbf{V} = 0$ .

**Lemma 2.2.12.** Sei das Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  einfach zusammenhängend und das Vektorfeld  $\mathbf{V} \in C^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$ . Das Vektorfeld  $\mathbf{V}$  ist genau dann konservativ ( $\mathbf{V} = \nabla \phi$ ), wenn es rotationsfrei  $\operatorname{curl} \mathbf{V} = 0$  in  $\Omega$  ist.

**Bemerkung 2.2.13.** Das obige Lemma folgt aus [5, Theorem 4.8 und Bemerkung 4.10(a)]. Eine Erweiterung des Lemmas 2.2.12 auf Sobolev Räume gibt der folgende Satz an.

**Theorem 2.2.14.** Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes, einfach zusammenhängendes Lipschitz Gebiet und  $\mathbf{V} \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$ . Dann gilt  $\operatorname{curl} \mathbf{V} = 0$  in  $\Omega$  genau dann, wenn ein Skalarpotential  $\phi \in H^1(\Omega)$  existiert, sodass  $\mathbf{V} = \nabla \phi$ . Dabei ist  $\phi$  eindeutig bis auf eine Konstante bestimmt.

**Bemerkung 2.2.15.** Der Beweis von Theorem 2.2.14 wird in [41, Kapitel I. 3] bzw. in [74, Theorem 3.37] geführt.

**Theorem 2.2.16** (Fundamentallema der Variationsrechnung).

Seien  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  offen und  $f \in L^1(\Omega; \mathbb{R}^n)$  gegeben, wobei

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall \Phi \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^n)$$

erfüllt ist. Dann gilt

$$f(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{fast überall auf } \Omega.$$

**Theorem 2.2.17** (Lemma von Du Bois-Reymond).

Seien  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  offen und  $f \in L^1(\Omega)$  gegeben, wobei

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) D^{\alpha} \Phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \quad \forall \Phi \in \mathcal{D}(\Omega), \quad 1 \leq \alpha \leq n$$

erfüllt ist. Dann gilt

$$f(\mathbf{x}) = C \quad \text{fast überall auf } \Omega$$

und  $C$  ist eine konstante Funktion.

**Bemerkung 2.2.18.** Die Beweise von Theorem 2.2.16 und Theorem 2.2.17 finden sich in [39, Kapitel 1, Beweise zu Lemma 3 & 4] wieder. Das Fundamentallemma lässt sich auch auf Funktionen  $f \in L^1_{loc}(\Omega; \mathbb{R}^n)$  verallgemeinern. Der Beweis ist in Alt [4, Satz 2.21] gegeben.

**Theorem 2.2.19** (Hölderungleichung).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ . Sei  $1 < p < \infty$  und sei  $p'$  der konjugierte Exponent definiert durch

$$p' := \frac{p}{p-1}, \quad \text{so dass } \frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1,$$

der auch  $1 < p' < \infty$  erfüllt. Seien  $f \in L^p(\Omega)$  und  $g \in L^{p'}(\Omega)$ , dann ist  $fg \in L^1(\Omega)$  und es gilt

$$\int_{\Omega} |f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})| d\mathbf{x} \leq \|f\|_{L^p(\Omega)} \|g\|_{L^{p'}(\Omega)}.$$

**Bemerkung 2.2.20.** Im Buch [2, Theorem 2.4] ist der Beweis nachzulesen.

**Lemma 2.2.21** (Young'sche Ungleichung).

Sei  $1 < p < \infty$  und  $p'$  der konjugierte Exponent. Für  $a, b \geq 0$  gilt

$$ab \leq \frac{1}{p} a^p + \frac{1}{p'} b^{p'}.$$

**Bemerkung 2.2.22.** Die Young'sche Ungleichung ist z.B. in [4, Lemma 1.16] bewiesen.

**Definition 2.2.23** (Fixpunkt und Kontraktion).

Es sei  $G : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$  eine Abbildung zwischen den linear, normierten Räumen  $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$  mit  $\mathcal{X} \subset \mathcal{Y}$ . Dann nennt man ein Element  $x \in \mathcal{X}$  mit  $G(x) = x$  Fixpunkt von  $G$ . Die Abbildung  $G$  heißt Kontraktion, falls

$$\|G(x_1) - G(x_2)\|_{\mathcal{Y}} \leq C \|x_1 - x_2\|_{\mathcal{X}}$$

mit  $C \in (0, 1)$  gilt.

**Theorem 2.2.24** (Banach'scher Fixpunktsatz).

Sei  $\mathcal{X}$  ein vollständiger normierter Raum, und  $G : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$  eine Kontraktion. Dann hat  $G$  genau einen Fixpunkt  $x$ .

**Bemerkung 2.2.25.** Der Fixpunktsatz von Banach wird z.B. in [7, Theorem 4.3] bewiesen.

**Bemerkung 2.2.26** (Generische Konstanten).

Im Laufe der Arbeit bezeichnen  $C, \tilde{c}$  generische Konstanten. Diese dürfen nicht mit der Konstante  $c$ , die für die postulativ konstante Lichtgeschwindigkeit steht, verwechselt werden.

### 3 Das physikalische Modell

Am Anfang der Arbeit soll eine Beschreibung des zugrunde liegenden Modells stehen. Diese Ausführung orientiert sich an der klassischen Literatur der Elektrodynamik und Teilchendynamik wie im Buch [61] beschrieben.

#### 3.1. Annahmen.

Wir treffen folgende physikalische Annahmen.

**Annahme 3.1.1** (Physikalische Annahme an das Gebiet).

- *Im Inneren des Gebietes herrscht Vakuum.*
- *Es befinden sich elektrisch geladene Partikel im Inneren mit vorgegebenen Anfangsimpuls  $\mathbf{p}_0$  und Anfangsposition  $\mathbf{r}_0$ .*

**Annahme 3.1.2** (Elektromagnetische Felder).

- *Das elektrische Feld ist ein physikalisches Feld, das durch elektrische Punktladungen und Magnetfelder generiert wird. Es beschreibt die elektrische Kraft, die auf eine ruhende Ladung  $q$  im Raum wirkt und die elektrische Feldstärke ist definiert durch (Verifikation mittels Experimente)*

$$\mathbf{E} := \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\mathbf{F}}{q}$$

*mit einer Punktladung (Probeladung)  $q$  und einer Kraft  $\mathbf{F}$ , die durch andere Ladung erzeugt wird. Hierbei wird das elektrische Feld, welches durch die Punktladung  $q$  erzeugt wird, vernachlässigt. Die elektrische Verschiebung wird mit  $\mathbf{D}$  bezeichnet.*

- *Ein Vektorfeld  $\mathbf{B}$  nennt man magnetische Flussdichte, das nötig ist, sodass die Lorentzkraft die Bewegung von einer Ladung exakt/korrekt beschreibt. Des Weiteren kennzeichnet  $\mathbf{H}$  das eigentliche Magnetfeld, wobei wir folgende lineare Beziehung zwischen magnetischer Flussdichte und magnetischem Feld in Vakuum annehmen*

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$$

*mit magnetischer Permeabilitätskonstante  $\mu$ . Deshalb nennen wir im Folgenden  $\mathbf{B}$  ebenso Magnetfeld. Es gelte des Weiteren im Vakuum die Beziehung*

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E},$$

*mit elektrischer Permittivität  $\epsilon$ .*

**Annahme 3.1.3** (Teilchendynamik).

*In der Untersuchung der Teilchendynamik gehen wir davon aus, dass man die Ladung eines Partikels exakt im Ort lokalisieren kann. Des Weiteren werden wir zunächst annehmen, dass das Partikel durch eine fest vorgegebene einzelne Punktladung gegeben ist mit einer eindeutig gegebenen Masse. Im Laufe des Kapitels zur physikalischen Modellierung führen wir eine ausgedehnte Ladungsverteilung ein.*

Für die Darstellung der einzelnen Gleichungen und die Wohldefiniertheit dieser, sollen folgende Regularitätsannahmen getroffen werden, die jedoch nur für dieses Kapitel gelten und nicht für die Nachfolgenden. Dies soll vor allem in diesem Kapitel zur Übersichtlichkeit beitragen.

**Annahme 3.1.4** (EM-Felder, Position, Impuls, Ladungsverteilung und Strom).

- Die EM-Felder  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  seien hinreichend glatt und in angemessenen Funktionenräumen, sodass die eingeführten Operatoren und Gleichungen in ihrer starken Formulierung wohl definiert sind.
- Die Position  $\mathbf{r}$  und der Impuls  $\mathbf{p}$  eines Partikels sind hinreichend glatt.
- Die Ladungsverteilung  $\rho$  und der elektrische Strom  $\mathbf{j}$  sind hinreichend glatt.

**Bemerkung 3.1.5.** Es soll Folgendes noch einmal betont werden:

Die Annahme 3.1.4 gilt nur für das vorliegende Kapitel 3. In den Unterkapiteln wird bei Bedarf eine Anpassung dieser Bedingungen durchgeführt.

Das Hauptaugenmerk dieses Kapitels liegt auf der Beschreibung von elektromagnetischen Feldern generiert durch sich bewegende Partikel (z.B. Elektronen oder Protonen) und die Beeinflussungen dieser Ladungen durch elektromagnetische Felder. Die wesentlichen Bestimmungsgleichungen sind somit sowohl die Maxwell Gleichungen, die wohl wichtigsten Gleichungen bei der Beschreibung physikalischer Phänomene der klassischen Elektrodynamik, als auch die relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen, welche die Teilchendynamik modellieren. Zunächst wollen wir uns mit den Maxwell Gleichungen beschäftigen.

### 3.2. Die inhomogenen Maxwell Gleichungen - Modellierung der elektromagnetischen Felder.

Kurz zusammengefasst beschreiben die Maxwell Gleichungen das Verhalten der elektrischen und magnetischen Felder, deren Generierung und gegenseitige Beeinflussung in Abhängigkeit von Ladungen und elektrischen Strömen. Gängige Fachliteratur für die Maxwell'schen Gleichungen sind die Bücher von Huray [59], das sich ebenso mit dem geschichtlichen Aspekten der Gleichungen befasst als auch das Buch von Jackson [61] zur klassischen Elektrodynamik. Im Wesentlichen bestehen die Maxwell Gleichungen aus vier grundlegenden elektrodynamischen Gesetzen, die im Folgenden kurz ihre Erwähnung finden sollen. Wir werden im Laufe dieser Arbeit auf die Modelle, die im Zusammenhang mit den Maxwell Gleichungen stehen, aus dem Buch von Heribert Spohn [100] zurückgreifen. In [47, Kapitel 30] werden die Maxwell Gleichung mit Blickpunkt auf die spezielle Relativitätstheorie beleuchtet und in [74] im Hinblick auf numerische Verfahren.

**Bemerkung 3.2.1.** Die im weiteren Verlauf dieses Abschnittes vorgestellten Gesetze, die die Basis der Maxwell Gleichungen bilden, können sowohl in Integraler Form als auch in differentieller Form angegeben werden. Mit Hilfe des Satzes von Stokes (Satz von Kelvin-Stokes) Theorem 2.2.7 und des Divergenzsatzes Theorem 2.2.6 kann man die Äquivalenz beider Formen zeigen, falls die EM-Felder hinreichend glatt sind. Der Satz von Stokes in seiner üblichen Form als auch der Gaußsche Integralsatz (Divergenzsatz) finden sich so z.B. im Buch [6, Kapitel XII, Theorem 3.21 und 3.15] von Herbert Amann wieder. Wir werden uns im Folgenden auf die differentielle Form beschränken.

#### 3.2.1. Die Maxwell Gleichungen aus physikalischer Sicht.

In [47, Kapitel 30.1.3-30.1.5] findet man folgende physikalischen Gleichungen beschrieben. Der erste Bestandteil der Maxwell Gleichungen ist das **Gaußsche Gesetz**. Dessen differentielle Form ist gegeben durch

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t),$$

wobei  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  und  $t \in \mathbb{R}$ . Es setzt somit die Ladungsverteilung  $\rho(\mathbf{x}, t)$  in Verbindung zu dem elektrischen Feld  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ . Die Ladung ist Quelle des elektrischen Feldes. Hierbei ist  $\epsilon$  eine Konstante, die die elektrische Leitfähigkeit eines Stoffes/Materials wiedergibt.

Das **Gaußsche Gesetz für Magnetfelder** ist ebenso Teil der Maxwell Gleichungen, dessen Form durch

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0$$

gegeben ist und dessen Bedeutung es ist, dass das Feld der magnetischen Flussdichte quellenfrei ist. Somit ist  $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$  ein quellenfreies Vektorfeld.

Zu den Maxwell Gleichungen gehören des Weiteren das **erweiterte Durchflutungsgesetz (Ampéresches Gesetz)**

$$\frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t),$$

und das **Faradaysche Induktionsgesetz**

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{curl} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0},$$

die die Maxwell Gleichungen vervollständigen. Wir führen hierbei  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  als elektrischen Strom ein und benennen die Konstante für die magnetische Leitfähigkeit als  $\mu$ . Das Ampéresche Gesetz besagt, dass elektrische Ströme und Verschiebungsströme zu einem magnetischen Wirbelfeld führen. Eine Änderung in der magnetischen Flussdichte erzeugt ein elektrisches Rotationsfeld. Dies ist die Aussage des Faradayschen Induktionsgesetzes.

Die oben aufgeführten Gesetze der Elektrodynamik ergeben zusammen die sogenannten klassischen, makroskopischen, inhomogenen Maxwell Gleichungen, die sich somit in ihrer starken Formulierung wie folgt schreiben lassen

$$\frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad (3.1a)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{curl} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0} \quad (3.1b)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t), \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3.1c)$$

mit Vektorfunktionen  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  von Position  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  und Zeit  $t \in \mathbb{R}$ .

**Bemerkung 3.2.2.** *Betrachtet man sich die Maxwell Gleichungen so fällt einem zunächst auf, dass das System (3.1) überbestimmt sein müsste aufgrund der Tatsache, dass acht Gleichungen und jedoch nur sechs Unbekannte, die jeweiligen Komponenten von  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$ , vorliegen. In der Tat werden wir sehen, dass man die beiden Gaußschen Gesetze  $\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t)$  und  $\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0$  aus den beiden verbleibenden Gesetzen erhält aufgrund der Ladungserhaltung. Dies wird in Lemma 3.2.5 gezeigt.*

### 3.2.2. Die Maxwell Gleichungen, Ladungserhaltung und Überbestimmtheit.

Im nun Folgendem möchten wir die Aussage aus Bemerkung 3.2.2 zeigen und uns der Ladungserhaltungsgleichung (3.3) widmen. Die nachfolgende Diskussion werden wir für hinreichend glatte Funktionen führen, um einen Eindruck zu der essentiellen Struktur der Maxwell Gleichungen zu vermitteln.

Kommen wir zu den Randbedingungen an die Maxwell Gleichung und nehmen wir nun für den weiteren Verlauf der Arbeit an, dass ein offenes, beschränktes

und einfach zusammenhängendes Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  mit Rand  $\Gamma$  und ein Zeitintervall  $[0, T] \subset \mathbb{R}$  gegeben ist. Dann lassen sich die Maxwell Gleichungen (3.1) formulieren als

$$\frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (3.2a)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{curl} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (3.2b)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t), \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (3.2c)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega \quad (3.2d)$$

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \Gamma \times [0, T]. \quad (3.2e)$$

In dieser Formulierung sind die Randbedingungen die eines perfekten Leiters [29, Kapitel IA, §4 Bemerkung 17], was bedeutet, dass sowohl die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes  $\mathbf{E}$  am Rand  $\Gamma$  verschwindet als auch die Normalkomponente der magnetischen Flussdichte  $\mathbf{B}$  (siehe hierzu z.B. [74, Kapitel 1.2]). Neben den essentiellen Randbedingungen, lassen sich ebenso natürliche und Impedanz Randbedingungen an die Oberfläche angeben (siehe hierzu [65, 96, 98]). Die Anfangswerte der EM-Felder sind durch  $\mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \mathbf{B}_0(\mathbf{x}) \in \Omega$  gegeben. Im Verlaufe der nächsten Abschnitte werden wir die makroskopischen Maxwell Gleichung (3.2) weiter untersuchen und uns vor allem mit der Existenz von Lösung dieser Gleichungen beschäftigen. Man findet in [29, Kapitel IA, §4] einen Überblick aus mathematischer Sicht auf das Maxwell System.

**Definition 3.2.3** (Ladungserhaltung).

Wir bezeichnen folgende Gleichungen als Ladungserhaltungsgleichungen, wobei  $\rho$  die Ladungsverteilung und  $\mathbf{j}$  den elektrischen Strom charakterisieren:

- Die Ladungserhaltung im klassischen Sinne:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]. \quad (3.3)$$

- Die Ladungserhaltung im schwachen Sinne:

$$\int_0^T \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt = 0 \quad \forall \phi(\mathbf{x}, t) \in \mathcal{D}(Q) \quad (3.4)$$

mit  $Q := \Omega \times [0, T]$ .

**Lemma 3.2.4.** Es gelte Annahme 3.1.4. Die Gleichungen (3.2a) und  $\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t)$  ((3.2c)) implizieren die schwache Form der Ladungserhaltung (3.4).

**Beweis.** Es gilt nach (3.2c) und nach den Voraussetzungen, dass

$$\operatorname{div} \left( \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \right) = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) \quad (3.5)$$

unter Verwendung der stetigen Differenzierbarkeit der einzelnen Komponenten (und dem Satz von Schwarz). Eine Multiplikation von (3.5) mit Testfunktionen  $\phi \in \mathcal{D}(Q)$ , Integration dieser Gleichung über Raum und Zeit und Anwendung der partiellen Integrationsformel (4.9) für den Divergenz-Operator liefert

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt + \int_0^T \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial}{\partial t} E(\varsigma, t) \cdot \mathbf{n} \right) \underbrace{\phi(\varsigma, t)}_{=0} \, d\varsigma \, dt \\ & = \int_0^T \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(Q). \end{aligned} \quad (3.6)$$



Dabei ist  $C$  eine konstante Funktion für alle  $t \in [0, T]$ . Es gilt nun die Voraussetzung  $\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = 0$ . Sei  $t = 0$ , somit gilt

$$\begin{aligned} g(0) &= \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \underbrace{\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0)}_{=0} \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega) \\ &= C = 0. \end{aligned}$$

Damit wissen wir nun, dass  $C = 0$  für  $t = 0$  und deshalb für alle  $t \in [0, T]$ . Also gilt

$$\int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall t \in [0, T], \phi \in C_0^\infty(\Omega).$$

Deshalb folgt

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{für alle } (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]. \quad (3.8)$$

Es gelte nun nach Annahme, dass  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \times \mathbf{n} = 0$  auf  $\Gamma \times [0, T]$  ist. Wir testen (3.2b) mit Testfunktionen  $\phi(\mathbf{x}, t) = \xi(t) \tilde{\phi}(\mathbf{x})$  mit  $\xi \in C^1([0, T])$ ,  $\xi(0) = \xi(T) = 0$  und  $\tilde{\phi} \in C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$ . Dann erhalten wir

$$\int_0^T \xi(t) \int_{\Omega} \left( \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \cdot \tilde{\phi}(\mathbf{x}) + \operatorname{curl}(\tilde{\phi}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \right) \, d\mathbf{x} \, dt = 0.$$

Nach Theorem 2.2.16 folgt somit

$$\int_{\Omega} \left( \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \cdot \tilde{\phi}(\mathbf{x}) + \operatorname{curl}(\tilde{\phi}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \right) \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{in } [0, T],$$

so dass mit der Wahl  $\tilde{\phi}(\mathbf{x}) = \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{\psi}(\mathbf{x})$  mit  $\tilde{\psi} \in C^2(\bar{\Omega})$

$$\int_{\Omega} \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{\psi}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{in } [0, T], \quad \forall \tilde{\psi} \in C^2(\bar{\Omega}),$$

gilt. Damit liefert die Formel der partiellen Integration, dass

$$\int_{\Gamma} \frac{1}{c} (\partial_t \mathbf{B} \cdot \mathbf{n}) \tilde{\psi} \, d\zeta - \int_{\Omega} \frac{1}{c} \operatorname{div}(\partial_t \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)) \tilde{\psi}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{in } [0, T], \quad \forall \tilde{\psi} \in C^2(\bar{\Omega}).$$

Der zweite Term ist Null, da  $\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0$  für alle  $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]$  gilt. Mit der Annahme, dass  $\mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) \cdot \mathbf{n} = 0$  auf  $\Gamma$ , folgt damit  $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0$  auf  $\Gamma \times [0, T]$ .

Es gilt noch zu zeigen, dass  $\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t)$  für alle  $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]$  ist. Multiplizieren wir die Maxwell Gleichung (3.2a) mit Testfunktionen  $\Phi \in \mathcal{D}(Q; \mathbb{R}^3)$  und integrieren über Raum und Zeit, so gilt

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_{\Omega} \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt - \mu^{-1} \int_0^T \int_{\Omega} \operatorname{curl} \Phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \\ &= - \int_0^T \int_{\Omega} \frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \cdot \Phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \quad \forall \Phi \in \mathcal{D}(Q; \mathbb{R}^3) \end{aligned}$$

unter der Ausnutzung der partiellen Integrationsformel für den curl-Operator (4.7) für glatte Funktionen und der Nullrandwerte. Sei  $\Phi(\mathbf{x}, t) = \xi(t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \in \mathcal{D}(Q; \mathbb{R}^3)$ , dann gilt

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \frac{\partial}{\partial t} \xi(t) \int_{\Omega} \frac{\epsilon}{c} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \, dt \\ &= - \frac{1}{c} \int_0^T \xi(t) \int_{\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \, dt \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega), \xi \in C_0^\infty([0, T]) \\ &= \frac{1}{c} \int_0^T \frac{\partial}{\partial t} \xi(t) \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \, dt \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega), \xi \in C_0^\infty([0, T]) \end{aligned}$$

unter Anwendung der schwachen Ladungserhaltung (3.4). Beachte  $\operatorname{curl} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) = 0$  für alle  $\mathbf{x} \in \Omega$ . Es gilt, dass  $h(t) := \int_{\Omega} \frac{\epsilon}{c} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c} \rho(\mathbf{x}, t) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  sicher in  $L^1(]0, T[)$  für festes  $x \in \Omega$  liegt,  $\xi \in C_0^\infty([0, T])$ , so dass nach dem Lemma von Du Bois Reymond ([39, Kapitel 1, Lemma 4]) folgt

$$h(t) = \tilde{C} \quad \text{für alle } t \in [0, T].$$

Dabei ist  $\tilde{C}$  eine konstante Funktion für alle  $t \in [0, T]$ . Sei  $t = 0$ , somit folgert man mit  $\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, 0)$

$$\begin{aligned} h(0) &= \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}) \cdot \frac{\epsilon}{c} \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) + \frac{1}{c} \rho(\mathbf{x}, 0) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \left( -\frac{\epsilon}{c} \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) + \frac{1}{c} \rho(\mathbf{x}, 0) \right) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \frac{1}{c} \underbrace{\left( -\rho(\mathbf{x}, 0) + \rho(\mathbf{x}, 0) \right)}_{=0} \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \quad \forall \phi \in C_0^\infty(\Omega). \end{aligned}$$

Damit wissen wir nun, dass  $\tilde{C} = 0$  für  $t = 0$  und deshalb für alle  $t \in [0, T]$ . Also gilt

$$\int_{\Omega} \left( -\frac{\epsilon}{c} \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{c} \rho(\mathbf{x}, t) \right) \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \quad \forall t \in [0, T], \phi \in C_0^\infty(\Omega).$$

Deshalb folgt

$$\operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t) \quad \text{für alle } (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, T]. \quad (3.9)$$

□

### 3.2.3. Die Maxwell Gleichungen und Übergangsbedingungen.

Betrachten wir noch kurz den Fall, dass zwei unterschiedliche Media in einem Gebiet  $\Omega' \supset \Omega$  mit unterschiedlichen elektrischen und magnetischen Eigenschaften durch eine Trennfläche  $\Gamma = S$  getrennt sind. Die Geometrie ist in Abbildung 3.1 skizziert mit EM-Felder  $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2$  (wobei diese EM-Felder die Grenzfelder bei

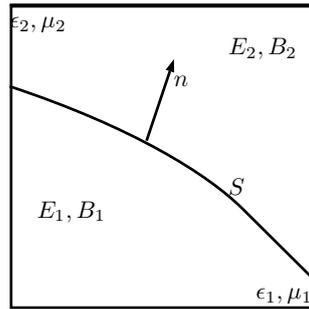


ABBILDUNG 3.1. Übergangsbedingung:  $S$ , Gebiet  $\Omega'$  und Teilgebiete

Annäherung von  $S$  von den jeweiligen Gebieten kennzeichnen) und dazugehörigen Permeabilitäten und Permittivitäten. Der äußere Normalenvektor  $\mathbf{n}$ , der in Abbildung 3.1 senkrecht auf  $S$  steht, zeigt hierbei von dem inneren in das äußere Gebiet. So gelten nach [61, Kapitel I.5] und [74, Kapitel 1.2] folgende Übergangsbedingungen

$$\begin{aligned} (\epsilon_2 \mathbf{E}_2 - \epsilon_1 \mathbf{E}_1) \cdot \mathbf{n} &= \rho_S, \quad (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) \cdot \mathbf{n} = 0 && \text{auf } S \\ \mathbf{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{n} \times (\mu_2^{-1} \mathbf{B}_2 - \mu_1^{-1} \mathbf{B}_1) = \mathbf{K}_S && \text{auf } S, \end{aligned}$$

d.h. die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes und die Normalkomponente des magnetischen Feldes sind stetig entlang von  $S$ . Hingegen sind die Tangentialkomponente des magnetischen Feldes und die Normalkomponente des elektrischen Feldes im Allgemeinen nicht stetig auf  $S$ , wobei  $\mathbf{K}_S$  eine Oberflächenstromdichte (siehe Bemerkung 4.8.5) und  $\rho_S$  eine Flächenladungsdichte darstellt. Wir konzentrieren uns in der Arbeit auf die Maxwell Gleichung (3.2) mit Randbedingungen eines perfekten Leiters.

### 3.2.4. Die Maxwell Gleichungen und Punktladungen.

Wir weisen ausdrücklich daraufhin, dass wir im nun Folgendem nicht die Glätte der Ladungsverteilung  $\rho$  und der Stromdichte  $\mathbf{j}$  voraussetzen. Wir treffen nun folgende Annahmen.

#### Annahme 3.2.6.

- Wir fassen die Ladungsverteilung  $\rho$  und die Stromdichte  $\mathbf{j}$  so auf, dass diese durch eine einzelne Punktladung generiert werden.
- Die Position  $\mathbf{r}$  und der Impuls  $\mathbf{p}$  der Punktladung sind hinreichend regulär, nämlich  $\mathbf{r}, \mathbf{p} \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)$ .

Hierzu bedienen wir uns der Dirac Delta Distribution.

#### Definition 3.2.7 (Dirac Distribution).

Man definiert die Delta Dirac Distribution  $\delta$  (bzw.  $\delta_{\mathbf{r}}$  die Distribution im Punkt  $\mathbf{r} \in \Omega$ ) als stetiges, lineares Funktional mit

$$\delta_{\mathbf{r}} : \phi \mapsto \phi(\mathbf{r}), \quad \delta_{\mathbf{r}} : C(\overline{\Omega}) \rightarrow \mathbb{R}.$$

Der Delta Dirac ist beschränkt, denn

$$|\langle \phi, \delta_{\mathbf{r}} \rangle_{C(\overline{\Omega}), C(\overline{\Omega})^*}| = |\phi(\mathbf{r})| \leq \sup_{\mathbf{x} \in \overline{\Omega}} |\phi(\mathbf{x})| = 1 \cdot \|\phi\|_{C(\overline{\Omega})}.$$

und somit stetig mit Norm  $\|\delta_{\mathbf{r}}\|_{C(\overline{\Omega})^*} = 1$ .

Damit definieren wir die Ladungsverteilung und den elektrischen Strom als

#### Definition 3.2.8 (Ladungsverteilung & elektrischer Strom).

Es gelte Annahme 3.2.6. Die Ladungsverteilung ist durch

$$\rho(\cdot, t) \in C(\overline{\Omega})^*, \quad \forall t \in [0, T], \quad \rho(\cdot, t) := q\delta(\cdot - \mathbf{r}(t)) \quad \text{in } \Omega \times [0, T] \quad (3.10)$$

definiert, wobei  $q$  für die Ladung eines Partikels steht und  $\mathbf{r}(t)$  die Position der Ladung im Koordinatensystem angibt (siehe auch hierzu Kapitel 3.3).

Den durch die Bewegung der Ladung entstehenden elektrischen Strom bezeichnen wir mit  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ . In dieser Art und Weise geht der Strom in der rechten Seite der Maxwell Gleichungen mit

$$\mathbf{j}(\cdot, t) \in C(\overline{\Omega}; \mathbb{R}^3)^*, \quad \forall t \in [0, T], \quad \mathbf{j}(\cdot, t) := q\delta(\cdot - \mathbf{r}(t))\mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } \Omega \times [0, T], \quad (3.11)$$

unter Berücksichtigung der Generierung durch eine Punktladung, ein. Hierbei ist  $\mathbf{p}(t)$  der Impuls der bewegten Ladung und  $\mathbf{v}(t)$  die entsprechende Geschwindigkeit des Partikels (siehe Kapitel 3.3).

**Lemma 3.2.9.** Es gelte Annahme 3.2.6. Die in (3.10) definierte Ladungsverteilung erfüllt  $\rho \in C([0, T]; C^1(\overline{\Omega})^*)$ .

**Beweis.** Mit Bemerkung 3.2.7 und Definition (3.10) gilt

$$|\langle \phi, q\delta_{\mathbf{r}} \rangle_{C^1(\bar{\Omega}), C^1(\bar{\Omega})^*}| \leq q \|\phi(\mathbf{r}(t))\|_{C^1(\bar{\Omega})}$$

für festes, beliebiges  $t \in [0, T]$  und  $\phi \in C^1(\bar{\Omega})$ . Damit gilt  $\|\rho(\cdot, t)\|_{C^1(\bar{\Omega})^*} \leq q$ . Es folgt somit, dass  $\rho(t) \in C^1(\bar{\Omega})^*$  für jedes feste  $t \in [0, T]$ . Darüber hinaus gilt

$$\begin{aligned} & \lim_{\tau \rightarrow t} \|\rho(t) - \rho(\tau)\|_{C^1(\bar{\Omega})^*} \\ &= \lim_{\tau \rightarrow t} \sup_{\|\phi\|_{C^1(\bar{\Omega})} \leq 1} q |\phi(\mathbf{r}(t)) - \phi(\mathbf{r}(\tau))| \\ &\leq \lim_{\tau \rightarrow t} \sup_{\|\phi\|_{C^1(\bar{\Omega})} \leq 1} q \int_0^1 |\nabla \phi(\mathbf{r}(t) + s(\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(t)))| |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(t)| ds \\ &\leq \lim_{\tau \rightarrow t} q |\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(t)| = 0. \end{aligned}$$

Es gilt zu beachten, dass  $\mathbf{r}$  hierfür genügend Regularität besitzt. Zusätzlich nutzen wir den integralen Mittelwertsatz und dass

$$|\nabla \phi(\mathbf{r}(t) + s(\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{r}(t)))| \leq \|\phi\|_{C^1(\bar{\Omega})} \leq 1$$

gilt. Damit ist  $\rho \in C([0, T]; C^1(\bar{\Omega})^*)$  gezeigt.  $\square$

**Bemerkung 3.2.10.** Für den elektrischen Strom, definiert in Gleichung (3.11), lässt sich mit der gleichen Argumentation  $\mathbf{j} \in C([0, T]; C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)^*)$  nachweisen.

Mit diesen Definitionen von Ladungsverteilung und elektrischen Strom gilt die Gesetzmäßigkeit der Ladungserhaltung in einem verallgemeinerten Sinn.

**Definition 3.2.11** (Verallgemeinerte Ladungserhaltung).

Die Formel

$$\int_0^T \left( \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \phi(\cdot, t), \rho(\cdot, t) \right\rangle_{C(\bar{\Omega}), C(\bar{\Omega})^*} + \langle \nabla_x \phi(\cdot, t), \mathbf{j}(\cdot, t) \rangle_{C(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3), C(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)^*} \right) dt = 0 \quad (3.12)$$

für alle  $\phi \in \mathcal{D}(Q)$  bezeichnet die verallgemeinerte Ladungserhaltung.

**Lemma 3.2.12.** Es gelte Annahme 3.2.6. Mit den Definitionen der Ladungsverteilung in Formel (3.10) und des elektrischen Stroms in Formel (3.11) ist die verallgemeinerte Ladungserhaltung (3.12) erfüllt.

**Beweis.** Es gilt Lemma 3.2.9 und Bemerkung 3.2.10. Die Integrale von (3.12) sind wohldefiniert und somit die Integrierbarkeit sichergestellt. Einsetzen von (3.10), (3.11) in die linke Seite von (3.12) und Verwendung der Definition 3.2.7 der Dirac Distribution ergibt

$$\begin{aligned} & \int_0^T \left( q \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}(t), t) + q \nabla_x \phi(\mathbf{r}(t), t) \cdot \frac{d}{dt} \mathbf{r}(t) \right) dt \\ &= \int_0^T q \frac{d}{dt} \left( \phi(\mathbf{r}(t), t) \right) dt = q(\phi(\mathbf{r}(T), T) - \phi(\mathbf{r}(0), 0)) = 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(Q). \end{aligned}$$

Dabei nutzt man aus, dass die Randwerte der Testfunktion auf dem Ort-Zeit Zylinder  $Q$  verschwinden. Die Distribution (3.10) und (3.11) erfüllen die verallgemeinerte Ladungserhaltung.  $\square$

Für eine bessere Übersicht und angenehmere Lesart der Maxwell Gleichungen und später auch der Newton-Lorentz Gleichungen führen wir folgende Notationen ein

$$\begin{aligned}\gamma(\mathbf{p}(t)) &:= \sqrt{1 + \frac{|\mathbf{p}(t)|_2^2}{(m_0^q c)^2}} \\ v(\mathbf{p}(t)) &:= (m_0^q \gamma(\mathbf{p}(t)))^{-1} \mathbf{p}(t) \\ \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) &:= c^{-1} \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)).\end{aligned}\tag{3.13}$$

Hierbei wird  $\gamma(\mathbf{p}(t))$  als Lorentzfaktor bezeichnet, der für Geschwindigkeiten, die sich der Lichtgeschwindigkeit  $c$  annähern, gegen  $\gamma(\mathbf{p}(t)) \rightarrow +\infty$  tendiert.

Das einführende Kapitel zu den Maxwell Gleichungen möchten wir mit einer Übersicht aller vorkommenden physikalische Konstanten, die in (3.2), (3.11), (3.15) und in der Formel zur Ladungsverteilung auftreten, abschließen. Die Auflistung findet sich in Tabelle 3.1 wieder. Die Untersuchungen auf Existenz und Eindeutigkeit

Physikalische Konstanten	Bedeutung
$c$	Lichtgeschwindigkeit
$\epsilon$	elektrische Leitfähigkeit
$\mu$	magnetische Leitfähigkeit
$q$	Ladung
$m_0^q$	Ruhemasse der Ladung

TABELLE 3.1. Überblick über die Konstanten

von einer Lösung der Maxwell Gleichungen (3.2) werden in Kapitel 4.3 ausgeführt. Dabei wird es zunächst notwendig sein zu definieren, in welchem Sinne wir die Maxwell Gleichungen und deren Lösungen verstehen. Nachdem wir uns kurz mit den Maxwell Gleichungen in differentieller Form beschäftigt haben, werden wir uns nun im Folgendem mit der Teilchendynamik auseinandersetzen als weiteren wichtigen Bestandteil unseres Zustandssystems.

### 3.3. Die relativistische Newton-Lorentz Bewegungsgleichungen - Modellierung der Teilchendynamik.

Nehmen wir die elektromagnetischen Felder als gegebene Daten an, so lässt sich die Bewegung eines Partikels bzw. einer elektrischen Ladung mit Geschwindigkeit  $\dot{\mathbf{r}}$  in EM-Feldern mittels den relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen modellieren. Die auf eine Punktladung wirkende Kraft wird Lorentzkraft genannt und ist in ihrer allgemeinsten Form wie folgt definiert

$$\mathbf{F}_L := \mathbf{F}_L^E + \mathbf{F}_L^B = q(\mathbf{E} + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}) \times \mathbf{B})\tag{3.14}$$

mit der Aufspaltung in die elektrische Komponente  $\mathbf{F}_L^E$  und der magnetischen Komponente  $\mathbf{F}_L^B$ , welche aufaddiert die Lorentzkraft ergeben, siehe hierzu auch [47, Kapitel 30.1.2] und [92, Kapitel 1.21, 2.8 und 4.9.3]. Es bezeichne hierbei  $\mathbf{E}$  die elektrische Feldstärke und  $\mathbf{B}$  die magnetische Flussdichte. Der Zusammenhang zwischen der Lorentzkraft  $\mathbf{F}_L$  und der Bewegung einer Ladung stellt in der Physik das zweite Newtonsche Gesetz (**lex secunda**) her. Es gilt

$$\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F}_L.$$

Somit lassen sich die relativistischen Newton Lorentz Gleichungen als gewöhnliches Differentialgleichungssystem zur Bestimmung des zeitabhängigen Impulses  $\mathbf{p}(t)$  und

der Position  $\mathbf{r}(t)$  der Ladung über den Zeithorizont  $[0, T]$ ,  $T \in \mathbb{R}, T > 0$ , angeben

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = \mathbf{F}_L(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t), t) \quad \text{in } [0, T] \quad (3.15a)$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } [0, T] \quad (3.15b)$$

$$\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0 \quad \text{und} \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0 \quad (3.15c)$$

Die Lorentzkraft in (3.15) gegeben durch

$$\mathbf{F}_L(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t), t) := q \left[ \mathbf{e}(\mathbf{r}(t)) + \mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \left( \mathbf{b}(\mathbf{r}(t)) + \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t) \right) \right]$$

kann in zwei Komponenten zerlegt werden, in eine Komponente für das E-Feld  $\mathbf{F}_L^E(\mathbf{r}(t), t)$  und eine Komponente für die magnetische Flussdichte  $\mathbf{F}_L^B(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t), t)$ . Die Existenz von Lösungen von (3.15) findet sich in Kapitel 4.3 wieder. In der Lorentzkraft  $\mathbf{F}_L$  sind neben den durch die Teilchenbewegung induzierten EM-Felder  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  ebenso die äußeren elektrischen Felder  $\mathbf{e}$  und magnetischen Felder  $\mathbf{b}$  gegeben. Diese tragen dafür Sorge, dass die Ladungen bzw. der Partikelstrahl in dem jeweiligen betrachtenden Gebiet gehalten wird. Die äußere magnetische Flussdichte  $\mathbf{b}$  wird im Verlauf der Arbeit eine bedeutende Rolle spielen. Die äußeren Felder werden mittels elektrischem Kondensators oder Spulen erzeugt. Die Anfangsbedingungen sind durch den Impuls  $\mathbf{p}_0 \in \mathbb{R}^3$  und die Position der Ladung  $\mathbf{r}_0 \in \mathbb{R}^3$  zu dem Zeitpunkt  $t = 0$  gegeben.

Bringt man im Folgenden die Beschreibung der elektromagnetischen Felder mittels der Maxwell Gleichungen (3.2) mit der Teilchendynamik und die dadurch resultierenden Newton-Lorentz Gleichungen (3.15) zusammen, so erhalten wir eine Kopplung der partiellen und gewöhnlichen Differentialgleichungen, die auf das im nächsten Abschnitt beschriebene System führt.

### 3.4. Das gekoppelte Maxwell Newton Lorentz System.

Im nun Folgenden formulieren wir das gekoppelte inhomogene Maxwell-Newton System mit relativistischer Lorentzkraft, das sich aus (3.2), (3.11) and (3.15) ergibt. In der Literatur findet man in [100, Kapitel 2.4] eine ausführliche Beschreibung des Systems.

#### 3.4.1. Formulierung des gekoppelten Maxwell Newton Lorentz Systems.

Das physikalische Modell hat die Gestalt

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{q}{c} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{curl} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\epsilon} q \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)), \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \dot{\mathbf{p}}(t) &= q \left( \mathbf{e}(\mathbf{r}(t)) + \mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \left( \mathbf{b}(\mathbf{r}(t)) + \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t) \right) \right) && \text{in } [0, T] \\ \dot{\mathbf{r}}(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) && \text{in } [0, T] \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0, && \text{in } \Omega \\ \mathbf{E} \times \mathbf{n} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 && \text{auf } \Gamma \times [0, T]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Das oben aufgeschriebene Modell (3.16) koppelt somit die generierten EM-Felder mit den bewegten Ladungen. Einerseits erzeugt die bewegte Ladung EM-Felder (Quelle in den Maxwell Gleichungen), in der die Position und Geschwindigkeit der

Ladung in (3.2a) und (3.2c) mit (3.11) eingehen, andererseits tragen diese erzeugten EM-Felder zu einer Beschleunigung und Richtungsänderung der Teilchen durch den Eintrag in (3.15a) bei.

**Bemerkung 3.4.1.** *Wir weisen daraufhin, dass man (3.16) im Falle eines Bündels von  $n_p$ -Partikeln mit  $n_p \in \mathbb{N}$  in ähnlicher Art und Weise darstellen kann. Hierzu schreiben wir den elektrischen Strom bedingt durch die Vielzahl an Partikeln als Summe*

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_p} q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}_i(t))$$

und die Ladungsdichte als

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_p} q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t))$$

über die  $n$ -Teilchen des Bündels. Als Konsequenz der auftretenden Partikel, die alle ihre eigenen EM-Felder erzeugen, ergeben sich der relativistische Impuls und die Position des  $i$ -ten Partikel unter Berücksichtigung aller erzeugten EM-Felder.

Somit lässt sich das gekoppelte Maxwell-Newton-Lorentz System für ein ganzes Bündel an  $n_p$ -Partikel schreiben als

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{1}{c} \sum_{i=1}^{n_p} q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}_i(t)) && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \operatorname{curl} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \operatorname{div} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\epsilon} \sum_{i=1}^{n_p} q_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i(t)), \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \dot{\mathbf{p}}_i(t) &= q_i \left( \mathbf{e}(\mathbf{r}_i(t)) + \mathbf{E}(\mathbf{r}_i(t), t) + \beta(\mathbf{p}_i(t)) \times \left( \mathbf{b}(\mathbf{r}_i(t)) + \mathbf{B}(\mathbf{r}_i(t), t) \right) \right) && \text{in } [0, T], \quad i = 1, \dots, n_p \\ \dot{\mathbf{r}}_i(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}_i(t)) && \text{in } [0, T], \quad i = 1, \dots, n_p \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{r}_i(0) = \mathbf{r}_0^{(i)}, \quad \mathbf{p}_i(0) = \mathbf{p}_0^{(i)}, \quad \text{in } \Omega, \quad i = 1, \dots, n_p \\ \mathbf{E} \times \mathbf{n} &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, && \text{auf } \Gamma \times [0, T]. \end{aligned} \tag{3.17}$$

Eine weiterführende Diskussion des Mehrpartikelsystems ist in Spohn [100, Kapitel 11] zu finden. Es stellt sich die Frage, inwiefern das gekoppelte Maxwell-Newton-Lorentz System eine sinnvolle Formulierung der physikalischen Phänomene darstellt und unseren Zwecken genügt.

**Annahme 3.4.2.** *In der folgenden Diskussion des gekoppelten Systems werden wir uns auf das System (3.16) konzentrieren, also das Vorhandensein einer einzigen Ladung im physikalischen Gebiet annehmen.*

### 3.4.2. Repräsentation mittels Skalar- und Vektorpotentialen.

Die in diesem Kapitel vorgestellten elektromagnetischen Felder  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$ , Lösungen der Maxwell Gleichungen (3.2), können im Hinblick auf die in Definition 2.2.10

eingeführten Skalar- und Vektorpotentiale wie folgt definiert werden

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &:= -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \\ \mathbf{B} &:= \nabla \times \mathbf{A} = \text{curl } \mathbf{A},\end{aligned}$$

mit einem sogenannten elektrostatischen skalaren Potential  $\phi$  und einem magnetischen Vektorpotential  $\mathbf{A}$ . Daraus ergibt sich für die erste Komponente der Maxwell Gleichung (3.2a)

$$\begin{aligned}\frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( -\nabla\phi - \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \right) - \mu^{-1} \text{curl}(\text{curl } \mathbf{A}) &= -\frac{1}{c} \mathbf{j} \\ \Leftrightarrow \mu^{-1} \nabla^2 \mathbf{A} - \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left( \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi + \mu^{-1} \text{div } \mathbf{A} \right) &= -\frac{1}{c} \mathbf{j}\end{aligned}$$

wobei der Operator  $\nabla^2$  den vektoriellen Laplace Operator bezeichnet. Die Gleichung (3.2b) ist somit mit

$$\frac{\partial}{\partial t} \text{curl } \mathbf{A} + \text{curl} \left( -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \right) = 0$$

stets erfüllt. Hierbei gilt zu berücksichtigen, dass  $\text{curl}(\nabla A) = 0$ . Aus den Divergenz Bedingungen (3.2c) folgt

$$\Delta\phi + \frac{\partial}{\partial t}(\text{div } \mathbf{A}) = -\frac{1}{\epsilon} \rho, \quad \underbrace{\text{div}(\text{curl } \mathbf{A})}_{=0} = 0.$$

Man erhält als ein zu lösendes Maxwell Zustandsystems

$$\begin{aligned}\mu^{-1} \nabla^2 \mathbf{A} - \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left( \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi + \mu^{-1} \text{div } \mathbf{A} \right) &= -\frac{1}{c} \mathbf{j} \\ \Delta\phi + \frac{\partial}{\partial t}(\text{div } \mathbf{A}) &= -\frac{1}{\epsilon} \rho.\end{aligned}$$

**Bemerkung 3.4.3.** *Der Vorteil bei der Formulierung der Maxwell Gleichungen mittels Potentialen besteht darin, dass die Dimension der zu findenden Lösung sich verringert.*

Die Lorentzkraft  $\mathbf{F}_L$  der Newton-Lorentz Gleichungen (3.15) ergibt sich dann zu

$$\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = q \left[ e(\mathbf{r}) - \nabla\phi - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}) \times (\mathbf{b}(\mathbf{r}) + \text{curl } \mathbf{A}) \right].$$

Somit formuliert sich das gekoppelte Maxwell-Newton-Lorentz System (3.16) mit dem Skalarpotential  $\phi$  und dem Vektorpotential  $A$  zu

$$\begin{aligned}\mu^{-1} \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial^2 \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} - \nabla \left( \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi + \mu^{-1} \text{div } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right) &= -\frac{1}{c} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \Delta\phi + \frac{\partial}{\partial t}(\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{x}, t)) &= -\frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t) && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \dot{\mathbf{p}}(t) &= \mathbf{F}_L(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) && \text{in } [0, T] \\ \dot{\mathbf{r}}(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) && \text{in } [0, T]\end{aligned}$$

mit geeigneten Rand- und Anfangsbedingungen.

### 3.5. Schwächen des gekoppelten Modells.

Die offensichtliche Schwäche des gekoppelten Modells liegt darin, dass man in den Newton-Lorentz Gleichungen die EM-Felder in den Positionen der einzelnen Partikel auswerten muss. Wie wir auch im Laufe der Arbeit sehen werden, besitzen die Lösungen (Fundamentallösung) der Maxwell Gleichungen an der Stelle  $\mathbf{x} = \mathbf{r}(t)$  eine Singularität. Um dieses Problematik zu umgehen, gibt es in der Literatur zwei verschiedenartige Modelle, die wir kurz beleuchten wollen, bevor wir uns auf das sogenannte *Abraham Modell* festlegen werden.

Eine weitere Schwäche des oben vorgestellten Modells (3.17) ist seine physikalische Ungenauigkeit bzw., dass das Modell für den Fall, dass Partikel an den Rand des Gebietes gelangen, versagt. Siehe hierzu auch [100]. An den Rändern treten weitere physikalische Phänomene auf, die man mit diesen Modellen nicht beschreiben kann. Verlässt ein Partikel das Gebiet  $\Omega$ , so sind  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  an der Position dieses Teilchens nicht mehr definiert. Daher werden wir dazu übergehen, eine weitere Bedingung in unserem späteren Optimierungsproblem aufzunehmen, um dies zu verhindern. Um dies sicherzustellen, wird eine Zustandsbeschränkung für den Zustand  $\mathbf{r}(t)$ , die Position der Ladung, eingeführt.

## 4 Analytische Behandlung der relativistischen Maxwell-Newton-Lorentz-Gleichungen und deren optimale Steuerung

Nachdem wir in dem vorherigen Abschnitt die Bestimmungsgleichungen der zugrunde liegenden physikalischen Gesetze aufgestellt haben, sollen im Folgenden die einzelnen Komponenten näher untersucht werden. Das ursprüngliche Modell, das die Partikelbewegungen in elektromagnetischen Feldern beschreibt, findet sich in Kapitel 3 und Gleichung (3.16) wieder. In diesem Kapitel werden zu Anfang in Kapitel 4.1 einige notwendige Modifikationen (siehe Kapitel 3.5) dieses Modells vorgenommen, was auf das sogenannte Abraham-Modell führen wird. Das Optimalsteuerproblem soll formuliert werden (Kapitel 4.2), hierbei wird in Kapitel 4.3 die Existenz von Lösungen der einzelnen Komponenten näher beleuchtet. Im weiteren Verlauf (Kapitel 4.4) wird die exakte Formulierung des Optimalsteuerproblems angegeben und die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des entstehenden reduzierten Zustandssystems diskutiert. In Kapitel 4.5 wird die Existenz einer optimalen Lösung bewiesen und anschließend werden in Kapitel 4.6 die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung hergeleitet. Am Ende des Kapitels 4 betrachten wir in Kapitel 4.7 die adjungierten Maxwell-Gleichungen und schließen mit der Fragestellung, ob sich das externe Magnetfeld sowohl divergenz- als auch rotationsfrei fortsetzen lässt (Kapitel 4.8).

### 4.1. Aufstellen eines modifizierten Zustandssystems.

Aufgrund der beschriebenen Problematik mit der  $\delta$ -Dirac-Distribution in Kapitel 3.5, stellen wir zwei unterschiedliche Modifikationen des gekoppelten Maxwell-Newton-Lorentz-Systems vor. Die Methode der Wahl ist hierbei eine ausgeschmierte Ladungsverteilung einzuführen, im Gegensatz zu einer punktuellen Ladung und Auswertung. Man findet diese so zum Beispiel in [100, Kapitel 2.3] beschrieben. Dabei muss das jeweilige Modell der *extended charge distribution* im Rahmen der klassischen Elektrodynamik mit den gekoppelten Gleichungen die empirischen Messungen hinreichend gut modellieren können. Vor allem die Einhaltung der Ladungserhaltung ist essentiell. Hierbei gilt es herauszustellen, dass es in der Literatur nur zwei bekannte, untersuchte Modelle gibt: das *Lorentz-Modell* einer relativistischen Ladungsverteilung ([100, Kapitel 2.5]) und das *Abraham-Modell* ([100, Kapitel 2.4]).

Im *relativistischen, kovarianten Lorentz-Modell* wird angenommen, dass die Ladungsverteilung und Massenverteilung des Partikels in jedem Inertialsystem dieselbe ist. Es ist somit also invariant unter der Lorentz-Transformation. Das Modell steht somit im Einklang mit der speziellen Relativitätstheorie, ist jedoch deutlich weniger erforscht und weniger gebräuchlicher im Vergleich zu dem sogenannten *Abraham-Modell*, das wir im Folgenden verwenden werden.

#### 4.1.1. Das semi-relativistische Abraham-Modell.

Das Partikel wird als sphärischer, symmetrischer Festkörper modelliert, mittels ausgeschmierter Delta-Distribution. Das Modell, welches nun im weiteren Verlaufe der Arbeit das Modell der Wahl sein wird, ist das sogenannte semi-relativistische Abraham-Modell einer festen Ladungsverteilung. Damit ist es nicht Lorentz-invariant. Der große Nachteil dieses Modells ist seine zu große Ungenauigkeit im Falle, dass sich die Geschwindigkeiten der betrachtenden Partikel der Lichtgeschwindigkeit nähern. Im Abraham-Modell verwendet man anstelle der Dirac- $\delta$ -Distribution eine ausgeschmierte  $\delta$ -Distribution, die sowohl in die Maxwell-Gleichungen als auch in

den Newton-Lorentz-Gleichungen eingeht. Wir benennen mit  $\varphi$  die erweiterte Ladungsverteilung,

$$\begin{aligned} \varphi \in C^{2,1}(\mathbb{R}^3), \quad \text{supp}(\varphi) \subseteq B_{R_\varphi}(0), \quad \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = 1 \\ \varphi(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad \varphi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{y}) \quad \text{wenn } |\mathbf{x}|_2 = |\mathbf{y}|_2 \end{aligned} \quad (4.1)$$

mit  $R_\varphi > 0 \in \mathbb{R}$  ( $\varphi$  erfüllt die Eigenschaften wie z.B. in [4, Kapitel 2.13] von Alt beschrieben). Wir behandeln also die Ladung nicht mehr als Punktladung, mit ihrer Masse konzentriert in einem Punkt, sondern als ausgeschmierte Ladung über eine Kugel mit Radius  $R_\varphi$ . Somit hat das Abraham Modell folgende Form

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \mu^{-1} \text{curl } \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= -\frac{q}{c} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \text{curl } \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \text{div } \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\epsilon} q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)), \quad \text{div } \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 && \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x}) && \text{in } \Omega \\ \mathbf{E} \times \mathbf{n} &= 0, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 && \text{auf } \Gamma \times [0, T] \\ \dot{\mathbf{p}}(t) &= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \left[ (\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{e}(\mathbf{x})) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times (\mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{b}(\mathbf{x})) \right] d\mathbf{x} && \text{in } [0, T] \\ \dot{\mathbf{r}}(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } [0, T] \\ \mathbf{r}(0) &= \mathbf{r}_0, \quad \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Wir definieren

**Definition 4.1.1** (Strom & Ladungsverteilung mit geglättetem  $\delta_r$ ).

Der elektrische Strom  $\mathbf{j}$  und die Ladungsverteilung  $\rho$  sind gegeben durch

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) := q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)), \quad \rho(\mathbf{x}, t) := q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)).$$

**Annahme 4.1.2.** Das stationäre, externe elektrische Feld  $\mathbf{e}$  wird in (4.2) vernachlässigt.

**Lemma 4.1.3.** Sei  $\mathbf{r} \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)$ . Es gilt die Formel zur Erhaltung der Ladung, gegeben durch

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \text{div } \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0.$$

**Beweis.** Betrachten wir die partielle Ableitung bzgl. der Zeit für die Ladungsverteilung und den Divergenz Operator angewandt auf den Strom  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$  so erhält man

$$\begin{aligned} \text{div } \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \rho}{\partial t}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\mathbf{j}(\mathbf{x}, t))_i + \frac{\partial}{\partial t} q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \\ &= q \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)))_i - q \varphi'(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \dot{\mathbf{r}}(t) \\ &= q \varphi'(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \dot{\mathbf{r}}(t) - q \varphi'(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \dot{\mathbf{r}}(t) = 0, \end{aligned}$$

unter Ausnutzung von (3.15b).  $\square$

#### 4.1.2. Die externen EM-Felder und die homogene Maxwell Gleichung.

Die externen elektromagnetischen Felder  $\mathbf{e}$ ,  $\mathbf{b}$  werden als stationäre, zeitunabhängige EM-Felder angenommen, die die homogenen Maxwell Gleichungen der Form

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{e}(\mathbf{x}) - \mu^{-1} \operatorname{curl} \mathbf{b}(\mathbf{x}) &= 0 & \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{b}(\mathbf{x}) + \operatorname{curl} \mathbf{e}(\mathbf{x}) &= 0 & \text{in } \Omega \times [0, T] \\ \operatorname{div} \mathbf{e}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{\epsilon} \rho(\mathbf{x}, t), \quad \operatorname{div} \mathbf{b}(\mathbf{x}) = 0 & \text{in } \Omega \times [0, T]. \end{aligned} \quad (4.3)$$

erfüllen müssen. Unter der Annahme 4.1.2, dass das externe elektrische Feld  $\mathbf{e}$  nicht vorhanden ist, erhält man aus (4.3) somit Bedingungen an das externe Magnetfeld  $\mathbf{b}$  der Art, dass

$$\operatorname{div} \mathbf{b} = 0, \operatorname{curl} \mathbf{b} = 0 \text{ and } \partial_t \mathbf{b} = 0 \quad \text{in } \Omega. \quad (4.4)$$

erfüllt sein müssen. Die Steuerung unseres später eingeführten Optimierungsproblems wird dieses externe Magnetfeld  $\mathbf{b}$  sein.

#### 4.1.3. Formulierung des äußeren Magnetfeldes als Vektorfeld eines Skalarpotentials.

Zusätzlich zu dem Abraham Modell (4.2) müssen die Bedingungen (4.4) an das externe Magnetfeld erfüllt werden. Wir führen hierzu ein magnetisches Skalarpotential  $\eta$  ein. Das Skalarpotential fassen wir als Lösung der Poisson Gleichung mit Dirichlet Randdaten  $u$  auf. Diese ergibt sich in ihrer starken Formulierung als

$$-\Delta \eta = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad \eta = u \quad \text{auf } \Gamma. \quad (4.5)$$

Sei angenommen  $u \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$ , dann existiert nach Lax Milgram eine eindeutige, schwache Lösung  $\eta \in H^1(\Omega)$  von (4.5). Das Gebiet  $\Omega$  ist nach Annahme 4.2.17 einfach zusammenhängend. Es folgt mit Theorem 2.2.14, dass im Fall der Definition von  $\mathbf{b} := \nabla \eta$ ,  $\mathbf{b}$  ein konservatives Vektorfeld ist. Nach Definition 2.2.10 und (4.5) folgt damit

$$\operatorname{curl}(\mathbf{b}) = \operatorname{curl}(\nabla \eta) = 0, \operatorname{div}(\mathbf{b}) = \operatorname{div}(\nabla \eta) = \Delta \eta = 0, \partial_t \mathbf{b} = 0 \quad \text{in } \Omega.$$

Somit sind die Bedingungen (4.4) an die Steuerung  $\mathbf{b}$ , durch Einführung des magnetischen Skalarpotentials, sichergestellt (fast überall). Anstelle der Steuerbeschränkungen (4.4) wird die Poisson Gleichung (4.5) in das Zustandssystem mit aufgenommen. Die Dirichlet Randdaten  $u$  stellen die Steuervariablen in unserem Optimierungsproblem, das wir zunächst in seiner rein formalen Darstellung angeben werden, dar.

Darüber hinaus lässt sich mit der Formel der partiellen Integration die Impuls Gleichung der Newton-Lorentz Gleichungen (3.15a), respektive in (4.2), umformulieren zu

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}}(t) &= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \left[ \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times (\nabla \eta + \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)) \right] d\mathbf{x} \\ &= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \left[ \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \right] d\mathbf{x} \\ &\quad - q \int_{\Omega} \eta(\nabla(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))) d\mathbf{x} \\ &\quad + q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{n} d\zeta \quad \text{in } [0, T]. \\ \dot{\mathbf{r}}(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } [0, T]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

#### 4.1.4. Schranken an die Position des Partikels.

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die physikalisch relevanten Modelle und deren Kopplung dargestellt. Um das Abraham Modell für unsere Zwecke verwenden und untersuchen zu können, stellen wir eine weitere wesentliche Forderung an die Position bzw. Trajektorie des Partikels. Wir beschränken den Aufenthalt des Partikels auf ein Gebiet  $\tilde{\Omega}$ , das im Gebiet  $\Omega$  liegen soll und keinen Kontakt zu dessen Rand haben wird. Das macht insofern Sinn und ist keine wirkliche Einschränkung, wenn man sich die optimale Steuerung eines Partikels in einem Teilchenbeschleuniger vor Augen führt. Dabei ist es auf keinen Fall gewünscht, dass das Partikel den Rand des Beschleunigers berührt oder durchdringt. Zumal dann die Modelle, wie sie hier vorgestellt werden, keine genaue Beschreibung der physikalischen Verhältnisse wiedergeben. Die Zustandsbeschränkungen, die wir im nächsten Abschnitt einführen, führen zu einer komplizierteren Diskussion der Optimalitätsbedingungen, siehe hierzu z.B. die Bücher [104, Kapitel 6.2], [56, Kapitel 1.7.3] und [68, Kapitel 9.5].

## 4.2. Formulierung des Optimalsteuerproblems.

Bis zu dem Ende von Kapitel 4 der Arbeit treffen wir folgende Annahme

**Annahme 4.2.1.** *Die in dem gekoppelten Modell (Abraham Modell) (4.2) auftretenden physikalischen Konstanten setzen wir konstant auf den Skalarenwert 1. Es gelte somit*

$$\epsilon \equiv 1, \mu \equiv 1, c \equiv 1.$$

In Bemerkung 4.3.10 wird die Frage aufgegriffen, wie die Diskussion der Maxwell Gleichungen zu führen ist unter der Negierung von Annahme 4.2.1.

### 4.2.1. Das Optimalsteuerproblem.

Werfen wir zunächst einen kurzen Blick auf das Optimalsteuerproblem, mit dem und dessen Komponenten wir uns im Laufe dieser Arbeit beschäftigen werden. Dieses ist in  $(\tilde{P})$  gegeben. Die Nebenbedingung in Form von den Maxwell-Gleichungen, den Newton-Lorentz Gleichungen und der Poisson Gleichung sind in ihrer starken Formulierung gegeben.

$$\text{minimiere } \mathcal{J}(\mathbf{r}, u) := \int_0^T J_1(\mathbf{r}(t)) dt + J_2(\mathbf{r}(T)) + \frac{\alpha}{2} \int_{\Gamma} u^2 d\zeta$$

u.d.N dass die **Maxwell Gleichungen**

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) - \text{curl } \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \quad \text{in } \Omega \times [0, T]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) + \text{curl } \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times [0, T]$$

$$\text{div } \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \quad \text{div } \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{in } \Omega \times [0, T]$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}), \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{B}_0(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega$$

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{auf } \Gamma \times [0, T],$$

die **Newton-Lorentz Gleichungen**

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) [\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x} \quad (\tilde{P})$$

$$-q \int_{\Omega} \eta(\nabla(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))) d\mathbf{x}$$

$$+q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{n} d\zeta \quad \text{in } [0, T]$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } [0, T]$$

$$\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0, \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0,$$

die **Poisson Gleichung**

$$-\Delta \eta = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad \eta = u \quad \text{auf } \Gamma$$

und die **Zustandsbeschränkungen**

$$\mathbf{r}(t) \in \tilde{\Omega}$$

erfüllt sind,

wobei  $\tilde{\Omega} \subset \Omega$  eine abgeschlossene Teilmenge darstellt. Darüber hinaus soll die Bedingung

$$\text{dist}(\tilde{\Omega}, \Gamma) > R_{\varphi}$$

gelten, die sicherstellt, dass die abgeschlossene Menge  $\tilde{\Omega}$  einen Abstand von mehr als  $R_{\varphi}$  zum Rand der Menge  $\Omega$  besitzt. So ist sichergestellt, dass der Support der

ausgeschmierten Delta-Distribution nicht den Rand  $\Gamma$  berühren kann. Im Optimierungsproblem  $(\tilde{P})$  sei die Zielfunktion  $\mathcal{J}$  eine Komposition aus Endzeitzielfunktional  $J_2$  in Abhängigkeit von der Position und  $J_1$ , welches die Trajektorie des Partikels über den gesamten Zeithorizont enthält. Der Kontrollkostenterm ist gegeben durch  $\frac{\alpha}{2} \int_{\Gamma} u^2 d\zeta$ , genauer gesagt, gegeben als Tychonov-Term mit Tychonov-Parameter  $\alpha > 0$ , indem die Randdaten der Poisson-Gleichung (4.5) als Randsteuerung eingehen. Zusätzlich zu dem gekoppelten PDE-ODE System und der Poisson Gleichung nehmen wir die Zustandsbeschränkung  $\mathbf{r}(t) \in \tilde{\Omega}$  auf, die eine physikalische Sinnhaftigkeit des zugrunde liegenden Modells garantiert und sicherstellt (Teilchen verbleibt im Inneren des Gebiets). Die Formulierung der relativistischen Impulsgleichung (4.6) in  $(\tilde{P})$  garantiert, dass die Integranden der rechten Seite von (4.6) für beliebige  $\mathbf{r}(t) \in \mathbb{R}^3$  wohl definiert sind.

#### 4.2.2. Benötigte Funktionenräume und Spursätze.

Um den Lösungsbegriff, den wir für die Maxwell Gleichungen gebrauchen wollen, einführen zu können, benötigt es einige Vorbereitung. Im Folgenden sollen daher einige hilfreiche und benötigte Definition, Resultate und Formeln ihre Erwähnung finden.

**Definition 4.2.2.** *Wir bezeichnen der Definition 2.1.2 folgend mit  $X := L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$  den Raum der messbaren,  $L^2$ -integrierbaren Funktionen. Der Übersichtlichkeit halber benennen wir die Skalarprodukte und dazugehörige Normen bzgl.  $X$  und  $X \times X$  mit  $(\cdot, \cdot)_X$  und  $\|\cdot\|_X$ .*

**Definition 4.2.3** (Schwache Differential Operatoren).

Sei  $u \in L^2(\Omega)$ ,  $\mathbf{v} \in X$  und  $\mathbf{w} \in X$ . Wir bezeichnen mit

$$\begin{aligned} \mathbf{g} = \nabla u \in X & : && \text{den schwachen Gradienten,} \\ d = \operatorname{div} \mathbf{w} \in L^2(\Omega) & : && \text{die schwache Divergenz,} \\ \mathbf{r} = \operatorname{curl} \mathbf{v} \in X & : && \text{die schwache Rotation (curl)} \end{aligned}$$

falls folgende Gleichungen erfüllt sind

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\phi} \, d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} u \operatorname{div} \boldsymbol{\phi} \, d\mathbf{x} && \forall \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3), \\ \int_{\Omega} d \boldsymbol{\phi} \, d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \nabla \phi \, d\mathbf{x} && \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}), \\ \int_{\Omega} \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\phi} \, d\mathbf{x} &= + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \operatorname{curl} \boldsymbol{\phi} \, d\mathbf{x} && \forall \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3), \end{aligned}$$

wobei  $\operatorname{curl} : \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3)$ , den distributionellen Rotationsoperator mit  $(\operatorname{curl} \mathbf{v}, \boldsymbol{\phi}) := (\mathbf{v}, \operatorname{curl} \boldsymbol{\phi})$ ,  $\forall \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  und  $\operatorname{div} : \mathcal{D}'(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{D}'(\Omega)$ , den distributionellen Divergenzoperator bezeichnet. Siehe hierzu auch die Definition 2.2.2.

**Definition 4.2.4** ( $H(\operatorname{div}; \Omega)$ - &  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$ -Räume).

Wir definieren folgende Funktionenräume

$$\begin{aligned} H(\operatorname{div}; \Omega) &:= \{\mathbf{d} \in X : \operatorname{div}(\mathbf{d}) \in L^2(\Omega)\} \\ H(\operatorname{curl}; \Omega) &:= \{\mathbf{d} \in X : \operatorname{curl}(\mathbf{d}) \in X\}, \end{aligned}$$

die Hilberträume bezüglich folgender Normen

$$\begin{aligned} \|\mathbf{d}\|_{H(\operatorname{div}; \Omega)} &= (\|\mathbf{d}\|_X^2 + \|\operatorname{div} \mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2)^{\frac{1}{2}} \\ \|\mathbf{d}\|_{H(\operatorname{curl}; \Omega)} &= (\|\mathbf{d}\|_X^2 + \|\operatorname{curl} \mathbf{d}\|_X^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

sind.

Des Weiteren benötigen wir Spursätze für die unterschiedlichen Differential Operatoren. In [67, 75] ist folgender standardmäßige Spursatz bewiesen

**Theorem 4.2.5** (Spursatz für  $H^1(\Omega)$ ).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes Lipschitz Gebiet. Dann existiert ein eindeutiger, stetiger, linearer Operator

$$\gamma_\tau^\Omega : H^1(\Omega) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$$

mit

$$(\gamma_\tau u)(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \text{ aus } \Gamma, u \in C(\bar{\Omega}) \cap H^1(\Omega),$$

und  $\gamma_\tau$  ist surjektiv mit  $\|\gamma_\tau u\|_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \leq \tilde{c}\|u\|_{H^1(\Omega)}$ .

**Theorem 4.2.6** (Spursatz für  $H(\text{curl}; \Omega)$  &  $H(\text{div}; \Omega)$ ).

Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein beschränktes Lipschitz Gebiet. Dann gilt:

- (i) Der Raum  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  liegt dicht in  $H(\text{curl}; \Omega)$ .
- (ii) Es existiert ein eindeutiger, stetiger, linearer Operator

$$\gamma_t : H(\text{curl}; \Omega) \rightarrow H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma; \mathbb{R}^3),$$

so dass

$$\gamma_t \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) \times \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \text{ f.ü. in } \Gamma$$

für Funktionen  $\mathbf{u} \in C(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3) \cap H(\text{curl}; \Omega)$ , mit

$$\|\gamma_t \mathbf{u}\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma; \mathbb{R}^3)} \leq \tilde{c}\|\mathbf{u}\|_{H(\text{curl}; \Omega)}.$$

- (iii) Der Raum  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  liegt dicht in  $H(\text{div}; \Omega)$ .
- (iv) Es existiert ein eindeutiger, stetiger, linearer Operator

$$\gamma_n : H(\text{div}; \Omega) \rightarrow H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma),$$

so dass

$$\gamma_n \mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \text{ f.ü. in } \Gamma$$

für Funktionen  $\mathbf{u} \in C(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3) \cap H(\text{div}; \Omega)$ , mit

$$\|\gamma_n \mathbf{u}\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma)} \leq \tilde{c}\|\mathbf{u}\|_{H(\text{div}; \Omega)}.$$

Die Abbildung  $\gamma_n : H(\text{div}; \Omega) \rightarrow H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma)$  ist surjektiv.

**Bemerkung 4.2.7.** Als Literatur für den Spuroperator  $\gamma_t$  kann die Arbeit von Girault, Raviart [41] herangezogen werden. Eine detaillierter Diskussion der Eigenschaften der Tangentialspur findet man in Alonso und Valli [3]. Der Normalspuroperator  $\gamma_n$  wird in dem Buch [103] von Temam näher untersucht. Der Beweis von Theorem 4.2.6 ist in [74, Kapitel 3, Theorem 3.22-3.29] gegeben.

**Bemerkung 4.2.8.** Der Tangentialspuroperator  $\gamma_t : H(\text{curl}; \Omega) \rightarrow H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$  ist im Gegensatz zu dem Normalspuroperator nicht surjektiv.

**Bemerkung 4.2.9.**

- Für den Rotationsoperator curl gilt folgende Formel der partiellen Integration:

$$\int_{\Omega} \phi \cdot \text{curl } \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \text{curl } \phi \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = + \int_{\Gamma} \gamma_t(\mathbf{v}) \cdot \phi \, d\varsigma \quad \forall \phi, \mathbf{v} \in C^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3). \quad (4.7)$$

- Für den Divergenzoperator div gilt folgende Formel der partiellen Integration:

$$\int_{\Omega} \phi \, \text{div } \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = + \int_{\Gamma} \gamma_n(\mathbf{v}) \phi \, d\varsigma \quad \forall \phi \in C^\infty(\Omega), \mathbf{v} \in C^\infty(\Omega; \mathbb{R}^3). \quad (4.8)$$

**Lemma 4.2.10.** *Es gilt für die partielle Integrationsformel des Divergenzoperators:*

$$\int_{\Omega} \phi \operatorname{div} \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \langle \gamma_n \mathbf{v}, \gamma_{\tau} \phi \rangle_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma), H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \quad \forall \phi \in H^1(\Omega), \mathbf{v} \in H(\operatorname{div}; \Omega). \quad (4.9)$$

**Bemerkung 4.2.11.** *Der Beweis vom Lemma 4.2.10 findet sich in Dautray/Lions [28, Kapitel IX, A, §1].*

**Bemerkung 4.2.12.** *Für den curl-Operator gibt es auch eine Verallgemeinerung der partiellen Integrationsformel (4.7), die wir im späteren Verlauf der Arbeit angeben werden.*

**Theorem 4.2.13** (de Rham).

*Sei  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  ein einfach zusammenhängendes Lipschitz Gebiet. Dann gilt*

$$\left\{ \mathbf{v} \in H(\operatorname{curl}; \Omega) : \operatorname{curl} \mathbf{v} = 0 \right\} = \nabla \left( H^1(\Omega) \right).$$

**Bemerkung 4.2.14.** *Ein Beweis dieses Theorems ist nachzulesen in [9].*

Zur Betrachtung der Poisson Gleichung definieren wir uns vorab folgende Räume

**Definition 4.2.15.** *Sei*

$$\begin{aligned} \mathcal{W} &:= \{ v \in H_0^1(\Omega) : \nabla v \in H(\operatorname{div}; \Omega) \}, \\ \mathcal{H} &:= \{ v \in \mathcal{W} : \partial_n v \in L^2(\Gamma) \}, \end{aligned}$$

*wobei  $\partial_n v$  die Normalenableitung durch  $\partial_n v := \gamma_n \nabla v$  für  $v \in H^1(\Omega)$ , mit  $\gamma_n$  aus Theorem 4.2.6 (iv) und mit äußere Normale  $\mathbf{n}$ , definiert. Die Norm von  $\mathcal{H}$  sei gegeben durch*

$$\|h\|_{\mathcal{H}} := \left( \|h\|_{H_0^1(\Omega)} + \|\Delta h\|_{L^2(\Omega)} + \|\partial_n h\|_{L^2(\Gamma)} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.10)$$

*mit dazugehörigen Skalarprodukt.*

**Bemerkung 4.2.16** (Eigenschaften der Räume  $\mathcal{W}$  und  $\mathcal{H}$ ).

*Es gelten die Aussagen:*

- (i) *Die Räume  $\mathcal{W}, \mathcal{H}$  sind Hilberträume.*
- (ii) *Der Laplace Operator ist definiert durch  $\Delta := \operatorname{div} \nabla : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\Omega)$ .*
- (iii) *Der Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist somit nach dem Satz von Riesz reflexiv.*

#### 4.2.3. Annahmen an das Gebiet und die Daten.

**Annahme 4.2.17** (Regularität und Eigenschaften des Gebiets).

- (a) *Die Menge  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  sei ein offenes, beschränktes und einfach wegzusammenhängendes Gebiet.*
- (b) *Darüber hinaus sei  $\Omega$  von der Gestalt, dass für alle  $g \in L^2(\Omega)$  eine eindeutige Lösung  $\omega \in \mathcal{H}$  von*

$$\int_{\Omega} \nabla \omega \cdot \nabla \phi \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} g \phi \, d\mathbf{x} \quad \forall \phi \in H_0^1(\Omega) \quad (4.11)$$

*existiert. Des Weiteren gelte die folgende a priori Abschätzung*

$$\|\omega\|_{\mathcal{H}} \leq C \|g\|_{L^2(\Omega)}$$

*mit einer Konstante  $C > 0$ , die unabhängig von  $\omega$  und  $g$  ist.*

(c) Das Teilgebiet  $\tilde{\Omega}$  sei definiert durch

$$\tilde{\Omega} := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : g_i(\mathbf{x}) \leq 0, i = 1, \dots, m\}$$

mit  $m \in \mathbb{N}$  und  $g_i \in C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$  mit Ableitungen  $g'_i$ , die absolut stetige Funktionen für  $i = 1, \dots, m$  sind. Es gelte, dass

$$\text{dist}(\tilde{\Omega}, \Gamma) > R_\varphi. \quad (4.12)$$

**Bemerkung 4.2.18.** Die Existenz einer eindeutigen Lösung in  $H_0^1(\Omega)$  von (4.11) ist nach dem Lemma von Lax-Milgram sichergestellt (siehe hierzu Evans [34, Kapitel 6.1, Theorem 3]). Da die Daten  $g \in L^2(\Omega)$  sind, folgt somit hieraus, dass  $\nabla \omega \in H(\text{div}; \Omega)$  gilt. Nun wird zusätzlich die Bedingung an die Normalenableitung von  $\omega$  gestellt, sodass  $\partial_n \omega \in L^2(\Gamma)$ . Dies ist unter vergleichsweise milden Annahmen erfüllt, siehe [26, Kapitel 6].

**Annahme 4.2.19** (Problemdaten).

Es werden folgende Annahmen an die Daten von  $(\tilde{P})$  gemacht:

- Die Bestandteile  $J_1, J_2$  des Zielfunktionals erfüllen:  $J_1, J_2 \in C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$  und sind nach unten durch Konstanten  $\underline{c}_1 > -\infty$  und  $\underline{c}_2 > -\infty$  beschränkt.
- Der Tikhonov-Parameter  $\alpha$  im Tikhonov-Term erfüllt  $\alpha \in \mathbb{R}, \alpha > 0$ .
- Die Anfangsdaten  $\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0$  der Maxwell Gleichungen liegen in  $X$ .
- Es gilt:  $q$  ist eine positive Konstante.
- Die geglättete Delta Distribution  $\varphi$  erfüllt die Annahmen in (4.1).
- Die Anfangsposition des Partikels der Newton-Lorentz Gleichungen erfüllt  $\mathbf{r}_0 \in \tilde{\Omega}$  mit gegebenen Anfangsimpuls  $\mathbf{p}_0 \in \mathbb{R}^3$ .

#### 4.2.4. Einordnung des Optimalsteuerproblems.

Nachdem wir nun das Optimalsteuerproblem  $(\tilde{P})$  angegeben haben, soll ein Überblick über die vorhandene Literatur gegeben werden.

Die optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen wird in [104] Tröltzsch ausführlich behandelt. Sowohl die Existenz optimaler Lösungen wird für eine allgemeine Klasse von Problemen diskutiert, als auch auf den Umgang mit Zustandsbeschränkungen eingegangen. Die Diskussion der Optimalitätsbedingungen von zustandsbeschränkten Optimalsteuerproblemen findet sich in [56] wieder. Hierbei werden benötigte Regularitätsbedingungen wie Robinsons  $CQ$  und die Regularitätsbedingung von Zowe und Kurcyuz [117] behandelt. Für die optimale Steuerung von gewöhnlichen Differentialgleichungen kann das Buch [38] von Gerds empfohlen werden. In [68] Luenberger werden Zustandsbeschränkungen im Kontext der Optimalsteuerung diskutiert. Die Poisson Gleichung (und allgemeine elliptische Systeme) in Verbindung mit Optimalsteueraufgaben finden sich z.B. in [77] von Neittaanmaki, Sprekels und Tiba wieder.

Im nun folgendem Abschnitt werden wir rigorose Lösungsbegriffe für die einzelnen Gleichungen in  $(\tilde{P})$  einführen. Dabei wenden wir uns den einzelnen Bestandteilen des Zustandssystems von  $(\tilde{P})$  zu. Hierzu werden wir definieren in welchem (Regularitäts)-Sinne man die Komponenten auffassen wird. Darüber hinaus zeigen wir die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des Zustandssystems basierend auf einer reduzierten Formulierung.

### 4.3. Existenz von Lösungen der Zustandsgleichungen.

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns im Detail mit den einzelnen Komponenten der Zustandsgleichungen von  $(\tilde{P})$ . Wir werden dafür die Lösungsbegriffe vorstellen, die Existenz von Lösungen der einzelnen Komponenten diskutieren und vorhandene Resultate aufzeigen. Den Beginn werden die Maxwell Gleichungen machen.

#### 4.3.1. Diskussion der Maxwell Gleichungen.

Um die Existenz von Lösungen der Maxwell Gleichungen in einem milden Sinn diskutieren zu können, benötigt man die Theorie über Halbgruppen. Als Grundlage hierfür dient uns das Buch [85] von Pazy. Die grundlegenden Definitionen und Sätze, die benötigt werden, sind im Anhang A dargestellt. Zunächst geben wir die Definition einer milden Lösung an.

**Definition 4.3.1** (Milde Lösung).

Sei  $\mathcal{A} : X \rightarrow X$  der infinitesimale Generator einer  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)$ . Sei  $w_0 \in X$  und  $f \in L^1(0, T; X)$ . Dann bezeichnen wir die Funktion  $w(t) \in C([0, T]; X)$  gegeben durch

$$w(t) = \mathcal{G}(t)w_0 + \int_{s=0}^t \mathcal{G}(t-s)f(s) ds \quad 0 \leq t \leq T \quad (4.13)$$

als eindeutige **milde Lösung** des Anfangswert Problems (A.1) im Intervall  $[0, T]$ .

**Bemerkung 4.3.2.** Die milde Lösung (4.13) nennt man auch eine verallgemeinerte Lösung zu dem Cauchy Anfangwertproblems (A.1). Unter stärkeren Regularitätsannahmen an die rechte Seite  $f$  kann man sicherstellen, dass die milde Lösung eine klassische Lösung im Sinne ( $w(t) \in C([0, T]; \mathcal{D}(\mathcal{A})) \cap C^1([0, T]; X)$ ) von (A.1) ist (nach [88, Kapitel 12]).

Der zentrale Existenzsatz, den wir für unsere Zwecke verwenden wollen, soll im nachstehenden Theorem formuliert werden.

**Theorem 4.3.3** (Theorem von Stone).

Der Operator  $\mathcal{A}$  ist der infinitesimale Generator der  $C_0$ -Gruppe von unitären Operatoren in einem Hilbertraum  $H$  genau dann, wenn  $i\mathcal{A}$  selbst-adjungiert ist.

**Bemerkung 4.3.4.** Somit lässt sich mit **Stone's Theorem** über die Selbstadjungiertheit von  $i\mathcal{A}$  die Existenz von  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{A}^*$  als infinitesimale Generatoren von  $C_0$ -Halbgruppen beweisen.

**Bemerkung 4.3.5.** Der Beweis von Theorem 4.3.3 ist in [85, Theorem 10.8] gegeben.

Wir definieren

**Definition 4.3.6** (Cauchy-Problem).

Betrachten wir den unbeschränkten, linearen Operator  $\mathcal{A}$  der durch

$$\mathcal{A} : X \times X \rightarrow X \times X, \quad \mathcal{A} := \begin{pmatrix} 0 & -\text{curl} \\ \text{curl} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

gegeben sein soll (im Folgenden auch **Maxwell Operator** genannt). Dessen Domäne ist definiert als  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) := \mathbb{H}_{\text{curl}}^\Gamma$ , wobei

$$\mathbb{H}_{\text{curl}}^\Gamma := \{\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2) \in H(\text{curl}; \Omega) \times H(\text{curl}; \Omega) : \gamma_t(\mathbf{V}_1) = 0\}. \quad (4.15)$$

Das zu den Maxwell Gleichungen in  $(\tilde{P})$  gehörige Cauchy Anfangswertproblem ist von folgender Gestalt

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A} \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{pmatrix} &= \mathbf{j} \quad \text{a.e. in } (0, T) \\ \begin{pmatrix} \mathbf{E}(0) \\ \mathbf{B}(0) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\} \quad (4.16)$$

$$\text{mit } \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) := \begin{pmatrix} -q\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

**Bemerkung 4.3.7.** Der Raum  $H_{\text{curl}}^{\Gamma}$  ist als abgeschlossener Unterraum (da der Spuoperator stetig ist nach Theorem 4.2.6 (ii)) des Hilbertraums  $H(\text{curl}; \Omega) \times H(\text{curl}; \Omega)$ , wiederum ein Hilbertraum.

**Bemerkung 4.3.8.** In unserem Cauchy Anfangswertproblem (4.16) finden die Divergenzgleichungen (3.2c) der Maxwell Gleichungen (3.2) keine Berücksichtigung. Allerdings ist es auch in diesem 'setting' möglich -analog zu Lemma 3.2.5- die Divergenzgleichungen als Folgerung aus den übrigen Gleichungen herzuleiten. Dabei müssen Anfangswerte  $\text{div } \mathbf{B}(\mathbf{x}, 0) = 0$  und  $\text{div } \mathbf{E}(\mathbf{x}, 0) = \rho(\mathbf{x}, 0)$  in einem geeigneten Sinne vorgegeben werden, vergleiche dazu auch [27, Kapitel XVII, B, §4].

**Bemerkung 4.3.9.** Der Operator  $\mathcal{A}$  ist linear, unbeschränkt, abgeschlossen und dicht in  $X$ . Ein Beweis dieser Aussage ist in Lemma 4.3.17 gegeben.

**Bemerkung 4.3.10.** Berücksichtigt man die physikalischen Konstanten  $\epsilon, \mu$  so muss man für den Hilbertraum  $X$  ein gewichtetes Skalarprodukt der Form

$$((\mathbf{E}, \mathbf{B}), (\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{B}}))_{X \times X} := (\epsilon \mathbf{E}, \hat{\mathbf{E}})_X + (\mu \mathbf{B}, \hat{\mathbf{B}})_X, \quad \forall (\mathbf{E}, \mathbf{B}), (\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{B}}) \in X \times X.$$

verwenden. Dies führt auf die gewichtete Norm

$$\|(\mathbf{E}, \mathbf{B})\|_{X \times X} := ((\epsilon \mathbf{E}, \mathbf{E})_X + (\mu \mathbf{B}, \mathbf{B})_X)^{\frac{1}{2}} \quad \forall (\mathbf{E}, \mathbf{B}) \in X \times X.$$

Der Maxwell Operator ergibt sich dann zu

$$\mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \rightarrow X \times X, \quad \mathcal{A} := \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -\text{curl} \\ \text{curl} & 0 \end{pmatrix}.$$

Mit Hilfe von den gewichteten Hilberträumen kann die in diesem Kapitel vorgestellte Analysis analog ausgeführt werden. Als Referenz hierfür sei [16] angegeben.

**Definition 4.3.11** (Halbgruppenoperator der Maxwell Gleichungen).

Man definiert den Halbgruppenoperator und dessen Komponenten als

$$\mathcal{G}(t) : X \times X \rightarrow X \times X, \quad \mathcal{G}(t) := \begin{pmatrix} \mathcal{E}(t) \\ \mathcal{B}(t) \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Die Lösung von (4.16) werden wir milde Lösungen nennen im Sinne von

**Definition 4.3.12** (Milde Lösung der Maxwell Gleichungen).

Seien  $\begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \in X \times X$  und  $\mathbf{j} \in L^1(0, T; X)^2$  gegeben. Dann nennen wir die Funktion  $\begin{pmatrix} \mathbf{E} \\ \mathbf{B} \end{pmatrix} \in C([0, T]; X)^2$  mit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{pmatrix} = \mathcal{G}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} + \int_0^t \mathcal{G}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) d\tau \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4.18)$$

**milde Lösung** des Cauchy Problems (4.16) in  $[0, T]$ .

**Bemerkung 4.3.13.** *Unter der Annahme, dass  $\begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ ,  $\mathbf{j} \in C([0, T]; X)^2$  und dass entweder die Bedingung  $\mathbf{j} \in W^{1,1}(0, T; X)$  oder die folgende Bedingung  $\mathbf{j} \in L^1(0, T; \mathcal{D}(\mathcal{A}))$  erfüllt ist, ist die milde Lösung von (4.16) eine klassische Lösung (siehe Remark 4.3.2). Der Beweis findet sich in [88, Theorem 12.16]. Diese Argumentation wird z.B. auch in [16, Theorem 3.8] verwendet.*

Man benötigt für den Operator  $\mathcal{A}$ , den adjungierten Operator von  $\mathcal{A}$  und dessen Domäne, die Formeln der partiellen Integration, jedoch nicht in ihrer üblichen bekannten Form mit Regularitäten von  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$ . Die Formeln der partiellen Integration lassen sich auch für Funktionen aus  $H(\text{curl}; \Omega)$  und  $H_{\text{curl}}^\Gamma$  formulieren.

**Lemma 4.3.14.** *Es gelten folgende verallgemeinerten Greenschen Formeln*

- (1) *Für alle Elemente  $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2) \in H(\text{curl}; \Omega)^2$ ,  $(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)^2$  gilt*

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\text{curl } \mathbf{Y}_2 \\ \text{curl } \mathbf{Y}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{W}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \text{curl } \mathbf{W}_2 \\ -\text{curl } \mathbf{W}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} - \langle \gamma_t \mathbf{W}_2, \gamma_\tau \mathbf{Y}_1 \rangle_\Gamma + \langle \gamma_t \mathbf{W}_1, \gamma_\tau \mathbf{Y}_2 \rangle_\Gamma. \end{aligned} \quad (4.19)$$

*Man versteht hierbei  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Gamma$  als die duale Paarung zwischen  $H^{-1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$  und  $H^{1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$ ,  $\gamma_\tau : H^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow H^{1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$  ist der standardmäßige Spuroperator (Theorem 4.2.5), und es gelte*

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix} := \langle \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1 \rangle_{\mathbb{R}^3} + \langle \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2 \rangle_{\mathbb{R}^3} \quad \forall \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2 \in \mathbb{R}^3.$$

- (2) *Für alle Elemente  $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2), (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H_{\text{curl}}^\Gamma$  lässt sich die Formel wie folgt vereinfachen*

$$\int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\text{curl } \mathbf{Y}_2 \\ \text{curl } \mathbf{Y}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{W}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \text{curl } \mathbf{W}_2 \\ -\text{curl } \mathbf{W}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x}. \quad (4.20)$$

**Beweis.** Wir beweisen zunächst den ersten Teil der Aussage. Für hinreichend glatte Funktionen  $\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\mu} \in C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$  gilt die folgende Greensche Formel für die Rotation

$$\int_{\Omega} \text{curl } \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\mu} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\omega} \cdot \text{curl } \boldsymbol{\mu} d\mathbf{x} - \int_{\Gamma} (\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{n}_\Gamma) \cdot \boldsymbol{\omega} ds, \quad (4.21)$$

Im nächsten Schritt nutzen wir die Dichtheit von  $C^1(\bar{\Omega}; \mathbb{R}^3)$  in  $H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$  ([2, Theorem 3.22]) und in  $H(\text{curl}; \Omega)$  aus. Mit Hilfe des oben eingeführten Spuroperators  $\gamma_\tau$  (siehe Theorem 4.2.5) können wir in Formel (4.21) zur Grenze übergehen und man erhält

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{curl } \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\mu} d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\omega} \cdot \text{curl } \boldsymbol{\mu} d\mathbf{x} - \langle \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{n}_\Gamma, \gamma_\tau \boldsymbol{\omega} \rangle_\Gamma \\ &\quad \forall \boldsymbol{\omega} \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3), \boldsymbol{\mu} \in H(\text{curl}; \Omega). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Seien  $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2) \in H(\text{curl}; \Omega)^2$  und  $(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)^2$  beliebig gewählt. Durch Einsetzen von  $\mathbf{W}_1$  bzw.  $\mathbf{W}_2$  für  $\boldsymbol{\mu}$  und  $\mathbf{Y}_2$  bzw.  $\mathbf{Y}_1$  für  $\boldsymbol{\omega}$  ergeben sich die Gleichungen

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{curl } \mathbf{Y}_2 \cdot \mathbf{W}_1 d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \mathbf{Y}_2 \cdot \text{curl } \mathbf{W}_1 - \langle \gamma_t \mathbf{W}_1, \gamma_\tau \mathbf{Y}_2 \rangle_\Gamma \\ \int_{\Omega} \text{curl } \mathbf{Y}_1 \cdot \mathbf{W}_2 d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \mathbf{Y}_1 \cdot \text{curl } \mathbf{W}_2 - \langle \gamma_t \mathbf{W}_2, \gamma_\tau \mathbf{Y}_1 \rangle_\Gamma \\ &\quad \forall (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)^2, (\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2) \in H(\text{curl}; \Omega)^2. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Die Subtraktion beider obiger Gleichungen (4.23) führt somit zu folgendem Resultat

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\operatorname{curl} \mathbf{Y}_2 \\ \operatorname{curl} \mathbf{Y}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{W}_1 \\ \mathbf{W}_2 \end{pmatrix} dx \\ &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \mathbf{W}_2 \\ -\operatorname{curl} \mathbf{W}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \end{pmatrix} dx + \langle \gamma_t \mathbf{W}_1, \gamma_{\tau} \mathbf{Y}_2 \rangle_{\Gamma} - \langle \gamma_t \mathbf{W}_2, \gamma_{\tau} \mathbf{Y}_1 \rangle_{\Gamma}, \end{aligned}$$

das somit die erste Aussage des Lemmas für alle

$$(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2) \in H(\operatorname{curl}; \Omega)^2, (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)^2$$

zeigt. Den zweiten Teil des Lemmas beweisen wir wie folgt.

Seien hierzu  $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2), (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \in H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$  beliebig, also vevknüpft mit der Eigenschaft, dass  $\mathbf{W}_1 \times \mathbf{n}_{\Gamma} = \mathbf{Y}_1 \times \mathbf{n}_{\Gamma} = 0$ . Dann folgt aus (4.22)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \operatorname{curl} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{W}_1 dx &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\omega} \cdot \operatorname{curl} \mathbf{W}_1 dx \quad \forall \boldsymbol{\omega} \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \\ \text{und} \quad \int_{\Omega} \operatorname{curl} \boldsymbol{\vartheta} \cdot \mathbf{Y}_1 dx &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\vartheta} \cdot \operatorname{curl} \mathbf{Y}_1 dx \quad \forall \boldsymbol{\vartheta} \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3). \end{aligned}$$

Die Dichtheit von  $H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$  in  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$  garantiert die Gültigkeit der Gleichungen in  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$  (für alle  $\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\vartheta} \in H(\operatorname{curl}; \Omega)$ ). Also dürfen wir für  $\boldsymbol{\omega} = \mathbf{Y}_2$  und für  $\boldsymbol{\vartheta} = \mathbf{W}_2$  wählen. Ein Addieren der entstehenden Gleichung ergibt (4.20). Folglich sind die Formeln der partiellen Integration für den curl-Operator gezeigt.  $\square$

**Bemerkung 4.3.15.** *Aus der gültigen Abschätzung*

$$\|\mathbf{W} \times \mathbf{n}_{\Gamma}\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma; \mathbb{R}^3)} \leq \tilde{c} \|\mathbf{W}\|_{H(\operatorname{curl}; \Omega)} \quad \forall \mathbf{W} \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3),$$

deren Beweis man z.B. in Dautray/Lions [28, Kapitel IX, A, §1] findet, folgt sofort

$$\|\gamma_t \mathbf{W}\|_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma; \mathbb{R}^3)} \leq \tilde{c} \|\mathbf{W}\|_{H(\operatorname{curl}; \Omega)} \quad \forall \mathbf{W} \in H(\operatorname{curl}; \Omega),$$

aufgrund der Tatsache, dass  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  dicht in  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$  liegt (siehe hierzu auch Theorem 4.2.6 (ii)).

**Bemerkung 4.3.16.** *Auch für den Divergenz Operator, kann man folgende verallgemeinerte Greensche Formel beweisen:*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{Y} W dx &= - \int_{\Omega} \mathbf{Y} \cdot \nabla W + \langle \gamma_n \mathbf{Y}, \gamma_{\tau} W \rangle_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma), H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \\ &\quad \forall \mathbf{Y} \in H(\operatorname{div}; \Omega), W \in H^1(\Omega) \end{aligned}$$

mit Hilfe der Dichtheit von  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  in  $H(\operatorname{div}; \Omega)$  nach Theorem 4.2.6 (iii).

**Lemma 4.3.17.** *Der Operator  $\mathcal{A}$  ist linear, dicht in  $X \times X$  und abgeschlossen.*

**Beweis.** Die Linearität des Operator  $\mathcal{A}$  folgt aus der Struktur des Operators und damit aus der Struktur und der Linearität des curl-Operators. Die Domäne von  $\mathcal{A}$  lässt sich auch als

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) = H_0(\operatorname{curl}; \Omega) \times H(\operatorname{curl}; \Omega)$$

mit  $H_0(\operatorname{curl}; \Omega) := \{\mathbf{V}_1 \in H(\operatorname{curl}; \Omega) : \gamma_t(\mathbf{V}_1) = 0\}$  schreiben. Dabei ist der Raum  $H_0(\operatorname{curl}; \Omega)$  der Abschluss von  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$  in  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$ . Es gilt die Inklusion  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^6) \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$ . Mit der Dichtheit von  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^6)$  in  $X \times X$  (nach Adams [2, Korollar 2.30]) folgt hieraus, dass  $\mathcal{D}(\mathcal{A})$  dicht in  $X \times X$  liegt.

Um die Abgeschlossenheit von  $\mathcal{A}$  zu zeigen, seien  $(\mathbf{V}_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$  mit  $\mathbf{V}_n \rightarrow \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{pmatrix}$  in  $X \times X$  und  $\mathcal{A} \mathbf{V}_n \rightarrow (\boldsymbol{\omega}_1, \boldsymbol{\omega}_2)$  in  $X \times X$  für  $n \rightarrow \infty$ . Dann gilt wegen

(4.20) für alle  $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$ , dass

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} dx &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \mathcal{A}V_n \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} dx \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\operatorname{curl} \mathbf{V}_2^{(n)} \\ \operatorname{curl} \mathbf{V}_1^{(n)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} dx \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1^{(n)} \\ \mathbf{V}_2^{(n)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \varphi_2 \\ -\operatorname{curl} \varphi_1 \end{pmatrix} dx \\ &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \varphi_2 \\ -\operatorname{curl} \varphi_1 \end{pmatrix} dx. \end{aligned}$$

Auf Grund der Beliebigkeit von  $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)$ , erhalten wir dass  $\operatorname{curl} \mathbf{V}_1 \in X$ ,  $\operatorname{curl} \mathbf{V}_2 \in X$  (Definition der schwachen Rotation) und somit dass  $\mathbf{V} \in H(\operatorname{curl}; \Omega)^2$  gilt, wobei  $\omega_1 = -\operatorname{curl} \mathbf{V}_2$  und  $\omega_2 = \operatorname{curl} \mathbf{V}_1$  sind, also  $\mathcal{A}\mathbf{V} = (\omega_1, \omega_2)^\top$ . Darüber hinaus, folgt aus  $\mathbf{V}_n \rightarrow \mathbf{V}$  und  $\mathcal{A}\mathbf{V}_n \rightarrow (\omega_1, \omega_2) = \mathcal{A}\mathbf{V}$  für  $n \rightarrow \infty$ , dass die erste Komponente  $\mathbf{V}_1^{(n)} \rightarrow \mathbf{V}_1$  in  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$  konvergiert. Somit gilt  $\mathbf{V}_1 \times \mathbf{n}_\Gamma = 0$  wegen der Stetigkeit der Tangentialspur von  $H(\operatorname{curl}; \Omega)$  nach  $H^{-1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$  (nach dem Spursatz angegeben in Theorem 4.2.6 (ii)). Es folgt, dass

$$\gamma_t(\mathbf{V}_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_t(\mathbf{V}_1^{(n)}) = 0,$$

da  $\mathbf{V}_n \in H_{\operatorname{curl}}^\Gamma$ . Somit ist also gezeigt, dass  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = H_{\operatorname{curl}}^\Gamma$ .  $\square$

### Adjungierter Generator und Domäne.

Wir definieren den adjungierten Operator eines unbeschränkten Operators wie folgt (wobei  $X \times X = L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)^2$  ein Hilbertraum ist)

**Definition 4.3.18** (Adjungierter Generator im Hilbertraum). *Sei  $\mathcal{A} : X \times X \rightarrow X \times X$  ein unbeschränkter Operator mit dichter Domäne. Wir definieren die Menge*

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) := \{\mathbf{V} \in X \times X : \exists c_{\mathbf{V}} > 0 \text{ sodass } |(\mathcal{A}\mathbf{U}, \mathbf{V})_X| \leq c_{\mathbf{V}} \|\mathbf{U}\|_X \ \forall \mathbf{U} \in \mathcal{D}(\mathcal{A})\}$$

*Falls  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$ , dann kann, aufgrund der Dichtheit von  $\mathcal{D}(\mathcal{A})$ , das lineare Funktional  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \ni \mathbf{U} \mapsto (\mathcal{A}\mathbf{U}, \mathbf{V})_X \in \mathbb{R}$  erweitert werden zu einem eindeutigen  $\mathbf{W} \in X \times X$  so dass  $(\mathcal{A}\mathbf{U}, \mathbf{V})_X = (\mathbf{U}, \mathbf{W})_X$  für alle  $\mathbf{U} \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$  gilt. Man bezeichnet die Abbildung  $\mathcal{A}^* : \mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \rightarrow X \times X$ ,  $\mathcal{A}^* : \mathbf{V} \mapsto \mathbf{W}$  als adjungierter Operator zu  $\mathcal{A}$ , und wir nennen  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  dessen Domäne.*

**Bemerkung 4.3.19.** *Es gilt somit nach der Definition 4.3.18, dass*

$$(\mathbf{U}, \mathcal{A}^*\mathbf{V})_X = (\mathcal{A}\mathbf{U}, \mathbf{V})_X \quad \forall \mathbf{U} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*). \quad (4.24)$$

**Lemma 4.3.20.** *Der adjungierte Operator zum Operator  $\mathcal{A}$ , dessen Definition man in Definition 4.3.6 wiederfindet ist gegeben durch*

$$\mathcal{A}^* : X \times X \rightarrow X \times X, \quad \mathcal{A}^* := \begin{pmatrix} 0 & \operatorname{curl} \\ -\operatorname{curl} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

*Seine Domäne lässt sich wiederum schreiben als  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = H_{\operatorname{curl}}^\Gamma$ .*

**Beweis.** Der adjungierte Operator zu  $\mathcal{A}$  ist wohl definiert. Dies wird durch die Dichtheit von  $\mathcal{D}(\mathcal{A})$  in  $X \times X$  sichergestellt, was in Lemma 4.3.17 bewiesen wurde. Man zeigt zunächst, dass  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subset H(\operatorname{curl}; \Omega) \times H(\operatorname{curl}; \Omega)$  und  $\mathcal{A}^*$  durch (4.25) gegeben ist.

Sei  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  beliebig. Setzen wir nun in (4.24) beliebige Testfunktionen  $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2) \in \mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)^2 \subset \mathcal{D}(\mathcal{A})$  ein, so gilt

$$\int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\operatorname{curl} \varphi_2 \\ \operatorname{curl} \varphi_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} = (\mathcal{A}\varphi, \mathbf{V})_X = (\varphi, \mathcal{A}^*\mathbf{V})_X = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (\mathcal{A}^*\mathbf{V})_1 \\ (\mathcal{A}^*\mathbf{V})_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x}.$$

Da  $\varphi$  beliebig ist, erhält man nach Definition des schwachen curl-Operators (Definition 4.2.3)

$$\begin{aligned} \operatorname{curl} \mathbf{V}_1 &= -(\mathcal{A}^*\mathbf{V})_2 \in X \\ \operatorname{curl} \mathbf{V}_2 &= (\mathcal{A}^*\mathbf{V})_1 \in X \end{aligned}$$

und somit  $\mathbf{V} \in H(\operatorname{curl}; \Omega)^2$ . Da  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  beliebig war, ist somit die Form von  $\mathcal{A}^*$ , wie in (4.25) angegeben, bewiesen. Hiermit ist nun  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subset H(\operatorname{curl}; \Omega)^2$  gezeigt.

Es bleibt noch zu zeigen, dass  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$  gilt. Um dies zu sehen, beweisen wir zuerst die Inklusion  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subseteq H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$ . Wir wissen, dass  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subset H(\operatorname{curl}; \Omega)^2$ , somit bleibt zu zeigen, dass auch die Randbedingung erfüllt ist. Seien hierzu  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  und  $\varphi \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3)$  beliebig. Der Tatsache geschuldet, dass  $\mathbf{V} \in H(\operatorname{curl}; \Omega)^2$  ist, dürfen wir  $\mathbf{W} = \mathbf{V}$  mit  $\mathbf{Y}_1 \equiv 0$  und  $\mathbf{Y}_2 = \varphi$  in (4.19) einsetzen und erhalten

$$\begin{aligned} \left( \mathcal{A} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix}, \mathbf{V} \right)_X &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\operatorname{curl} \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \mathbf{V}_2 \\ -\operatorname{curl} \mathbf{V}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix} d\mathbf{x} + \langle \gamma_t \mathbf{V}_1, \gamma_{\tau} \varphi \rangle_{\Gamma} \\ &= \left( \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix}, \mathcal{A}^*\mathbf{V} \right)_X + \langle \gamma_t \mathbf{V}_1, \gamma_{\tau} \varphi \rangle_{\Gamma} \\ &= \left( \mathcal{A} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi \end{pmatrix}, \mathbf{V} \right)_X + \langle \gamma_t \mathbf{V}_1, \gamma_{\tau} \varphi \rangle_{\Gamma}. \end{aligned}$$

Hierbei wurde für die letzte Gleichung die Eigenschaft (4.24) ausgenutzt, da offensichtlich  $(0, \varphi) \in H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma} = \mathcal{D}(\mathcal{A})$  gilt. Als Resultat ergibt sich somit

$$\langle \gamma_t \mathbf{V}_1, \gamma_{\tau} \varphi \rangle_{\Gamma} = 0 \quad \forall \varphi \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^3).$$

Weil  $\gamma_{\tau} : H^1(\Omega; \mathbb{R}^3) \rightarrow H^{1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$  surjektiv ist, siehe hierzu z. B. Theorem 4.2.5, folgt dass

$$\langle \gamma_t \mathbf{V}_1, \psi \rangle_{\Gamma} = 0 \quad \forall \psi \in H^{1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)$$

und somit gilt  $\gamma_t \mathbf{V}_1 = \mathbf{V}_1 \times \mathbf{n}_{\Gamma} = 0$  in  $H^{1/2}(\Gamma; \mathbb{R}^3)^*$ . Deshalb gilt  $\mathbf{V} \in H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$ . Da  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  beliebig gewählt war, ist die Inklusion  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subseteq H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$  gezeigt.

Es bleibt noch die umgekehrte Inklusion  $H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma} \subseteq \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  zu beweisen. Sei  $\mathbf{V} \in H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$  beliebig. Dann impliziert (4.20) für jedes  $\mathbf{U} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) = H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$  folgende Abschätzung

$$\begin{aligned} |(\mathcal{A}\mathbf{U}, \mathbf{V})_X| &= \left| \int_{\Omega} \begin{pmatrix} -\operatorname{curl} \mathbf{U}_2 \\ \operatorname{curl} \mathbf{U}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1 \\ \mathbf{V}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} \right| = \left| \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \mathbf{V}_2 \\ -\operatorname{curl} \mathbf{V}_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \mathbf{U}_2 \end{pmatrix} d\mathbf{x} \right| \\ &\leq \left\| \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \mathbf{V}_2 \\ -\operatorname{curl} \mathbf{V}_1 \end{pmatrix} \right\|_X \|\mathbf{U}\|_X, \end{aligned}$$

die der Abschätzung in der Definition der Domäne von  $\mathcal{A}^*$  mit  $c_{\mathbf{V}} = \left\| \begin{pmatrix} \operatorname{curl} \mathbf{V}_2 \\ -\operatorname{curl} \mathbf{V}_1 \end{pmatrix} \right\|_X$  entspricht. Also gilt, dass  $\mathbf{V} \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  liegt. Fassen wir das Gezeigte zusammen, so erhält man, dass

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = H_{\operatorname{curl}}^{\Gamma}$$

gilt. □

**Bemerkung 4.3.21.** Aus Lemma 4.3.20 folgt für den infinitesimalen Generator  $\mathcal{A}$ , dass Formel (4.24) die partielle Integrationsformel (4.20) repräsentiert.

**Lemma 4.3.22.** *Es gilt, dass  $i\mathcal{A}$  selbst-adjungiert ist.*

**Beweis.** Nach Lemma 4.3.20 sind die Domänen  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) = \mathbb{H}_{\text{curl}}^\Gamma = \mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  identisch. Der Operator  $\mathcal{A}$  liegt dicht in  $X$  und es gilt nach Gleichungen (4.14) und (4.25)

$$\mathcal{A} = -\mathcal{A}^*.$$

Hieraus erhält man, dass  $i\mathcal{A} = i(-\mathcal{A}^*) = (i\mathcal{A})^*$  seine Gültigkeit hat. Somit ist  $i\mathcal{A}$  selbst-adjungiert.  $\square$

**Bemerkung 4.3.23.** *Nach Theorem 4.3.3 ist somit  $-\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator der  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)$  gegeben in Gleichung (4.17). Es gilt jedoch noch mehr. Betrachte hierfür Theorem 4.3.26.*

**Bemerkung 4.3.24.** *In der Literatur findet sich der Existenzbeweis des Maxwell Operators in den Büchern [27, 28] von Dautray und Lions. Hierin wird gezeigt, dass für eine offene, beschränkte Menge  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  mit regulärem Rand  $\Gamma$ , der Operator  $-\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator einer unitären  $C_0$ -Gruppe  $\mathcal{G}(t) \in X \times X$  ist. Der Operator  $i\mathcal{A}$  ist selbst-adjungiert. Der Beweis findet sich in Dautray/Lions [28, Kapitel IXA §1 Theorem 1] und [28, Kapitel IXA §1 Theorem 2] wieder. Die Resultate sind in [27, Kapitel XVII B §4] zusammengefasst.*

Halten wir uns das Cauchy Problem (4.16) vor Augen, so existiert eine milde Lösung der Maxwell Gleichungen und folgendes Theorem hat seine Gültigkeit:

**Theorem 4.3.25.** *Es existiert eine eindeutige milde Lösung  $U(t)$  von (4.16), und folgende a priori Abschätzung*

$$\|(\mathbf{E}(t), \mathbf{B}(t))^\top\|_{C([0,T]; X \times X)} \leq c_M (\|(\mathbf{E}(0), \mathbf{B}(0))^\top\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}\|_{L^1(0,T; X \times X)}) \quad (4.26)$$

hat ihre Gültigkeit mit  $c_M = Me^{\omega T}$  und  $M \geq 1, \omega \geq 0$ .

**Beweis.** Nach Definition 4.3.12, Lemma 4.3.22 und Bemerkung 4.3.23 existiert  $U(t)$ , die milde Lösung von (4.16). Es gilt für  $U(t)$  die milde Lösungsformel (4.18) und nach dem Einsetzen in die Norm erhält man

$$\begin{aligned} \|U(t)\|_{C([0,T]; X \times X)} &\leq \max_{t \in [0,T]} \|\mathcal{G}(t)U_0\|_{X \times X} + \max_{t \in [0,T]} \int_0^t \|\mathcal{G}(t-\tau)\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau)\|_{X \times X} d\tau \\ &\leq \max_{t \in [0,T]} (\|\mathcal{G}(t)\|_{\mathcal{L}(X \times X, X \times X)}) \|U_0\|_{X \times X} \\ &\quad + \max_{t \in [0,T]} \left\{ \max_{\tau \in [0,t]} \|\mathcal{G}(\tau)\|_{\mathcal{L}(X \times X, X \times X)} \int_0^\tau \|\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau)\|_{X \times X} d\tau \right\} \\ &\leq \max_{t \in [0,T]} Me^{\omega t} \|U_0\|_{X \times X} + \max_{t \in [0,T]} Me^{\omega t} \|\mathbf{j}\|_{L^1(0,t; X \times X)} \\ &\leq Me^{\omega T} (\|U_0\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}\|_{L^1(0,T; X \times X)}) \\ &= c_M (\|U_0\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}\|_{L^1(0,T; X \times X)}) \end{aligned}$$

mit  $c_M = Me^{\omega T}$ . Hierbei nutzen wir die Beschränktheit der  $C_0$ -Halbgruppe. Es gilt nach Theorem A.0.3

$$\|\mathcal{G}(t)\|_{\mathcal{L}(X \times X, X \times X)} \leq Me^{\omega t} \quad \forall t \in [0, T]$$

mit  $M \geq 1, \omega \geq 0$ . Außerdem nutzen wir die Regularität der Daten  $U_0 \in X \times X$  und  $\mathbf{j} \in L^1(0, T; X \times X)$ .  $\square$

**Theorem 4.3.26.** *Sei  $\mathcal{A}$  der lineare, abgeschlossene und in der Menge  $X$  dicht liegende unbeschränkte Maxwell-Operator. Dann gilt zusätzlich zu Theorem 4.3.25 folgende Aussage:*

Der adjungierte Operator  $\mathcal{A} : X \times X \rightarrow X \times X$  ist der adjungierte, infinitesimale Generator zur  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)^*$ ,  $0 \leq t \leq T$ .

**Beweis.** Wir wenden für den Nachweis der Aussagen den Satz von Stone (Theorem 4.3.3) an. Die Voraussetzung, dass  $X$  ein Hilbertraum darstellt ist erfüllt. Nach Lemma 4.3.22 ist  $i\mathcal{A}$  selbst-adjungiert. Daher gilt nach Stone's Theorem 4.3.3, dass  $-\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator einer  $C_0$ -Gruppe  $\tilde{\mathcal{G}}(t)$ ,  $-\infty < t < \infty$  von unitären Operatoren ( $\tilde{\mathcal{G}}(t)^{-1} = \tilde{\mathcal{G}}(-t) = \tilde{\mathcal{G}}(t)^*$ ) in  $X$  ist. Wir erhalten, unter Benutzung von Bemerkung A.0.8, dass wir die  $C_0$ -Gruppe  $\tilde{\mathcal{G}}(t)$  schreiben können als

$$\tilde{\mathcal{G}}(t) = \begin{cases} \tilde{\mathcal{G}}_+(t), & t \geq 0 \\ \tilde{\mathcal{G}}_-(-t), & t \leq 0 \end{cases}$$

wobei  $-\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator der  $C_0$ -Halbgruppe  $\tilde{\mathcal{G}}_+(t)$  bzw.  $\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator der  $C_0$ -Halbgruppe  $\tilde{\mathcal{G}}_-(t)$  ist. Definieren wir uns nun  $\mathcal{G}(t) := \tilde{\mathcal{G}}_+(t)$ ,  $0 \leq t \leq T$ , so ist (i) gezeigt. Mit der Wahl von  $\mathcal{G}(-t) := \tilde{\mathcal{G}}_-(-t)$  folgt, dass  $-\mathcal{A}^*$  der infinitesimale Generator der  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)^*$ ,  $0 \leq t \leq T$  ist, da nach Lemma 4.3.20  $\mathcal{A} = -\mathcal{A}^*$  und nach Definition eines unitären Operators  $\mathcal{G}(-t) = \mathcal{G}(t)^*$  gilt.  $\square$

#### 4.3.2. Diskussion der Newton-Lorentz-Gleichungen.

Durch die Definition des Vektorpotentials  $b$  in Kapitel 4.1.3 und durch die geringe Regularität des Zustands  $\eta$  erzwungen, wurde die Impuls Gleichung der Newton-Lorentz-Gleichung in (4.2) mit Hilfe der Formel der partiellen Integration in Formel (4.6) umformuliert.

**Bemerkung 4.3.27.** Die Existenz und die Eindeutigkeit einer Lösung, des nicht mit der Maxwell Gleichung gekoppelten ODE-System, welches in  $(\tilde{P})$  gegeben ist, für sich alleine genommen, folgt über die globale Lipschitz Stetigkeit der rechten Seite der relativistischen Bewegungsgleichungen und mittels des Existenzsatzes von Picard Lindelöf. Man erhält stetig differenzierbare Lösungen.

#### 4.3.3. Diskussion der Poisson-Gleichung.

Wenden wir uns nun der zweiten Komponente unseres Zustandssystems zu. Eine ausführliche Behandlung elliptischer partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung findet sich in [40] von Trudinger und Gilbarg wieder. Beachten wir nun, dass wir nicht die nötige Regularität des Skalarpotentials haben, um die Poisson Gleichung in ihrer starken Formulierung respektive in ihrer schwachen Formulierung zu schreiben, so werden wir im Folgenden deren Lösung definieren als

**Definition 4.3.28** (Sehr schwache Lösung der Poisson-Gleichung).

Wir nennen  $\eta^* \in L^2(\Omega)$  für ein beliebiges  $u^* \in L^2(\Gamma)$  eine **sehr schwache Lösung** von (4.5), falls  $\eta^*$  die sehr schwache Formulierung

$$-\int_{\Omega} \eta^* \Delta h \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} u^* \cdot \partial_n h \, d\varsigma = 0 \quad \forall h \in \mathcal{H} \quad (4.27)$$

mit der Normalenableitung  $\partial_n h := \mathbf{n} \cdot \nabla h \in L^2(\Gamma)$  von  $h$  löst. Hierbei ist  $\mathcal{H}$  in Definition 4.2.15 definiert ein Hilbertraum.

**Theorem 4.3.29.** Für jedes  $u^* \in L^2(\Gamma)$  existiert eine eindeutige Lösung  $\eta^*$  von (4.27) und folgende a priori Abschätzung

$$\|\eta^*\|_{L^2(\Omega)} \leq \tilde{c} \|u^*\|_{L^2(\Gamma)} \quad (4.28)$$

gilt.

**Bemerkung 4.3.30.** Wir merken zunächst an, falls  $\eta^* \in H^1(\Omega)$  und  $\eta^* = u^*$  auf dem Rand  $\Gamma$  wäre, dann folgt aus (4.27) unter Anwendung der Formel der partiellen Integration

$$\int_{\Omega} \nabla \eta^* \cdot \nabla h \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall h \in \mathcal{H}.$$

Wegen der Dichtheit von  $\mathcal{H}$  in  $H_0^1(\Omega)$  gilt somit obige Gleichung für alle  $h$  aus  $H_0^1(\Omega)$ . Damit folgt hieraus Formel (4.11) und  $\eta^*$  erfüllt die schwache Formulierung.

**Beweis.** Es gilt nach Annahme 4.2.17 (b) und dem Satz über die offene Abbildung [91, Korollar 2.12] ( $\mathcal{H}$  Banachraum), dass der inverse Laplace Operator und seine Adjungierte als lineare Abbildungen

$$-\Delta^{-1} \in \mathcal{L}(L^2(\Omega), \mathcal{H}) \text{ und } (-\Delta^*)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^*, L^2(\Omega)) \quad (4.29)$$

existieren. Definieren wir uns im Folgenden die Abbildung

$$\begin{aligned} R : L^2(\Gamma) &\rightarrow \mathcal{H}^*, \quad \text{mit} \\ \langle Ru^*, h \rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}} &:= - \int_{\Gamma} \partial_n h u^* \, d\zeta. \end{aligned} \quad (4.30)$$

So gilt für ein beliebiges  $u^* \in L^2(\Gamma)$ , dass  $Ru^* \in \mathcal{H}^*$ .

Die Wohldefiniertheit des Randintegrals ist durch die Tatsache sichergestellt, dass die Normalenableitung  $\partial_n h|_{\Gamma} = n \cdot \nabla h|_{\Gamma} \in L^2(\Gamma)$  liegt, da  $h \in \mathcal{H}$ . Somit ist die Abbildung  $R : L^2(\Gamma) \rightarrow \mathcal{H}^*$  linear und stetig, denn

$$\begin{aligned} \|Ru^*\|_{\mathcal{H}^*} &= \sup_{\|h\|_{\mathcal{H}}=1} |\langle Ru^*, h \rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}}| \leq \sup_{\|h\|_{\mathcal{H}}=1} \int_{\Gamma} |\partial_n h u^*| \, d\zeta \\ &\leq C \|u^*\|_{L^2(\Gamma)} \end{aligned}$$

unter Ausnutzung von (4.10) und des Spursatzes ([34, Kapitel 5.5, Theorem 1]), so dass gilt  $\|\partial_n h\|_{L^2(\Gamma)} \leq C \|h\|_{H^1(\Omega)} \leq C \|h\|_{\mathcal{H}}$ , wobei  $C$  von  $\Omega$  abhängt. Es folgt somit aus (4.29), dass für alle  $u^* \in L^2(\Gamma)$  ein  $\eta^* \in L^2(\Omega)$  existiert, sodass

$$\eta^* = (-\Delta^*)^{-1} Ru^* \quad (4.31)$$

und dies eine eindeutige Lösung von

$$\begin{aligned} (\eta^*, -\Delta h) &= ((-\Delta^*)^{-1} Ru^*, -\Delta h) \quad \forall h \in \mathcal{H} \\ &= \langle \Delta^* (-\Delta^*)^{-1} Ru^*, h \rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}} = \langle Ru^*, h \rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}} \quad \forall h \in \mathcal{H} \end{aligned}$$

und damit von

$$- \int_{\Omega} \eta^* \Delta h \, d\mathbf{x} = - \int_{\Gamma} \partial_n h u^* \, d\zeta \quad \forall h \in \mathcal{H}$$

ist. Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned} \|\eta^*\|_{L^2(\Omega)} &= \|(-\Delta^*)^{-1} Ru^*\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|(-\Delta^{-1})\|_{\mathcal{L}(L^2(\Omega), \mathcal{H})} \|Ru^*\|_{\mathcal{H}^*} \\ &\leq \|(-\Delta^{-1})\|_{\mathcal{L}(L^2(\Omega), \mathcal{H})} \|R\|_{\mathcal{L}(L^2(\Gamma), \mathcal{H}^*)} \|u^*\|_{L^2(\Gamma)} \\ &= \tilde{c} \|u^*\|_{L^2(\Gamma)}, \end{aligned}$$

wobei die Definition der Operatornorm des Adjungierten Operators verwendet wurde. Die Konstante  $\tilde{c} = \|(-\Delta^{-1})\|_{\mathcal{L}(L^2(\Omega), \mathcal{H})} \|R\|_{\mathcal{L}(L^2(\Gamma), \mathcal{H}^*)} > 0$  ist unabhängig von  $u^*$  und  $\eta^*$ .  $\square$

**Bemerkung 4.3.31.** Da die Lösung  $\eta^*$ , der oben beschriebenen Poisson Gleichung mit Dirichlet Randdaten, nur die Regularität von  $L^2(\Omega)$  besitzt, ist somit  $\nabla\eta^*$  (das externe Magnetfeld) nicht wohl definiert und i.A. nur eine Distribution. In den Newton-Lorentz Gleichungen behelfen wir uns damit den Ableitungsoperator, der ursprünglich auf  $\eta^*$  wirkt, auf die geglättete Delta-Distribution  $\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))$ , die in der Bestimmungsgleichung für das Momentum auftaucht, anzuwenden. Dies ist aufgrund der Tatsache, weil  $\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))$  ausreichend Regularität besitzt, machbar. Hierzu verwendet man die Formel der partiellen Integration, sodass nur  $\eta$  und  $u$  in der rechten Seite der Bewegungsgleichungen auftauchen.

#### 4.4. Diskussion des Zustandssystems.

Somit liest sich das Abraham Modell (4.2), bestehenden aus den im vorherigen Abschnitt 4.3 eingeführten Komponenten, als

**Maxwell Gleichungen:** (4.32)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A} \begin{pmatrix} \mathbf{E}(t) \\ \mathbf{B}(t) \end{pmatrix} &= \mathbf{j} \quad \text{a.e. in } (0, T) \\ \begin{pmatrix} \mathbf{E}(0) \\ \mathbf{B}(0) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

**Newton-Lorentz Gleichungen:**

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}}(t) &= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) [\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)] d\mathbf{x} \\ &\quad - q \int_{\Omega} \eta(\nabla(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t))) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))) d\mathbf{x} \\ &\quad + q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{n} d\varsigma \quad \text{in } [0, T] \end{aligned}$$

$$\dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \quad \text{in } [0, T]$$

$$\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0, \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0,$$

**Poisson Gleichung:**

$$- \int_{\Omega} \eta \Delta h d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} u \partial_n h d\varsigma = 0 \quad \forall h \in \mathcal{H}$$

darstellen, das wir im Folgenden als modifiziertes Abraham Modell bezeichnen werden. Unter Verwendung der Lösungsformel (4.18) der Maxwell Gleichungen (4.16), deren Komponenten und der Lösungsformel (4.31) der Poisson Gleichung (4.27), ergibt sich aus den relativistischen Bewegungsgleichungen (4.6) eine reduzierte Formulierung unseres Systems (4.32), welche wir im Folgenden mit  $e$  einführen und bezeichnen werden. Die semi-reduzierte Form hängt von den Zuständen  $\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)$  und der Randsteuerung  $u$  ab. Die Anfangsdaten  $\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0$  werden wir im nun Folgenden in die Zustände  $\mathbf{r}, \mathbf{p}$  mit aufnehmen.

**Definition 4.4.1** (Lösung des Zustandssystems).

Seien die Abbildung  $e, \mathbf{F}_L$  und  $\mathbf{j}$  wie folgt definiert:

(a) Der Zustandssystem Operator  $e$ :

$$\begin{aligned} e : C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \times L^2(\Gamma) &\rightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2, \\ e(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &:= \begin{pmatrix} e_1(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) \\ e_2(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

mit folgenden Komponenten

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_1(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &:= \dot{\mathbf{z}}(t) - q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \mathbf{F}_L(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, \mathbf{z} + \mathbf{p}_0)(t) \, d\mathbf{x} \\
&\quad + q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} Ru) \left[ \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \right] d\mathbf{x} \\
&\quad - q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \times \mathbf{n} \, d\zeta \\
\mathbf{e}_2(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &:= \dot{\mathbf{w}}(t) - \mathbf{v}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0).
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Der Raum  $C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathcal{X})$ , mit einem linear, normierten Raum  $\mathcal{X}$ , kennzeichnet alle in der Zeit stetig differenzierbaren Funktionen mit verschwindenden Werten an der Stelle  $t = 0$  (siehe Definition 2.1.1). Wir schreiben des Weiteren  $\mathbf{y} := (\mathbf{w}, \mathbf{z})^\top$ .

(b) Die Lorentzkraft  $\mathbf{F}_L$ :

$$\mathbf{F}_L : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; X)$$

gegeben durch

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\mathbf{x}, t) &:= \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) \\
&= \mathcal{E}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} + \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) \, d\tau \\
&\quad + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times (\mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} + \int_0^t \mathcal{B}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) \, d\tau),
\end{aligned}$$

wobei  $\mathcal{G}$  den in (4.18) eingeführte  $C_0$ -Halbgruppenoperator bezeichnet und dessen Komponenten durch  $\mathcal{E}$  und  $\mathcal{B}$  gegeben sind.

(c) Die elektrische Stromdichte  $\mathbf{j}$ :

$$\begin{aligned}
\mathbf{j} &: C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; X)^2, \\
\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\mathbf{x}, t) &:= \begin{pmatrix} -\frac{q}{c} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \\ 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Dann bezeichnen wir  $(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u) \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \times L^2(\Gamma)$  als Lösung des Zustandssystems, falls diese der Bedingung

$$\mathbf{e}(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u) = 0$$

genügen.

#### Bemerkung 4.4.2.

- (a) Man stellt fest, dass sowohl aufgrund der Regularitäten von  $\varphi$  in (4.1), als auch der Maxwell Lösungen in  $C([0, T]; X)$ , die Operatoren in die angegebenen Räume abbilden.
- (b) Zu beachten ist, dass sowohl die Maxwell Gleichungen als auch die Poisson Gleichung mittels der jeweiligen Lösungsoperatoren in die oben definierten Formulierungen eingehen.
- (c) Wir nennen deshalb  $\mathbf{e}(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u) = 0$  das reduzierte Zustandssystem. Da es nur von den Zuständen  $w, z$  und der Steuerung  $u$  abhängt.

#### 4.4.1. Aufstellung des Optimalsteuerproblems.

Nachdem im vorangegangenen Abschnitt die Lösungskonzepte der einzelnen Bestandteile eingeführt und diskutiert wurden, soll das nun folgende Kapitel dazu dienen das Optimierungsproblem rigoros aufzustellen.

Um eine bessere Übersicht über die verwendeten Variablen zu erlangen, gibt die Tabelle 4.1 ein Überblick über die Zustands-, Adjungierten- und weitere Variablen.

Variablen	Bedeutung
<u>Zustandsvariablen</u>	
$\mathbf{E}$	elektrische Feldstärke
$\mathbf{B}$	magnetische Flussdichte
$\mathbf{r}$	Position/Trajektorie des Partikels
$\mathbf{p}$	relativistische Impuls des Partikels
$\mathbf{y} := (\mathbf{r}, \mathbf{p})^\top$ bzw. $\mathbf{y} := (\mathbf{w}, \mathbf{z})^\top$	
$\eta$	Skalarpotential/ Lösung Poisson Gleichung
<u>Steuervariable</u>	
$u$	Randdaten der Poisson Gleichung
<u>Adjungierte Variablen</u>	
$\Phi$	adjungierte elektrische Feldstärke
$\Psi$	adjungierte magnetische Flussdichte
$\varrho$	adjungierte Partikel Position
$\pi$	adjungierte relativistischer Impuls
$\omega := (\varrho, \pi)^\top$	
$\chi$	adjungierte Poisson Lösung
$\mu$	Lagrangemultiplikator
<u>Weitere Variablen</u>	
$\mathbf{j}$	elektrischer Strom
$\rho$	Ladungsdichte
$\gamma$	Lorentzfaktor
$\mathbf{b}$	externes Magnetfeld
$e$	externes elektrisches Feld
$\varphi$	geglättete Delta-Distribution

TABELLE 4.1. Überblick über verwendete Variablen

Somit lässt sich das Optimierungsproblem mathematisch exakt unter Zuhilfenahme der reduzierten Form (4.33) wie folgt formulieren

$$\begin{aligned}
 & \min \mathcal{J}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, u) \\
 & \text{s.t. } \mathbf{w}, \mathbf{z} \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3), \\
 & \quad u \in L^2(\Gamma), \\
 & \quad e(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) = 0 \quad \forall t \in [0, T], \\
 & \quad g_i(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad \forall t \in [0, T]
 \end{aligned} \tag{P}$$

mit Zielfunktion  $\mathcal{J}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, u) := \int_0^T J_1(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) dt + J_2(\mathbf{w}(T) + \mathbf{r}_0) + \frac{\alpha}{2} \int_\Gamma u^2 d\zeta$ . Die Zustände  $\mathbf{r}, \mathbf{p}$  und Anfangsdaten der ODE sind hierbei durch die Transformationen  $\mathbf{r}(t) = \mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0$  und  $\mathbf{p}(t) = \mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0$  gegeben.

#### 4.4.2. Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des reduzierten Systems.

Die Nebenbedingung  $e(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) = 0 \quad \forall t \in [0, T]$  in (P) lässt sich wie folgt äquivalent umschreiben

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &= \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{z}}(t) \\ \dot{\mathbf{w}}(t) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) \\ f_2(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) \end{pmatrix} = 0 \quad \forall t \in [0, T] \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{z}}(t) \\ \dot{\mathbf{w}}(t) \end{pmatrix} &= f(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t), \quad \forall t \in [0, T], \quad \mathbf{w}(0) = \mathbf{z}(0) = 0, \quad (4.34)
\end{aligned}$$

mit rechter Seite  $f = (f_1, f_2)^\top : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  und  $f(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)$  gegeben durch die verbleibenden Terme von (4.33)

$$\begin{aligned}
f_1(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &:= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \mathbf{F}_L(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, \mathbf{z} + \mathbf{p}_0)(t) \, d\mathbf{x} \\
&\quad - q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} Ru) \left[ \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \right] d\mathbf{x} \\
&\quad + q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \times \mathbf{n} \, d\zeta \\
f_2(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) &:= \mathbf{v}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0).
\end{aligned}$$

Mit dieser Notation werden wir im Folgenden die Existenz und Eindeutigkeit von einem  $\mathbf{y} \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  von (4.34) für ein beliebiges, aber fest vorgegebenes  $u \in L^2(\Gamma; \mathbb{R})$  nachweisen. Zu diesem Nachweis wird der Fixpunktsatz von Banach benutzt.

**Lemma 4.4.3** (Globale Lipschitzstetigkeit).

Die rechte Seite  $f(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t)$  des reduzierten Systems (4.34) ist global Lipschitz stetig bzgl. des Zustands  $\mathbf{y}$ . Es gilt also

$$|f(\mathbf{y}_1, u)(t) - f(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \leq L \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2} \quad \forall t \in [0, T]$$

mit Lipschitz Konstante  $L \geq 0$ .

**Beweis.** Aus der Definition (3.13) folgt, dass  $v$  in der euklidischen Norm beschränkt ist, denn es gilt

$$\begin{aligned}
|v(\mathbf{p})|_2 &= \left| \frac{\mathbf{p}}{m_0^q \sqrt{1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2}}} \right|_2 = \frac{c|\mathbf{p}|_2}{\sqrt{((m_0^q c)^2 + |\mathbf{p}|_2^2)}} \\
&\leq \frac{c|\mathbf{p}|_2}{|\mathbf{p}|_2} = c. \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3
\end{aligned} \quad (4.35)$$

und deren Ableitung schätzt sich in der Frobeniusnorm durch

$$|v'(\mathbf{p})|_F \leq \frac{\sqrt{3}}{m_0^q}, \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$$

ab, denn

$$\begin{aligned}
|v'(\mathbf{p})|_F &= \sqrt{\sum_{i,j=1}^3 \left| \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{p}(t))_i}{\partial p_j} \right|_2^2} \\
&= \sqrt{\sum_{i,j=1}^3 \frac{\delta_{ij} \delta_{ij}}{m^2 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})} - \frac{2p_i p_j \delta_{ij}}{(m_0^q)^4 c^2 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})^2} + \frac{p_i^2 p_j^2}{(m_0^q)^6 c^4 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})^3}} \\
&= \sqrt{\frac{3}{m^2 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})} - \frac{2(m_0^q c)^2 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2}) |\mathbf{p}|_2^2 - |\mathbf{p}|_2^4}{(m_0^q)^6 c^4 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})^3}} \\
&= \sqrt{\frac{3}{m^2 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})} - \frac{2(m_0^q c)^2 |\mathbf{p}|_2^2 + |\mathbf{p}|_2^4}{(m_0^q)^6 c^4 (1 + \frac{|\mathbf{p}|_2^2}{(m_0^q c)^2})^3}} \\
&\leq \frac{\sqrt{3}}{m_0^q}, \quad \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Hierbei wird  $\gamma(\mathbf{p}) \geq 1, \forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^3, c > 0, m_0^q \geq 0$  ausgenutzt und  $\delta_{ij}$  stellt das Kronecker Symbol dar mit  $\delta_{ij} = \{1, \text{ falls } i = j; 0 \text{ sonst}\}$ . Darüber hinaus erhalten wir, nach Definition der ausgeschmierten Delta Distribution und deren Eigenschaften (4.1), die Abschätzung

$$\begin{aligned}
\|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left( \int_{\Omega} \left( \int_0^1 (\varphi'(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2 + s(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)) ds \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1))^2 d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq L_{\varphi} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|_2 \left( \int_{\text{supp}(\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1)) \cap \text{supp}(\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2))} 1 d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&\leq L_{\varphi} \frac{2\sqrt{\pi} R_{\varphi}^3}{\sqrt{3}} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|_2 \quad \forall \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathbb{R}^3
\end{aligned} \tag{4.37}$$

unter Benutzung des integralen Mittelwertsatzes, der Lipschitzstetigkeit von  $\varphi$  und zur Hilfenahme, dass der Träger von  $\varphi$  in einer Kugel mit Radius  $R_{\varphi}$  liegt. Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned}
\|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \left( \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi| |\varphi| d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}} \leq (\|\varphi\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^3)} \|\varphi\|_{L^1(\mathbb{R}^3)})^{\frac{1}{2}} \\
&= \sqrt{\|\varphi\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^3)}} = \sqrt{C_{\varphi}} \quad \forall \mathbf{r}_2 \in \mathbb{R}^3.
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Hierbei wurde die Hölderungleichung, die Beschränktheit des Trägers von  $\varphi$  und (4.1) ausgenutzt ( $\int_{\mathbb{R}^3} \varphi d\mathbf{x} = 1$ ). Die  $L^{\infty}$ -Norm von  $\varphi$  lässt sich nach (4.1) durch  $\max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})| =: C_{\varphi}$  schreiben.

Wenden wir uns zunächst der Komponente  $f_2$  zu und bedienen wir uns des Mittelwertsatzes. Es gilt für beliebige  $\mathbf{y}_1 = (\mathbf{w}_1, \mathbf{z}_1)^{\top}, \mathbf{y}_2 = (\mathbf{w}_2, \mathbf{z}_2)^{\top} \in C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2$  und beliebiges, aber festes  $u \in L^2(\Gamma)$

$$\begin{aligned}
&|f_2(\mathbf{y}_1, u)(t) - f_2(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\
&= |\mathbf{v}(\mathbf{z}_1(t) + \mathbf{p}_0) - \mathbf{v}(\mathbf{z}_2(t) + \mathbf{p}_0)|_2 \\
&\leq \max_{s \in [0, 1]} |v'(z_2(t) + \mathbf{p}_0 + s(\mathbf{z}_1(t) - \mathbf{z}_2(t)))|_F |\mathbf{y}_2(t) - \mathbf{y}_1(t)|_2 \\
&\leq \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \max_{\tilde{t} \in [0, t]} |\mathbf{y}_2(\tilde{t}) - \mathbf{y}_1(\tilde{t})|_2 = \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2}.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Hiebei nutzen wir (4.36) aus. Wir betrachten nun  $f_1$ . Der Übersicht halber führen wir folgende Notation ein

$$f_1(\mathbf{y}, u)(t) := \hat{f}(\mathbf{y}, u)(t) + \tilde{f}(\mathbf{y}, u)(t) - \bar{f}(\mathbf{y}, u)(t) + \mathring{f}(\mathbf{y}, u)(t) \quad \text{mit}$$

$$\begin{aligned} \hat{f}(\mathbf{y}, u)(t) &:= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \left[ \mathcal{E}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, \mathbf{z} + \mathbf{p}_0)(\tau) d\tau \right] d\mathbf{x}, \\ \tilde{f}(\mathbf{y}, u)(t) &:= q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \left[ \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times (\mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix}) \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \mathcal{B}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, \mathbf{z} + \mathbf{p}_0)(\tau) d\tau \right] d\mathbf{x}, \\ \bar{f}(\mathbf{y}, u)(t) &:= q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} Ru) \left[ \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \right] d\mathbf{x}, \\ \mathring{f}(\mathbf{y}, u)(t) &:= q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}(t) - \mathbf{r}_0) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}(t) + \mathbf{p}_0) \times \mathbf{n} d\zeta. \end{aligned} \tag{4.40}$$

Wir beginnen mit der Diskussion über die Lipschitzstetigkeit von  $\hat{f}$ . Seien  $t \in [0, T]$ ,  $\mathbf{y}_i = (\mathbf{w}_i, \mathbf{z}_i) \in C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2$  beliebig mit  $i = 1, 2$  und es gelte  $\mathbf{r}_i = \mathbf{w}_i + \mathbf{r}_0$ ,  $\mathbf{p}_i = \mathbf{z}_i + \mathbf{p}_0$ ,  $i = 1, 2$ . Dann gilt mit den Resultaten aus dem Kapitel über die Halbgruppentheorie

$$\begin{aligned} &|\hat{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \hat{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\ &\leq q \left| \int_{\Omega} [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1(t)) - \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2(t))] \mathcal{E}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} d\mathbf{x} \right|_2 \\ &+ q \left| \int_{\Omega} [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1(t)) \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)(\tau) d\tau \right. \\ &\quad \left. - \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2(t)) \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)(\tau) d\tau] d\mathbf{x} \right|_2 \\ &\leq q \left( \left\| \mathcal{E}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right\|_X \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \|\mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)(\tau)\|_X d\tau \right) \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(t)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_{L^2(\Omega)} \\ &+ q \int_0^t \|\mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)(\tau) - \mathcal{E}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)(\tau)\|_X d\tau \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq q M e^{\omega T} \left( \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\|_{L^1(0, t; X \times X)} \right) L_{\varphi} \frac{2\sqrt{\pi R_{\varphi}^3}}{\sqrt{3}} |\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_2(t)|_2 \\ &+ q M e^{\omega T} \sqrt{C_{\varphi}} \|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\|_{L^1(0, t; X \times X)}. \end{aligned} \tag{4.41}$$

In obiger Abschätzung wurde die Cauchy Schwarz Ungleichung, die Eigenschaft (A.2), also dass  $\|\mathcal{E}(t)\|_{\mathcal{L}(X, X)} \leq M e^{\omega t}$  ist mit  $M \geq 1, \omega \geq 0$ , (4.37) und (4.38) benutzt. Beachte, dass  $\|\mathcal{E}(t)\|_{\mathcal{L}(X, X)} \leq M e^{\omega t} \leq \max_{t \in [0, T]} M e^{\omega t} = M e^{\omega T}$  gilt.

Unter Verwendung von (4.35), (4.36), (4.37) und (4.38) erhält man

$$\begin{aligned}
& \|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\|_{L^1(0,t;X \times X)} \\
&= \frac{q}{c} \int_0^t \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(\tau))v(\mathbf{p}_1(\tau)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(\tau))v(\mathbf{p}_2(\tau))\|_X d\tau \\
&\leq \frac{q}{c} \int_0^t \left( \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(\tau)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(\tau))\|_{L^2(\Omega)} |v(\mathbf{p}_1(\tau))|_2 \right. \\
&\quad \left. + \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(\tau))\|_{L^2(\Omega)} |v(\mathbf{p}_1(\tau)) - v(\mathbf{p}_2(\tau))|_2 \right) d\tau \\
&\leq \frac{q}{c} \int_0^t L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} |\mathbf{r}_1(\tau) - \mathbf{r}_2(\tau)|_c d\tau \\
&\quad + \frac{q}{c} \int_0^t \sqrt{C_\varphi} \max_{s \in [0,1]} |v'(\mathbf{p}_1(\tau) + s(\mathbf{p}_1(\tau) - \mathbf{p}_2(\tau)))|_F |\mathbf{p}_1(\tau) - \mathbf{p}_2(\tau)|_2 d\tau \\
&\leq \frac{q}{c} T L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} \max_{\tilde{t} \in [0,t]} |\mathbf{r}_1(\tilde{t}) - \mathbf{r}_2(\tilde{t})|_c \\
&\quad + \frac{q}{c} T \sqrt{C_\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \max_{\tilde{t} \in [0,t]} \|\mathbf{p}_1(\tilde{t}) - \mathbf{p}_2(\tilde{t})\|_2 \\
&= \frac{q}{c} T \left( L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} c \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} + \sqrt{C_\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \right) \forall t \in [0, T]
\end{aligned} \tag{4.43}$$

und

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\|_{L^1(0,t;X \times X)} &= \frac{q}{c} \int_0^t \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(\tau))\|_{L^2(\Omega)} |v(\mathbf{p}_1(\tau))|_2 d\tau \\
&\leq qT \sqrt{C_\varphi}. \forall t \in [0, T]
\end{aligned} \tag{4.44}$$

Hierbei gilt es zu berücksichtigen, dass die zweite Komponente von  $\mathbf{j}$  der Nullvektor ist. Einsetzen von (4.43) und (4.44) in (4.41) ergibt

$$\begin{aligned}
& |\hat{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \hat{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\
&\leq qM e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)^\top\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)\|_{L^1(0,t;X \times X)} \right) L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} |\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_2(t)|_2 \\
&\quad + qM e^{\omega T} \sqrt{C_\varphi} \|\mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) - \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\|_{L^1(0,t;X \times X)} \\
&\leq qM e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)^\top\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi} \right) L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} |\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_2(t)|_2 \\
&\quad + qM e^{\omega T} \sqrt{C_\varphi} \frac{q}{c} T \left( L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} c \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} + \sqrt{C_\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \right) \\
&\leq qM e^{\omega T} L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)^\top\|_{X \times X} + 2qT \sqrt{C_\varphi} \right) \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \\
&\quad + \frac{q^2}{c} M e^{\omega T} C_\varphi \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} T \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \\
&\leq \hat{K} (\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} + \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)}) \\
&\leq \sqrt{2} \hat{K} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2}
\end{aligned}$$

mit

$$\hat{K} = \max \left( q M e^{\omega T} L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)^\top\|_{X \times X} + 2qT \sqrt{C_\varphi} \right), \frac{q^2}{c} M e^{\omega T} C_\varphi \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \right) > 0,$$

wobei  $\hat{K}$  nicht von  $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2$  und  $t$  abhängt. Die letzte Ungleichung folgt nach Young (Lemma 2.2.21). Richtet man seine Aufmerksamkeit auf den Term  $\tilde{f}(\mathbf{y}, u)$  so erhält man als Lipschitz Abschätzung

$$\begin{aligned} & |\tilde{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \tilde{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\ & \leq q \left( \left\| \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right\|_X \right. \\ & \quad \left. + \int_0^t \|\mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)(\tau)\|_X d\tau \right) \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(t)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_{L^2(\Omega)} \\ & \quad + q \int_0^t \|\mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)(\tau) - \mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)\|_X d\tau \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2)\|_{L^2(\Omega)} \\ & \quad + q |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1(t)) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_2(t))|_2 \left\| \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right\|_X. \end{aligned}$$

Hierbei verwendet man die Eigenschaft des Kreuzproduktes, dass  $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}|_2 \leq |\mathbf{a}|_2 |\mathbf{b}|_2$  mit  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$  und dass  $|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})|_2 \leq 1$ . Des Weiteren gilt mit dem integralen Mittelwertsatz und (4.36) die Ungleichung

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1(t)) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_2(t))|_2 &= \left| \frac{1}{c} (\mathbf{v}(\mathbf{p}_1(t)) - \mathbf{v}(\mathbf{p}_2(t))) \right|_2 \\ &\leq \frac{1}{c} \max_{s \in [0,1]} |v'(\mathbf{p}_2(t) + s(\mathbf{p}_1(t) - \mathbf{p}_2(t)))|_F |\mathbf{p}_2(t) - \mathbf{p}_1(t)|_2 \\ &\leq \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \max_{\tilde{t} \in [0,t]} |\mathbf{p}_2(\tilde{t}) - \mathbf{p}_1(\tilde{t})|_2 \\ &= \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t]; \mathbb{R}^3)} \quad \forall t \in [0, T], \end{aligned} \tag{4.45}$$

sodass

$$\begin{aligned} & |\tilde{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \tilde{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\ & \leq q M e^{\omega T} L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + 2qT \sqrt{C_\varphi} \right) \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t]; \mathbb{R}^3)} \\ & \quad + \frac{q^2}{c} M e^{\omega T} C_\varphi \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} T \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t]; \mathbb{R}^3)} \\ & \quad + q \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} M e^{\omega T} \left\| (\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0) \right\|_{X \times X} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t]; \mathbb{R}^3)}, \end{aligned}$$

wobei wiederum (4.35), (4.36), (4.37) und (4.38) ausgenutzt wurden. Somit gilt

$$\begin{aligned} & |\tilde{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \tilde{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \leq \sqrt{2} \tilde{K} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0,t]; \mathbb{R}^3)^2} \\ & \text{mit } \tilde{K} = \max \left( q M e^{\omega T} L_\varphi \frac{2\sqrt{\pi R_\varphi^3}}{\sqrt{3}} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + 2qT \sqrt{C_\varphi} \right), \right. \\ & \quad \left. \frac{q^2}{c} M e^{\omega T} C_\varphi \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} T + q \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} M e^{\omega T} \left\| (\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0) \right\|_{X \times X} \right). \end{aligned}$$

Darüber hinaus gilt für den dritten Term  $\bar{f}$  von  $f_1(\mathbf{y}, u)$  (definiert in (4.40)) mit (4.37), (4.38), (4.28) und  $|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})|_2 \leq 1$  die Abschätzung

$$\begin{aligned}
& |\bar{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \bar{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\
&= q \left| \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} Ru) \left[ \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_1(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1(t)) - \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}_2(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_2(t)) \right] \right| \\
&\leq q \|(-\Delta^*)^{-1} Ru\|_{L^2(\Omega)} \left( \|\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(t)) - \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_X |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1)|_2 \right. \\
&\quad \left. + \|\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_X |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_2)|_2 \right) \\
&\leq q \tilde{c} \|u\|_{L^2(\Gamma)} \left( L_{\varphi} \frac{2\sqrt{\pi R^3}}{\sqrt{3}} \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \right) \\
&\leq \sqrt{2} L_u \bar{K} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2}
\end{aligned}$$

mit Konstante  $\bar{K} := q \tilde{c} \max \left( L_{\varphi} \frac{2\sqrt{\pi R^3}}{\sqrt{3}}, \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \right)$ . Die vorletzte Ungleichung folgt aus (4.48) und dem Kapitel 4.3.3 über die sehr schwache Lösung der Poisson Gleichung aus Theorem 4.3.29. Für die letzte Abschätzung verwendet man die Young'sche Ungleichung (Lemma 2.2.21). Die Konstante  $L_u$  hängt von den beliebig, aber fest gegebenen Daten  $u \in L^2(\Gamma)$  ab. Der letzte Term von  $f_1(\mathbf{y}, u)$  (siehe Gleichung (4.40)), der Term  $\mathring{f}(\mathbf{y}, u)$  kann wie folgt abgeschätzt werden

$$\begin{aligned}
& |\mathring{f}(\mathbf{y}_1, u)(t) - \mathring{f}(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \\
&\leq q \|u\|_{L^2(\Gamma)} \left( \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_1(t)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_{L^2(\Gamma)} |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1)|_2 \right. \\
&\quad \left. + \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2(t))\|_{L^2(\Gamma)} |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_1) - \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_2)|_2 \right) \\
&\leq q L_u \left( L_{\varphi} \sqrt{|\Gamma|} \|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} + C_{\varphi} \frac{\sqrt{3|\Gamma|}}{m_0^q c} \|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)} \right) \\
&\leq \sqrt{2} L_u \mathring{K} \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2}.
\end{aligned}$$

Hierzu verwendet man, dass (4.45) und  $|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})| \leq 1$  gelten. Es ergibt sich  $\mathring{K}$  zu  $\mathring{K} = q \max \left( L_{\varphi} \sqrt{|\Gamma|}, C_{\varphi} \frac{\sqrt{3|\Gamma|}}{m_0^q c} \right)$ . Des Weiteren hat die Abschätzung

$$\|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_2)\|_{L^2(\Gamma)} \leq \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})| \sqrt{\int_{\Gamma} 1 \, d\varsigma} = C_{\varphi} \sqrt{|\Gamma|} \quad \forall \mathbf{r}_2 \in \mathbb{R}^3 \quad (4.46)$$

mit  $C_{\varphi} := \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{x})|_2$  ihre Gültigkeit. Durch den Nachweis der Lipschitz Stetigkeit der einzelnen Komponenten von  $f(\mathbf{y}, u)$  bei festen, aber beliebigen  $u$  ist somit die globale Lipschitz Stetigkeit bzgl. des Zustands  $\mathbf{y}$  gezeigt, also

$$|f(\mathbf{y}_1, u)(t) - f(\mathbf{y}_2, u)(t)|_2 \leq L \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2} \quad \forall t \in [0, T]$$

mit  $L = \sqrt{2}(\hat{K} + \tilde{K} + L_u \bar{K} + L_u \mathring{K}) + \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \geq 0$ . □

**Bemerkung 4.4.4.** Die Lipschitz Konstante hängt von der Steuerung  $u$  ab. Dies ist jedoch im nachfolgenden Existenzbeweis von (4.34) für ein fest vorgegebenes  $u$  unwesentlich.

**Theorem 4.4.5** (Existenz und Eindeutigkeit).

Für alle  $u \in L^2(\Gamma; \mathbb{R})$  existiert eine eindeutige Lösung  $\mathbf{y}^*(t) \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  des reduzierten Systems (4.34) mit der folgenden a priori Abschätzung

$$\|\mathbf{y}^*\|_{C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \leq C_1 \|u\|_{L^2(\Gamma)} + C_2$$

mit Konstanten  $C_1, C_2 > 0$ , die unabhängig von  $\mathbf{y}^*$  und  $u$  sind.

**Beweis.** Der Beweis folgt dem klassischen Beweis für die Existenz einer eindeutigen Lösung eines ODE Anfangswertproblems via dem Fixpunktsatz von Banach (Theorem 2.2.24). Das Anfangswertproblem (4.34) kann hierfür auch in

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}_0 + \int_0^t f(\mathbf{y}, u)(\tau) d\tau \quad \forall t \in [0, T] \quad (4.47)$$

äquivalent umformuliert werden. Zu beachten ist hierbei, dass die Anfangsdaten durch  $\mathbf{y}_0 = \mathbf{y}(0) = 0$  gegeben sind. Mit Hilfe des Fundamentalsatzes der Analysis, ist jede stetige Lösung von (4.47) eine stetig differenzierbare Lösung des Ausgangsproblems (4.34). Wir schreiben (4.34) als Fixpunkt Gleichung

$$\mathbf{y}(t) = G(\mathbf{y})(t) \quad \forall t \in [0, T]$$

mit Abbildung  $G : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  gegeben durch

$$G(\mathbf{y})(t) = \int_0^t f(\mathbf{y}, u)(\tau) d\tau,$$

und zeigen im Folgendem, dass  $G$  eine kontraktive Abbildung darstellt. Hierzu gilt es, die geeignete Norm zu wählen. Die Norm der Wahl ist definiert durch

$$\|\mathbf{y}\|_G := \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} |\mathbf{y}(t)|_2,$$

welche äquivalent zur Maximumsnorm für stetige Funktionen ist. Dann gilt für die Abbildung  $G$  und für alle  $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  in der Norm  $\|\cdot\|_G$  folgendes Resultat

$$\begin{aligned} \|G(\mathbf{y}_1) - G(\mathbf{y}_2)\|_G &= \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} \left| \int_0^t f(\mathbf{y}_1, u)(\tau) - f(\mathbf{y}_2, u)(\tau) d\tau \right|_2 \\ &\leq L \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} \int_0^t \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_{C([0, \tau]; \mathbb{R}^3)^2} d\tau \\ &= L \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} \int_0^t \left( \max_{s \in [0, \tau]} e^{Ls} |\mathbf{y}_1(s) - \mathbf{y}_2(s)|_2 \right) d\tau \\ &\leq L \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} \int_0^t \left( \max_{s \in [0, \tau]} e^{Ls} \right) \left( \max_{s \in [0, \tau]} e^{-Ls} |\mathbf{y}_1(s) - \mathbf{y}_2(s)|_2 \right) d\tau \\ &\leq L \max_{t \in [0, T]} e^{-Lt} \int_0^t e^{L\tau} d\tau \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_G \\ &= L \max_{t \in [0, T]} \left( \frac{1}{L} - \frac{1}{L} e^{-Lt} \right) \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_G \\ &\leq L \left( \frac{1}{L} - \frac{1}{L} e^{-LT} \right) \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_G = (1 - e^{-LT}) \|\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_2\|_G. \end{aligned}$$

Hierbei folgt die erste Abschätzung obiger Formulierung nach der globalen Lipschitzstetigkeit von  $f$  und somit aus Lemma 4.4.3. Damit ist  $G$  für alle  $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2 \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  kontraktiv, da  $0 \leq (1 - e^{-LT}) < 1$ . Nach Banachs Fixpunktsatz (Theorem 2.2.24) existiert somit ein eindeutiger Fixpunkt  $\mathbf{y} \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  der Fixpunkt Gleichung (4.47). Hieraus folgt mit dem Fundamentalsatz der Analysis, dass eine eindeutige Lösung  $\mathbf{y}^* \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  von (4.34) existiert.

Nun gilt es, die *a priori* Abschätzung,  $\|\mathbf{y}^*\|_{C^1([0,T];\mathbb{R}^3)^2} \leq C_1\|u\|_{L^2(\Gamma)} + C_2$  mit  $C_1, C_2 > 0$  zu zeigen. Setzen wir hierfür wieder  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})^\top := \mathbf{y} + (\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)^\top$ . Wir erwähnen, dass nach (4.35)

$$|f_2(\mathbf{y}, u)(t)|_2 \leq c$$

für beliebiges  $t \in [0, T]$  gilt. Ausßerdem hat die Abschätzung

$$\|\nabla\varphi(x - \mathbf{r})\|_X \leq \sqrt{\|\nabla\varphi^2\|_{L^\infty(\Omega)}\|1\|_{L^1(\Omega)}} \leq \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla\varphi(\mathbf{x})| < \infty \quad (4.48)$$

für jedes  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$  ihre Gültigkeit. Mit (A.2), (4.35), (4.37) und (4.46) leitet man

$$\begin{aligned} |f_1(\mathbf{y}, u)(t)|_2 &= \left| q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) \, d\mathbf{x} \right. \\ &\quad - q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R u) \left[ \nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \right] \, d\mathbf{x} \\ &\quad \left. + q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{n} \, d\varsigma \right| \\ &\leq q \left( \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Omega)} \|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X \right. \\ &\quad + \|(-\Delta^*)^{-1} R u\|_{L^2(\Omega)} \|\nabla\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_X |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))|_2 \\ &\quad \left. + \|u\|_{L^2(\Gamma)} \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Gamma)} |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))|_2 |\mathbf{n}|_2 \right) \end{aligned}$$

her, unter Ausnutzung der Hölderungleichung (Theorem 2.2.19) und dass  $|\mathbf{a} \times \mathbf{b}|_2 \leq |\mathbf{a}|_2 |\mathbf{b}|_2$  mit  $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$  gilt. Man schätzt  $f_1$  weiter ab mit

$$\begin{aligned} |f_1(\mathbf{y}, u)(t)|_2 &\leq q \left( \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Omega)} \|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X \right. \\ &\quad + \|(-\Delta^*)^{-1} R\|_{\mathcal{L}(L^2(\Gamma), L^2(\Omega))} \|u\|_{L^2(\Gamma)} \|\nabla\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_X |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))|_2 \\ &\quad \left. + \|u\|_{L^2(\Gamma)} \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Gamma)} |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))|_2 \right) \\ &\leq q \left( \sqrt{C_\varphi} \|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X + (\tilde{c} \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla\varphi(\mathbf{x})| + C_\varphi \sqrt{|\Gamma|}) \|u\|_{L^2(\Gamma)} \right) \end{aligned}$$

Es gilt nun eine Abschätzung für  $\|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X$  zu finden. Verwenden wir hierzu die Resultate aus (4.26), (4.35), und dass  $|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})|_2 \leq 1$  für alle  $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$  gilt. Dann folgt

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X &= \|\mathbf{E}(\cdot, t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\cdot, t)\|_X \\ &\leq 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + \|\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})\|_{L^1([0, T]; X \times X)} \right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Man erhält damit und mit (4.44)

$$\begin{aligned} |f_1(\mathbf{y}, u)(t)|_2 &\leq q \left( \sqrt{C_\varphi} 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \tilde{c} \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla\varphi(\mathbf{x})| + C_\varphi \sqrt{|\Gamma|} \right) \|u\|_{L^2(\Gamma)} \right). \end{aligned}$$

Schlussendlich ergibt sich für die  $C^1$ -Norm mit (4.34)

$$\begin{aligned} \|\mathbf{y}^*\|_{C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} &= \max_{t \in [0, T]} |\mathbf{y}^*(t)|_2 + \max_{t \in [0, T]} |\dot{\mathbf{y}}^*(t)|_2 \\ &\leq |\mathbf{y}_0^*|_2 + \max_{t \in [0, T]} \int_0^t |f(\mathbf{y}^*, u)(\tau)|_2 \, d\tau + \max_{t \in [0, T]} |f(\mathbf{y}^*, u)(t)|_2 \\ &\leq C_1 \|u\|_{L^2(\Gamma)} + C_2, \end{aligned}$$

wobei die Konstanten

$$C_1 = (T + 1)q \left( \tilde{c} \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| + C_\varphi \sqrt{|\Gamma|} \right) > 0$$

$$C_2 = (T + 1) \left( q \left( \sqrt{C_\varphi} 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi} \right) \right) + c \right) > 0.$$

sind und  $\mathbf{y}^*(0) = 0$ . Die Konstanten sind unabhängig von  $\mathbf{y}^*$  und  $u^*$ .  $\square$

**Bemerkung 4.4.6.** *Im Fall, dass  $\Omega = \mathbb{R}^3$  und  $t \in \mathbb{R}$ , findet sich ein Existenzresultat, unter weiteren restriktiven Annahmen, für das gekoppelte Maxwell Newton Lorentz System in [100, Lemma 2.2] und [63] wieder. Der Beweis erfolgt auch dort über Banachs Fixpunktsatz.*

#### 4.5. Existenz einer optimalen Lösung.

In diesem Abschnitt werden wir beweisen, dass eine global optimale Lösung von

$$\begin{aligned}
& \min \mathcal{J}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, u) \\
& \text{s.t. } \mathbf{w}, \mathbf{z} \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3), \\
& \quad u \in L^2(\Gamma), \\
& \quad \mathbf{e}(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) = 0 \quad \forall t \in [0, T], \\
& \quad g_i(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad \forall t \in [0, T]
\end{aligned} \tag{P}$$

existiert. Das in Theorem 4.4.5 gezeigte Resultat, die Existenz einer eindeutigen Lösung des reduzierten Systems (4.34), wird die Existenz einer optimalen Lösung von (P) sicherstellen.

**Theorem 4.5.1** (Existenz von Lösungen).

*Es existiere eine Steuerung  $u \in L^2(\Gamma)$ , sodass der dazu gehörige Zustand  $\mathbf{y} = (\mathbf{w}, \mathbf{z}) \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  die Zustandsbeschränkungen  $g_i(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0$  für alle  $t \in [0, T]$  und alle  $i = 1, \dots, m$  erfüllt. Dann existiert mindestens ein globale Lösung  $(\mathbf{y}^*, u^*)$  von (P).*

**Beweis.** Die Argumentation folgt dem standardmäßigen Existenzbeweis in der optimalen Steuerung. Zunächst stellen wir fest, dass (P) keine leere zulässige Menge  $\mathcal{F}$  hat. Nach Theorem 4.4.5 existiert ein Punkt, der das reduzierte System (4.34) für eine beliebige Steuerung  $u$  erfüllt und nach Annahme sind die Ungleichungen  $g_i(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0$  für alle  $t \in [0, T]$  und alle  $i = 1, \dots, m$  erfüllt. Darüber hinaus sei

$$j := \inf(P) \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}.$$

Dann existiert eine Folge  $\{(\mathbf{y}_n, u_n)\}_{n=1}^\infty \in \mathcal{F}$ , also

$$\{(\mathbf{w}_n, \mathbf{z}_n, u_n)\}_{n=1}^\infty \subset C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \times L^2(\Gamma),$$

sodass

$$\begin{aligned}
e(\mathbf{y}_n, u_n)(t) &= 0 & \forall n = 1, \dots, \infty, t \in [0, T] \\
g_i(\mathbf{w}_n(t) + \mathbf{r}_0) &\leq 0, \quad i = 1, \dots, m & \forall n = 1, \dots, \infty, t \in [0, T] \\
\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{J}(\mathbf{w}_n + \mathbf{r}_0, u_n) &= j
\end{aligned}$$

gilt. Die Folge der  $\{u_n\}_{n=1}^\infty$  ist in der  $L^2(\Gamma)$ -Norm beschränkt, da

$$\begin{aligned}
\|u_n\|_{L^2(\Gamma)}^2 &\leq \frac{2}{\alpha} \left( \mathcal{J}(\mathbf{w}_n + \mathbf{r}_0, u_n) - \underline{c}_1 T - \underline{c}_2 \right) \\
&\leq \frac{2}{\alpha} \left( (j + 1) - \underline{c}_1 T - \underline{c}_2 \right) \quad \forall n \geq N
\end{aligned}$$

mit  $\alpha > 0, \underline{c}_1, \underline{c}_2 > -\infty$  und unter Benutzung von Annahme 4.2.19. Es folgt nach  $e(\mathbf{y}_n, u_n) = 0$ , Theorem 4.4.5 und dessen *a priori* Abschätzung gilt somit

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{y}_n\|_{C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} &\leq C_1 \|u_n\|_{L^2(\Gamma)} + C_2 \\
&\leq C_1 \left( \frac{2}{\alpha} \left( (j + 1) - \underline{c}_1 T - \underline{c}_2 \right) \right) + C_2 \quad \forall n \geq N.
\end{aligned}$$

Deshalb ist die Folge  $\{\mathbf{y}_n\}$  für hinreichend großes  $n$  auch in  $H^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  beschränkt. Da jede beschränkte Folge in einem reflexiven Banachraum eine schwach konvergente Teilfolge besitzt, findet man somit Teilfolgen  $\{\mathbf{y}_{n_k}, u_{n_k}\}_{k=1}^\infty$  mit

$$\begin{aligned}
u_{n_k} &\rightharpoonup u^* & \text{in } L^2(\Gamma) \\
\mathbf{y}_{n_k} &\rightharpoonup \mathbf{y}^* = (\mathbf{w}^*, \mathbf{z}^*) & \text{in } H^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Nach [2, Theorem 6.3] ist die Einbettung  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 \hookrightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  kompakt, sodass eine Teilfolge  $\{\mathbf{y}_{n_k}\}_{k=1}^\infty$  existiert, die stark gegen  $\mathbf{y}^*$  in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  konvergiert

$$\|\mathbf{y}_{n_k} - \mathbf{y}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty. \quad (4.51)$$

Dann gilt für die rechte Seite  $f$  aus (4.34) in der Maximumsnorm

$$\begin{aligned} \|f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)(t) - f(\mathbf{y}^*, u^*)(t)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} &= \max_{t \in [0, T]} |f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)(t) - f(\mathbf{y}^*, u^*)(t)|_2 \\ &\leq L_{u^*} \|\mathbf{y}_{n_k} - \mathbf{y}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \end{aligned}$$

nach Lemma 4.4.3 und somit

$$\|f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)(t) - f(\mathbf{y}^*, u^*)(t)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty, \quad (4.52)$$

Es gilt  $\beta(\mathbf{p}) = c^{-1}(m_0^q \gamma(z + \mathbf{p}_0))^{-1}(z + \mathbf{p}_0)$  mit Konstanten  $c, m_0^q$ , und  $\mathbf{y} = (\mathbf{w}, \mathbf{z})^\top$ ,  $\mathbf{p} = \mathbf{z} + \mathbf{p}_0$ , sodass wir aus der Konvergenz (4.51) folgern können

$$\begin{aligned} \|\beta(\mathbf{p}_{n_k}) - \beta(\mathbf{p}^*)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} &= \max_{t \in [0, T]} |\beta(\mathbf{p}_{n_k}(t)) - \beta(\mathbf{p}^*(t))|_2 \\ &\leq \max_{t \in [0, T]} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \|\mathbf{p}_{n_k} - \mathbf{p}^*\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)} \\ &\leq \frac{\sqrt{3}}{m_0^q c} \|\mathbf{p}_{n_k} - \mathbf{p}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (4.53)$$

wobei wir Formel (4.45) (Lipschitzstetigkeit von  $\beta$ ) ausnutzen. Des Weiteren lässt sich aus der Lipschitzstetigkeit des geglätteten Dirac zeigen, dass

$$\begin{aligned} \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_{n_k}) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*)\|_{C([0, T]; H^1(\Omega))} &= \max_{t \in [0, T]} \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}_{n_k}(t)) - \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t))\|_{H^1(\Omega)} \\ &\leq \max_{t \in [0, T]} \left( 2 \max(L_\varphi^2, L_{\varphi,1}^2) |\mathbf{r}_{n_k}(t) - \mathbf{r}^*(t)|_2^2 \int_{\text{supp}(\varphi(\cdot - \mathbf{r}_{n_k})) \cap \text{supp}(\varphi(\cdot - \mathbf{r}^*))} 1 \, d\mathbf{x} \right)^{1/2} \\ &\leq \max_{t \in [0, T]} \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\pi R_\varphi^3} \max(L_\varphi, L_{\varphi,1}) |\mathbf{r}_{n_k}(t) - \mathbf{r}^*(t)|_2 \right) \\ &= \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\pi R_\varphi^3} \max(L_\varphi, L_{\varphi,1}) \|\mathbf{r}_{n_k} - \mathbf{r}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4.54)$$

Wir verwenden die Lipschitzstetigkeit von  $\varphi, \nabla \varphi$  mit dazu gehörigen Konstanten  $L_\varphi$  bzw.  $L_{\varphi,1}$  und (4.51).

Wir werden nun zeigen, dass  $\mathbf{y}^* \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  mit der eindeutigen Lösung von (4.34) übereinstimmt und dass  $\mathbf{w}^*(t) + \mathbf{r}_0 \in \tilde{\Omega}$ . Betrachten wir hierzu das reduzierte System (4.34), formulieren wir es in seiner schwachen Formulierung für alle Funktionen  $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2$  und gehen zur Grenze über. Da  $\{\mathbf{y}_{n_k}\}$  schwach in  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2$  gegen  $\mathbf{y}^*$  nach (4.50) konvergiert, folgern wir

$$\begin{aligned} \int_0^T \dot{\mathbf{y}}^*(t) \cdot \mathbf{v}(t) \, dt &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \dot{\mathbf{y}}_{n_k}(t) \cdot \mathbf{v}(t) \, dt \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{y}_{n_k}, u_{n_k})(t) \\ f_2(\mathbf{y}_{n_k}, u_{n_k})(t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1(t) \\ \mathbf{v}_2(t) \end{pmatrix} \, dt \quad \forall \mathbf{v} \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 \end{aligned} \quad (4.55)$$

unter Berücksichtigung von (4.34). Wir schreiben (4.55) nun als

$$\begin{aligned}
& \int_0^T \dot{\mathbf{y}}^*(t) \cdot \mathbf{v}(t) dt \\
&= \lim_{k \rightarrow \infty} \left( \int_0^T f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)(t) \cdot \mathbf{v}(t) dt \right. \\
&\quad - q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R(u_{n_k} - u^*)) \\
&\quad \quad \int_0^T [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}_{n_k}(t) - r_0) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}_{n_k}(t) + \mathbf{p}_0)] \cdot \mathbf{v}_1(t) dt d\mathbf{x} \\
&\quad \left. + q \int_{\Gamma} (u_{n_k} - u^*) \int_0^T [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{w}_{n_k}(t) - r_0) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{z}_{n_k}(t) + \mathbf{p}_0) \times \mathbf{n}] \cdot \mathbf{v}_1(t) dt d\zeta \right)
\end{aligned} \tag{4.56}$$

und dies für alle  $\mathbf{v} \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2$ . Man beachte hierbei, dass der Term  $F_L(\mathbf{y}_{n_k})$ , der in  $f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)$  eingeht (siehe Definition 4.4.1), unabhängig von  $u^*$  ist. Somit folgt aus (4.56)

$$\int_0^T \dot{\mathbf{y}}^*(t) \cdot \mathbf{v}(t) dt = \int_0^T f(\mathbf{y}^*, u^*)(t) \cdot \mathbf{v}(t) dt \quad \forall \mathbf{v} \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2. \tag{4.57}$$

Die Formel (4.57) hat ihre Gültigkeit, denn nach (4.52) gilt

$$\|f(\mathbf{y}_{n_k}, u^*)(t) - f(\mathbf{y}^*, u^*)(t)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \rightarrow 0 \quad \text{für } k \rightarrow \infty$$

und  $\{u_{n_k}\}$  konvergiert schwach gegen  $u^*$  in  $L^2(\Gamma)$ . Wir nutzen hierbei aus, dass die Steuerung nur linear in die reduzierte Formulierung (4.34) eingeht. Außerdem ist  $f_2$  unabhängig von der Steuerung. Darüber hinaus gelten nach (4.53) und (4.54) die folgenden Konvergenzen: Die Folge  $\{\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}_{n_k})\}$  konvergiert in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)$  gegen  $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*)$ ,  $\{\nabla \varphi(\cdot - r_{n_k})\}$  konvergiert in  $C([0, T]; X)$  gegen  $\nabla \varphi(\cdot - r^*)$  und  $\{\varphi(\cdot - r_{n_k})\}$  konvergiert in  $C([0, T]; H^{1/2}(\Gamma))$  gegen  $\varphi(\cdot - r^*)$ .

Man erhält aus (4.57) und für Testfunktionen aus  $\mathcal{D}(\Omega; \mathbb{R}^3)^2$  für fast alle  $t \in [0, T]$  nach dem Fundamentallema (Theorem 2.2.16), dass

$$\dot{\mathbf{y}}^*(t) = f(\mathbf{y}^*, u^*)(t) \quad \text{f.f.a. } t \in [0, T], \tag{4.58}$$

Nun folgt aus der Stetigkeit von  $\mathbf{y}^*$ , die Stetigkeit der rechten Seite  $f(\mathbf{y}^*, u^*)$  und somit nach (4.58), dass  $\mathbf{y}^* \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ . Da  $\mathbf{y}_{n_k}(0) = 0$  und  $\mathbf{y}_{n_k}$  im Grenzwert in der Maximumsnorm mit  $\mathbf{y}^*$  übereinstimmt, folgt somit für den Anfangswert von  $\mathbf{y}^*$ , dass dieser  $\mathbf{y}^*(0) = 0$  erfüllt. Damit ist  $\mathbf{y}^*$  eindeutige Lösung des reduzierten Systems (4.34) zur Steuerung  $u^*$ . Es bleibt zu zeigen, dass  $\mathbf{y}^*$  die Zustandsbeschränkung erfüllt. Mit der Konvergenz von  $\mathbf{y}^*$  in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  und der Tatsache, dass  $g_i \in C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ ,  $i = 1, \dots, m$  sind, gilt

$$g_i \left( \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{w}_{n_k}(t) + \mathbf{r}_0 \right) = g_i(\mathbf{w}^*(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0 \quad \forall i = 1, \dots, m.$$

Hiermit ist  $\mathbf{w}^*(t) + \mathbf{r}_0 \in \tilde{\Omega}$  gültig und das für alle  $t \in [0, T]$ . Die Nebenbedingungen von (P) sind vom Punkt  $(\mathbf{y}^*, u^*)$  damit erfüllt.

Die Stetigkeit und Konvexität der Norm  $\|u\|_{L^2(\Gamma)}^2$  und die schwache Konvergenz der Folge  $\{u_{n_k}\}_{k=1}^{\infty}$  in  $L^2(\Gamma)$  liefern

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|u_{n_k}\|_{L^2(\Gamma)}^2 \geq \|u^*\|_{L^2(\Gamma)}^2.$$

Mit Hilfe der starken Konvergenz des Zustands  $\{\mathbf{y}_{n_k}\}_{k=1}^\infty$  in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  lässt sich das Zielfunktional wie folgt abschätzen

$$\begin{aligned}
j &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left( \mathcal{J}(\mathbf{w}_{n_k}(t) + \mathbf{r}_0, u_{n_k}) \right) \\
&= \lim_{k \rightarrow \infty} \left( \int_0^T \mathcal{J}_1(\mathbf{w}_{n_k}(t) + \mathbf{r}_0) dt + \mathcal{J}_2(\mathbf{w}_{n_k}(T) + \mathbf{r}_0) + \frac{\alpha}{2} \|u_{n_k}\|_{L^2(\Gamma)^2} \right) \\
&\geq \lim_{k \rightarrow \infty} \left( \int_0^T \mathcal{J}_1(\mathbf{w}_{n_k}(t) + \mathbf{r}_0) dt + \mathcal{J}_2(\mathbf{w}_{n_k}(T) + \mathbf{r}_0) \right) + \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{2} \|u_{n_k}\|_{L^2(\Gamma)^2} \\
&\geq \int_0^T \mathcal{J}_1(\mathbf{w}^*(t) + \mathbf{r}_0) dt + \mathcal{J}_2(\mathbf{w}^*(T) + \mathbf{r}_0) + \frac{\alpha}{2} \|u^*\|_{L^2(\Gamma)^2}^2, \\
&= \mathcal{J}(\mathbf{w}^*(t) + \mathbf{r}_0, u^*)
\end{aligned}$$

da  $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2 \in C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R})$ . Damit ist  $(\mathbf{y}^*, u^*)$  eine globale, optimale Lösung von (P), und das Theorem ist somit bewiesen.  $\square$

#### 4.6. Optimalitätsbedingungen erster Ordnung.

Wir werden die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für das Optimalsteuerproblem (P) im Folgenden ausführlich herleiten und diskutieren. Hierzu benötigt man einige Vorbereitung. Zuerst gehen wir auf die linearisierte reduzierte Zustandsgleichung ein, prüfen die Differenzierbarkeit der reduzierten Form in Kapitel 4.6.1 und zeigen die Lösbarkeit des entstehenden linearisierten Systems in Kapitel 4.6.2. Danach werden in Kapitel 4.6.3 benötigte Regularitätsbedingungen betrachtet, um schlussendlich in Kapitel 4.6.4 und 4.6.5 die Optimalitätsbedingungen aufstellen zu können.

**Bemerkung 4.6.1.** *Man beachte, dass auch in diesem Abschnitt Annahme 4.2.1 gilt. In Bemerkung 4.3.10 wird auf die gewichteten Hilberträume, die zur Diskussion der Maxwell- und adjungierten Maxwell Gleichungen im Allgemeinen vonnöten sind, eingegangen.*

Zunächst definieren wir die reduzierte Form und die verwendeten Räume.

**Definition 4.6.2.** *Sei die reduzierte Form  $e$  eine Abbildung von*

$$e : Y \times L^2(\Gamma) \rightarrow Z.$$

*Hierbei definieren wir*

$$\begin{aligned}
Y &:= \{(\mathbf{w}, \mathbf{z}) \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 : \mathbf{w}(0) = 0, \mathbf{z}(0) = 0\}, \\
Y_r &:= \{\mathbf{w} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3) : \mathbf{w}(0) = 0\}, \\
Z &:= L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2, \\
R &:= C([0, T]; \mathbb{R}^m).
\end{aligned}$$

*Des Weiteren benennen wir  $\mathbf{y} := (\mathbf{w}, \mathbf{z})$ ,*

$$\mathbf{g} : Y_r \rightarrow R, \quad \mathbf{g} = (g_1, \dots, g_m)^\top, \quad g_i : Y_r \rightarrow C([0, T]), i = 1, \dots, m \text{ und } m \in \mathbb{N}$$

*und*

$$G := \begin{pmatrix} G_1 \\ G_2 \end{pmatrix} : \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ u \end{pmatrix} \in W := Y \times L^2(\Gamma) \mapsto \begin{pmatrix} e(\mathbf{y}, u) \\ \mathbf{g}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \in Z \times R.$$

Wir schreiben das zu betrachtende unendlichdimensionale Optimierungsproblem (P) als

$$\begin{aligned}
\min \quad & \mathcal{J}(\mathbf{w} + \mathbf{r}_0, u) \\
\text{s.t.} \quad & (\mathbf{w}, \mathbf{z}, u) \in \mathcal{F},
\end{aligned} \tag{Q}$$

wobei die zulässige Menge gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \mathcal{F} := \{(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u) \in Y \times L^2(\Gamma) : \\ e(\mathbf{w}, \mathbf{z}, u)(t) = 0, \quad g_i(\mathbf{w}(t) + \mathbf{r}_0) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \forall t \in [0, T]\}. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Man beachte hierbei, dass wir die Regularitätsforderungen an die Zustände  $\mathbf{w}, \mathbf{z}$  verändert haben. Der bisher benutzte Zustandsraum war  $C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ . Um jedoch die Diskussion der Adjungierten Gleichungen in Räumen höherer Regularität führen zu können, mildern wir die Regularitätsbedingungen an die Zustände auf  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2$  mit  $\mathbf{w}(0) = \mathbf{z}(0) = 0$  ab. Dies hat keinen Einfluss auf die bisher hergeleiteten Resultate, was wir im Folgendem kurz ausführen wollen.

Nach dem Existenzsatz aus Theorem 4.4.5 existiert eine eindeutige Lösung  $\mathbf{y}^* \in C_{\{0\}}^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  für jedes  $u \in L^2(\Gamma)$ . Die Lösung des reduzierten Systems (4.34) ist somit auch ein Element aus  $Y$ . Das Theorem 4.5.1 und dessen Beweis nutzt die kompakte Einbettungseigenschaft von  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 \hookrightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  aus, und man argumentiert hierbei schon mit dem passenden Zustandsraum  $Y$ . Betrachtet man nämlich

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = f(\mathbf{y}, u)(t) \quad \text{f.f.a. } t \in (0, T), \quad \text{mit } (\mathbf{y}, u) \in Y \times L^2(\Gamma),$$

dann folgt aus  $f(\mathbf{y}, u) \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ , dass die Lösung  $y \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ . Deshalb stimmt  $\mathbf{y}$  mit der eindeutigen Lösung aus Theorem 4.4.5 überein. Damit hat die Wahl des Zustandsraums  $Y$  für das Optimalsteuerproblem (P) keinen negativen Einfluss auf den optimalen Zustand und dessen Regularität. Außerdem bleiben die Komponenten des Zustandssystems (4.32) wohldefiniert.

#### 4.6.1. Das linearisierte System: Fréchet Differenzierbarkeit der reduzierten Form.

In Formel (4.34) wurde das reduzierte System, bestehend aus den Zustandsgleichungen, angegeben. Um Optimalitätsbedingungen angeben zu können, werden wir im nächsten Schritt das linearisierte, reduzierte System aufstellen. Die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung erfordern Differenzierbarkeitseigenschaften der reduzierten Form. In der Tat zeigt nachfolgendes Lemma, dass die reduzierte Form Fréchet differenzierbar ist. Hierfür benötigt man die Jacobi Matrix der rechten Seite  $j$  der Maxwell Gleichung (4.16), die durch

$$\begin{aligned} j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) &= \left( \partial_{\mathbf{r}} j(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t), \partial_{\mathbf{p}} j(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) \right) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{q}{c} \mathbf{v}(\mathbf{p}) \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r})^\top & -\frac{q}{c} \varphi(\cdot - \mathbf{r}) \mathbf{v}'(\mathbf{p}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} (t) \in \mathbb{R}^{6 \times 6} \end{aligned} \quad (4.60)$$

gegeben ist.

**Lemma 4.6.3** (Stetige Fréchet-Differenzierbarkeit der reduzierten Form).

Die reduzierte Form  $e$  ist von  $Y \times L^2(\Gamma)$  nach  $Z$  stetig Fréchet differenzierbar bezüglich des Zustandes  $y$  und der Steuerung  $u$  und ihre partiellen Ableitungen an der Stelle  $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{p} - \mathbf{p}_0, u) \in Y \times L^2(\Gamma)$  in Richtung  $(\phi_{\mathbf{r}}, \phi_{\mathbf{p}}, \phi_u) \in Y \times L^2(\Gamma)$  sind

gegeben durch

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial e_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) &= \dot{\phi}_{\mathbf{p}}(t) - \left(\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) \\
&= \dot{\phi}_{\mathbf{p}}(t) + q \int_{\Omega} [\nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \cdot \phi_{\mathbf{r}}(t)] \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) \, d\mathbf{x} \\
&\quad - q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) (\partial_{\mathbf{y}} \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi)(t) \, d\mathbf{x} \\
&\quad - q \int_{\Gamma} u \left[ \varphi(\boldsymbol{\varsigma} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}(t)) \phi_{\mathbf{p}}(t) \right. \\
&\quad\quad \left. - [\nabla\varphi(\boldsymbol{\varsigma} - \mathbf{r}(t)) \cdot \phi_{\mathbf{r}}(t)] \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \right] \times \mathbf{n} \, d\boldsymbol{\varsigma} \\
&\quad - q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R u) \left[ \nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \phi_{\mathbf{r}}(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \right. \\
&\quad\quad \left. - \nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}(t)) \phi_{\mathbf{p}}(t) \right] \, d\mathbf{x} \\
t \in [0, T], \phi &= \begin{pmatrix} \phi_{\mathbf{r}} \\ \phi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \in Y
\end{aligned}$$

mit folgender Ableitung des Lorentzkraftterms  $\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)$

$$\begin{aligned}
(\partial_{\mathbf{y}} \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi)(t) &= (\partial_{\mathbf{r}} \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi_{\mathbf{r}} + \partial_{\mathbf{p}} \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi_{\mathbf{p}})(t) \\
&= \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) (j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau)\phi(\tau)) \, d\tau \\
&\quad + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \int_0^t \mathcal{B}(t - \tau) (j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau)\phi(\tau)) \, d\tau \\
&\quad + \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}(t))\phi_{\mathbf{p}}(t) \times \left( \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} + \int_0^t \mathcal{B}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) \, d\tau \right).
\end{aligned}$$

Die zweite Komponente und deren partielle Ableitung bezüglich des Zustandes hat die Gestalt

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial e_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) &= \dot{\phi}_{\mathbf{r}}(t) - \left(\frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) \\
&= \dot{\phi}_{\mathbf{r}}(t) - v'(\mathbf{p}(t))\phi_{\mathbf{p}}(t) \\
t \in [0, T], \phi &\in Y
\end{aligned}$$

Des Weiteren haben die partiellen Ableitungen bezüglich der Steuerung  $u$  die Form

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial e_1}{\partial u}(\mathbf{y}, u)\phi_u\right)(t) &= - \left(\frac{\partial f_1}{\partial u}(\mathbf{y}, u)\phi_u\right)(t) \\
&= - q \int_{\Gamma} \phi_u \varphi(\boldsymbol{\varsigma} - \mathbf{r}(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{n} \, d\boldsymbol{\varsigma} \\
&\quad + q \int_{\Omega} (-\Delta^*)^{-1} R \phi_u [\nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))] \, d\mathbf{x} \\
\left(\frac{\partial e_2}{\partial u}(\mathbf{y}, u)\phi_u\right)(t) &= - \left(\frac{\partial f_2}{\partial u}(\mathbf{y}, u)\right) = 0 \\
t \in [0, T], \phi_u &\in L^2(\Gamma).
\end{aligned}$$

**Beweis.** Man betrachtet die einzelnen Komponenten der partiellen Ableitungen. Der Ableitungsoperator bzgl. der Zeit, also die Zeitableitung, der auf  $\mathbf{r}, \mathbf{p}$  wirkt ist sowohl linear als auch beschränkt und somit stetig Fréchet differenzierbar von dem Raum  $H^1([0, T]; \mathbb{R}^3)$  nach  $L^2([0, T]; \mathbb{R}^3)$ . Wir diskutieren die Fréchet Differenzierbarkeit von  $e$  in (4.33) für ausgewählte Komponenten im ersten und zweiten Term

der reduzierten Form. Betrachten wir die Differenzierbarkeit des Terms  $\nabla\varphi(\cdot -)$  aus (4.33) und definieren den Nemystkii Operator

$$\Pi : r \mapsto \nabla\varphi(\cdot - r), \quad \Pi : C([0, T]; \mathbb{R}^3) \rightarrow C([0, T]; X).$$

Der Kandidat für die Ableitung ist

$$\Pi' : C([0, T]; \mathbb{R}^3) \rightarrow \mathcal{L}(C([0, T]; \mathbb{R}^3); C([0, T]; X))$$

mit

$$(\Pi'(\mathbf{r})\phi_r)(t) = \nabla^2\varphi(\cdot - \mathbf{r})\phi_r(t), \quad t \in [0, T], \phi_r \in C([0, T]; \mathbb{R}^3).$$

Wir erkennen, dass somit der Kandidat für die partielle Ableitung linear ist und zudem stetig, weil

$$\|\nabla^2\varphi(\cdot - r)\phi_r\|_{C([0, T]; X)} \leq L_{\varphi, 2}\|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)}$$

unter Ausnutzung der Lipschitzsteigkeit von  $\nabla^2\varphi$ . Die partielle Differenzierbarkeit des nichtlinearen Nemystkii Operators  $\Pi$  folgt aus der unten stehenden Restgliedabschätzung

$$\begin{aligned} & \|\nabla\varphi(\cdot - (\mathbf{r} + \phi_r)) - \nabla\varphi(\cdot - \mathbf{r}) - \nabla^2\varphi(\cdot - \mathbf{r})\phi_r\|_{C([0, T]; X)}^2 \\ &= \max_{t \in [0, T]} \int_{\Omega} |\nabla\varphi(x - \mathbf{r}(t) - \phi_r(t)) - \nabla\varphi(x - \mathbf{r}(t)) - \nabla^2\varphi(x - \mathbf{r}(t))\phi_r(t)|_2^2 dx \\ &= \max_{t \in [0, T]} \int_{\Omega} \left| \int_0^1 \nabla^2\varphi(x - \mathbf{r}(t) - \theta\phi_r(t))\phi_r(t) d\theta - \nabla^2\varphi(x - \mathbf{r}(t))\phi_r(t) \right|_2^2 dx \\ &\leq \max_{t \in [0, T]} \int_{\Omega} \int_0^1 L_{\varphi, 2}^2 \theta^2 |\phi_r(t)|_2^4 d\theta dx = \frac{1}{3} L_{\varphi, 2}^2 |\Omega| \|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)}^4, \end{aligned}$$

wobei  $L_{\varphi, 2}$  die Lipschitz Konstante von  $\nabla^2\varphi$  ist.

Es gilt somit

$$\begin{aligned} & \frac{\|\nabla\varphi(\cdot - (\mathbf{r} + \phi_r)) - \nabla\varphi(\cdot - \mathbf{r}) - \nabla^2\varphi(\cdot - \mathbf{r})\phi_r\|_{C([0, T]; X)}}{\|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)}} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{3}} L_{\varphi, 2} \sqrt{|\Omega|} \|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0 \quad \text{für } \|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Aufgrund der Einbettung von  $H^1([0, T]; \mathbb{R}^3) \hookrightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)$ , erhalten wir die partielle Differenzierbarkeit des Nemystkii Operators  $\Pi : H^1([0, T]; \mathbb{R}^3) \rightarrow C([0, T]; X)$ , denn

$$\begin{aligned} & \frac{\|\Pi(\mathbf{r} + \phi_r) - \Pi(\mathbf{r}) - \Pi'(\mathbf{r})\phi_r\|_{C([0, T]; X)}}{\|\phi_r\|_{Y_r}} \\ &\leq \tilde{c} \frac{\|\Pi(\mathbf{r} + \phi_r) - \Pi(\mathbf{r}) - \Pi'(\mathbf{r})\phi_r\|_{C([0, T]; X)}}{\|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)}} \rightarrow 0, \quad \text{für } \phi_r \rightarrow 0 \text{ in } Y_r \end{aligned}$$

mit  $\tilde{c} \geq 0$ .

Darüber hinaus ist die Fréchet Ableitung stetig, denn es gilt für  $\{\mathbf{r}_n\}_{n=1}^{\infty}$  mit  $\mathbf{r}_n(t) \rightarrow \mathbf{r}^*(t)$  in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)$

$$\begin{aligned} & \|\Pi'(\mathbf{r}_n) - \Pi'(\mathbf{r}^*)\|_{\mathcal{L}(C([0, T]; \mathbb{R}^3); C([0, T]; X))} \\ &= \sup_{\phi_r \in C([0, T]; \mathbb{R}^3), \|\phi_r\|=1} \|(\Pi'(\mathbf{r}_n) - \Pi'(\mathbf{r}^*))\phi_r\|_{C([0, T]; X)} \\ &\leq \sup_{\phi_r \in C([0, T]; \mathbb{R}^3), \|\phi_r\|=1} L_{\varphi, 2} \|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \|\phi_r\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \\ &\leq L_{\varphi, 2} \|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}^*\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Damit ist  $\Pi$  an jeder Stelle  $\mathbf{r}(t) \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)$  stetig Fréchet differenzierbar. Wir betrachten nun für einen weiteren Term die partielle Ableitung. Wir führen den Nemystkii Operator

$$\tilde{\Pi} : (\mathbf{r}, \mathbf{p}) \mapsto \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \quad \tilde{\Pi} : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; X)^2,$$

ein, für den gilt

$$\tilde{\Pi}' : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow \mathcal{L}(C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2; C([0, T]; X)^2)$$

und dessen Kandidat für die Ableitung gegeben ist durch

$$(\tilde{\Pi}'(\mathbf{y})\phi)(t) = (\mathbf{j}'(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi)(t), \quad t \in [0, T], \phi \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$$

mit  $\mathbf{j}'$  aus (4.60). Die mögliche Ableitung ist linear und außerdem stetig, da

$$\begin{aligned} \|\mathbf{j}'(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi\|_{C([0, T]; X)^2} &\leq \max_{t \in [0, T]} \frac{q}{c} \left( cL_{\varphi, 1} |\phi_r(t)|_2 + L_{\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} |\phi_p(t)|_2 \right) \\ &\leq \tilde{c} \|\phi\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \end{aligned}$$

mit  $\tilde{c} \geq 0$ . Dies folgt aus (4.35), (4.36) und der Lipschitzstetigkeit von  $\varphi, \nabla\varphi$ . Dann gilt folgende Restgliedabschätzung

$$\begin{aligned} &\|\mathbf{j}(\mathbf{y} + \phi) - \mathbf{j}(\mathbf{y}) - \mathbf{j}'(\mathbf{y})\phi\|_{C([0, T]; X)^2}^2 \\ &= \max_{t \in [0, T]} \left( \int_{\Omega} \left| \mathbf{j}(\mathbf{y}(t) + \phi(t)) - \mathbf{j}(\mathbf{y}(t)) - \mathbf{j}'(\mathbf{y}(t))\phi(t) \right|_2^2 dx \right) \\ &= \max_{t \in [0, T]} \left( \int_{\Omega} \left| \int_0^1 \mathbf{j}'(\mathbf{y}(t) + \theta\phi(t))\phi(t) d\theta - \mathbf{j}'(\mathbf{y}(t))\phi(t) \right|_2^2 dx \right) \\ &= \max_{t \in [0, T]} \left( \int_{\Omega} \left| \int_0^1 \frac{q}{c} v(\mathbf{p}(t) + \theta\phi_p(t)) \nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t) - \theta\phi_r(t))^\top \phi_r(t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{q}{c} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t) - \theta\phi_r(t)) v'(\mathbf{p}(t) + \theta\phi_p(t)) \phi_p(t) - \mathbf{j}'(\mathbf{y}(t))\phi(t) \right|_2^2 d\theta \right) dx \\ &\leq \max_{t \in [0, T]} \int_{\Omega} \int_0^1 C\theta^2 |\phi(t)|_2^4 d\theta dx = \frac{1}{3} C |\Omega| \|\phi(t)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2}^4. \end{aligned}$$

mit einer Konstante  $C \geq 0$ . Es wurde sowohl der integrale Mittelwertsatz als auch die Lipschitz Eigenschaft der einzelnen Komponenten, (4.35), (4.36) (Beschränktheit von  $v, v'$  in der euklidischen und Frobenius Norm) und (4.39) benutzt. Die Abschätzung orientiert sich damit an den Beweis von Lemma 4.4.3. Also gilt

$$\frac{\|\mathbf{j}(\mathbf{y} + \phi) - \mathbf{j}(\mathbf{y}) - \mathbf{j}'(\mathbf{y})\phi\|_{C([0, T]; X)^2}}{\|\phi\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2}} \rightarrow 0 \quad \text{für } \|\phi(t)\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2} \rightarrow 0.$$

Aufgrund der Einbettung von  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 \hookrightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ , erhalten wir wieder die partielle Differenzierbarkeit des Nemystkii Operators  $\tilde{\Pi} : H^1(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; X)^2$ . Denn es gilt für  $\tilde{\Pi}$

$$\begin{aligned} &\frac{\|\tilde{\Pi}(\mathbf{y} + \phi) - \tilde{\Pi}(\mathbf{y}) - \tilde{\Pi}'(\mathbf{y})\phi\|_{C([0, T]; X)^2}}{\|\phi\|_Y} \\ &\leq \tilde{c} \frac{\|\tilde{\Pi}(\mathbf{y} + \phi) - \tilde{\Pi}(\mathbf{y}) - \tilde{\Pi}'(\mathbf{y})\phi\|_{C([0, T]; X)^2}}{\|\phi\|_{C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2}} \rightarrow 0, \quad \text{für } \phi \rightarrow 0 \text{ in } Y \end{aligned}$$

mit  $\tilde{c} \geq 0$ . Der Beweis der stetigen Fréchet Differenzierbarkeit von  $\tilde{\Pi}$  erfolgt durch

$$\begin{aligned} & \left\| \tilde{\Pi}(\mathbf{y}_n) - \tilde{\Pi}(\mathbf{y}^*) \right\|_{\mathcal{L}(C([0,T];\mathbb{R}^3)^2; C([0,T];X)^2)} \\ &= \sup_{\phi \in C([0,T];\mathbb{R}^3)^2, \|\phi\|=1} \left\| \left( \tilde{\Pi}(\mathbf{y}_n) - \tilde{\Pi}(\mathbf{y}^*) \right) \phi \right\|_{C([0,T];X)^2} \\ &\leq \sup_{\phi \in C([0,T];\mathbb{R}^3)^2, \|\phi\|=1} \tilde{c} \|\mathbf{y}_n - \mathbf{y}^*\|_{C([0,T];\mathbb{R}^3)^2} \|\phi_r\|_{C([0,T];\mathbb{R}^3)} \\ &\quad + \tilde{c} \|\mathbf{y}_n - \mathbf{y}^*\|_{C([0,T];\mathbb{R}^3)^2} \|\phi_p\|_{C([0,T];\mathbb{R}^3)} \\ &\leq \tilde{c} \|\mathbf{y}_n - \mathbf{y}^*\|_{C([0,T];\mathbb{R}^3)^2} \rightarrow 0 \text{ für } \mathbf{y}_n \rightarrow \mathbf{y}^* \in C([0,T];\mathbb{R}^3)^2 \end{aligned}$$

wobei wir im Stile von der vorangegangenen Restgliedabschätzung abschätzen bzw. von (4.43).

Die restlichen Komponenten der rechten Seite  $f$  des reduzierten Systems (4.34) lassen sich mit ähnlichen Mitteln abschätzen, sodass man die stetige, partielle Differenzierbarkeit für jeden einzelnen Term von  $f$  nach  $y$  von  $Y$  nach  $Z$  zeigen kann. Da  $u$  nur linear in der rechten Seite  $f_1$  vorkommt, ist auch  $f$  nach  $u$  stetig partiell differenzierbar. Es gilt somit, dass die partiellen Ableitungen von  $f$  existieren. Nach Cartan [19, Theorem 3.7.1] folgt damit die stetige Fréchet Differenzierbarkeit der reduzierten Form  $e$  von  $Y \times L^2(\Gamma)$  nach  $Z$ .  $\square$

#### 4.6.2. Das linearisierte System: Existenz und Eindeutigkeit.

Als eine sofortige Konsequenz aus Lemma 4.6.3 über die stetige Fréchet- Differenzierbarkeit der reduzierten Form, folgt die Beschränktheit der einzelnen partiellen Ableitungen. Dies wollen wir noch ein weiteres Mal mit folgendem Lemma hervorheben.

**Lemma 4.6.4** (Beschränktheit der partiellen Ableitungen).

Seien  $(\mathbf{y}, u) \in Y \times L^2(\Gamma)$  und  $\phi \in Y$ . Dann existiert eine nicht negative Konstante  $C \geq 0$ , sodass

$$\left| \left( \frac{\partial f}{\partial y}(\mathbf{y}, u)\phi \right)(t) \right|_2 \leq C \|\phi\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2} \quad \forall t \in [0, T]$$

**Beweis.** Wir zeigen diese Aussage an dem ersten Term von  $\left( \frac{\partial f_1}{\partial y}(\mathbf{y}, u)\phi \right)(t)$ , d.h. wir zeigen die Beschränktheit von

$$q \int_{\Omega} [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \cdot \phi_r(t)] \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) \, d\mathbf{x}.$$

Unter Berücksichtigung von (4.44), (4.49) und (4.48) gilt

$$\begin{aligned} & \left| q \int_{\Omega} [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \cdot \phi_r(t)] \mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t) \, d\mathbf{x} \right|_2 \\ &\leq q \|\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_X \|\mathbf{F}_L(\mathbf{r}, \mathbf{p})(t)\|_X |\phi_r(t)|_2 \\ &\leq q \|\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_X \left( 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi c} \right) \right) |\phi_r(t)|_2 \\ &\leq q \sqrt{|\Omega|} \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| \left( 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi c} \right) \right) |\phi_r(t)|_2 \\ &\leq C \|\phi\|_{C([0,t];\mathbb{R}^3)^2} \quad \forall t \in [0, T] \end{aligned}$$

mit  $C := q \sqrt{|\Omega|} \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| \left( 2M e^{\omega T} \left( \|(\mathbf{E}_0, \mathbf{B}_0)\|_{X \times X} + qT \sqrt{C_\varphi c} \right) \right) > 0$ . Betrachtet man sich den Term  $q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) (j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) \phi(\tau)) \, d\tau \, d\mathbf{x}$ , so

gilt, dass

$$\begin{aligned}
& \left| q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}(t)) \int_0^t \mathcal{E}(t - \tau) (j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})(\tau) \phi(\tau)) d\tau d\mathbf{x} \right|_2 \\
& \leq \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Omega)} M e^{\omega T} \|j'(\mathbf{r}, \mathbf{p})\phi\|_{L^1([0, t]; X \times X)} \\
& \leq \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Omega)} M e^{\omega T} q \left( \int_0^t \|\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}(\tau))\|_X |v(\mathbf{p}(\tau))|_2 |\phi_r(\tau)|_2 d\tau \right. \\
& \quad \left. + \int_0^t \|\varphi(\cdot - \mathbf{r}(t))\|_{L^2(\Omega)} |v'(\mathbf{p}(t))|_F |\phi_p(\tau)|_2 d\tau \right) \\
& \leq q M e^{\omega T} \sqrt{C_\varphi} \left( c \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| + \sqrt{C_\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \right) \max_{\tau \in [0, t]} |\phi(\tau)|_2 \int_0^T 1 d\tau \\
& \leq q M e^{\omega T} \sqrt{C_\varphi} \left( c \sqrt{|\Omega|} \max_{x \in \mathbb{R}^3} |\nabla \varphi(\mathbf{x})| + \sqrt{C_\varphi} \frac{\sqrt{3}}{m_0^q} \right) T \|\phi\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2} \quad \forall t \in [0, T]
\end{aligned}$$

Hierbei verwenden wir die Abschätzungen (A.2), (4.35), (4.36), (4.38) und (4.48). Die restlichen Terme von  $\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t)$  können in ähnlicher Weise behandelt werden, siehe hierzu Lemma 4.4.3. Dies erbringt den Nachweis der Beschränktheit der Terme von  $\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t)$ .  $\square$

**Bemerkung 4.6.5.** *Man beachte, dass für die lineare Abbildung  $\phi \mapsto \frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi$  und für alle  $\phi_1, \phi_2, \tilde{\phi} \in Y$  folgende Äquivalenz gilt*

$$\begin{aligned}
& \left| \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi_1\right)(t) - \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi_2\right)(t) \right|_2 \leq L \|\phi_1 - \phi_2\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2}, L \geq 0, \forall t \in [0, T] \\
& \Leftrightarrow \left| \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)[\phi_1 - \phi_2]\right)(t) \right|_2 \leq L \|\phi_1 - \phi_2\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2}, \quad \text{mit } L \geq 0, \forall t \in [0, T] \\
& \Leftrightarrow \left| \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\tilde{\phi}\right)(t) \right|_2 \leq L \|\tilde{\phi}\|_{C([0, t]; \mathbb{R}^3)^2} \quad \text{mit } L \geq 0, \forall t \in [0, T].
\end{aligned}$$

Im Fall einer linearen Abbildung ist somit Lipschitzstetigkeit äquivalent zu Beschränktheit von  $\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)$ . Dies motiviert Lemma 4.6.4.

**Theorem 4.6.6** (Existenz und Eindeutigkeit der linearisierten Gleichung).

Sei  $(\mathbf{y}, u) \in Y \times L^2(\Gamma)$  gegeben. Dann existiert für jedes  $\mathbf{h} \in Z$  eine eindeutige Lösung  $\phi^* = (\phi_r^*, \phi_p^*) \in Y$  der linearisierten Gleichung

$$\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi = \mathbf{h}. \tag{4.61}$$

**Beweis.** Zum Nachweis der Existenz und Eindeutigkeit wenden wir wie in Theorem 4.4.5 Banach's Fixpunktsatz an. Die linearisierte Gleichung (4.61) lässt sich mit Hilfe von Lemma 4.6.3 schreiben als

$$\begin{pmatrix} \dot{\phi}_p(t) \\ \dot{\phi}_r(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) \\ \left(\frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(t) \end{pmatrix} + \mathbf{h}(t) \quad \text{f.f.a. } t \in [0, T], \phi(0) = 0.$$

Das Anfangswertproblem ist äquivalent zur Gleichung

$$\begin{pmatrix} \phi_p(t) \\ \phi_r(t) \end{pmatrix} = \int_0^t \left[ \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)(\tau) + \mathbf{h}(\tau) \right] d\tau$$

in integraler Form, wobei die Nullanfangswerte berücksichtigt wurden und die Notation  $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi = \left(\frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi, \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi\right)$  verwendet wird. Wir definieren

$$G_l : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2, \quad G_l(\phi)(t) := \int_0^t \partial_{\mathbf{y}} f(\mathbf{y}, u)(\phi)(\tau) + \mathbf{h}(\tau) \, d\tau.$$

Es folgt aus Lemma 4.6.4 und der Tatsache, dass  $\int_0^t \mathbf{h}(\tau) \, d\tau$  absolut stetig ist (siehe Definition B.0.3), die Stetigkeit von  $G_l(\phi)$ . Die absolute Stetigkeit des Integrals für Funktionen  $h \in Z$  folgt aus dem Lebegueschen Differentiationssatz dargestellt in [4, Kapitel 1, U1.6]. Mit der Definition der Norm  $\|\phi\|_{G_l} := \max_{t \in [0, T]} e^{-Ct} |\phi(t)|_2$  und Lemma 4.6.4 ergibt sich, dass (4.61) äquivalent zur Fixpunktgleichung  $\phi(t) = G_l(\phi)(t)$  für alle  $t \in [0, T]$  ist und dass  $G_l$  kontraktiv ist mit der Abschätzung

$$\begin{aligned} \|G_l(\phi_1) - G_l(\phi_2)\|_{G_l} &= \max_{t \in [0, T]} e^{-Ct} \left| \int_0^t \partial_{\mathbf{y}} f(\mathbf{y}, u)(\phi_1 - \phi_2)(\tau) \, d\tau \right| \\ &\leq C \max_{t \in [0, T]} e^{-Ct} \int_0^t \left( \max_{s \in [0, \tau]} e^{Cs} e^{-Cs} |\phi_1(s) - \phi_2(s)|_2 \right) \, d\tau \\ &\leq C \max_{t \in [0, T]} \left[ \frac{1}{C} - \frac{1}{C} e^{-Ct} \right] \|\phi_1 - \phi_2\|_{G_l} \\ &\leq (1 - e^{-CT}) \|\phi_1 - \phi_2\|_{G_l}, \end{aligned}$$

wobei  $0 \leq (1 - e^{-CT}) < 1$ . Damit folgt nach dem Fixpunktsatz von Banach (Theorem 2.2.24), dass eine eindeutige Lösung  $\phi^* \in Y$  von (4.61) für jedes  $h \in Z$  existiert.  $\square$

Es gilt somit folgende Aussage

**Lemma 4.6.7.** *Es existiert eine eindeutige Lösung  $\phi^*(t) \in Y$  des linearisierten Gleichungssystems*

$$\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)\phi = -\frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}, u)\phi_u \quad (4.62)$$

mit  $\phi \in Y$  und  $\phi_u \in L^2(\Gamma)$ ,  $\frac{\partial e}{\partial u} : L^2(\Gamma) \rightarrow Z$ .

**Beweis.** Die Aussage folgt direkt aus Theorem 4.6.6.  $\square$

**Bemerkung 4.6.8.** *Als Konsequenz hieraus folgt, dass  $\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)$  bijektiv ist.*

### 4.6.3. Constraint Qualifications und Robinson's Regularitätsbedingung.

Wir definieren uns die Lagrangefunktion des Optimierungsproblems mit Multiplikatoren  $\pi, \varrho$  und  $\lambda$  durch

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, u, \pi, \varrho, \lambda) &:= \mathcal{J}(\mathbf{r}, u) + \left\langle \begin{pmatrix} \pi \\ \varrho \end{pmatrix}, \mathbf{e}(\mathbf{y}, u) \right\rangle_{Z^*, Z} + \langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}) \rangle_{R^*, R} \\ &:= L(\mathbf{r}, \mathbf{p}, u, \pi, \varrho) + \langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}) \rangle_{R^*, R}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

zu den gegebenen Zuständen  $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ , der Steuerung  $u$  und Zustandsbeschränkung (Beschränkung der Position)  $\mathbf{g}(\mathbf{r})$ . Nach Lemma 4.6.3 ist man nun in der Lage über Optimalitätsbedingungen zu sprechen.

**Bemerkung 4.6.9.**

- *Im Folgenden sei  $\tilde{\mathbf{y}}^* := (\mathbf{y}^*, u^*) = (\mathbf{w}^*, \mathbf{z}^*, u^*) \in W := Y \times L^2(\Gamma)$  ein lokales Optimum von (P).*
- *Beachte, dass die Zustände mit  $\mathbf{r}^* = \mathbf{w}^* + \mathbf{r}_0$  und  $\mathbf{p}^* = \mathbf{z}^* + \mathbf{p}_0$  gegeben sind.*

- Die Zustandsschranken  $g_i$  sind nach Annahme 4.2.19 Operatoren, die  $g_i : \mathbf{r} \mapsto g_i(\mathbf{r})$  mit  $C([0, T]; \mathbb{R}^3) \rightarrow C([0, T]; \mathbb{R})$ ,  $i = 1, \dots, m$  abbilden und Fréchet differenzierbar sind.

Bevor wir uns über nötige *Constraint Qualifications* Gedanken machen, definieren wir der Vollständigkeit halber was man unter dem Bild einer Menge, dem Linearisierungskegel und Tangentialkegel versteht. Des Weiteren geben wir einen verallgemeinerten Satz über die offene Abbildung an.

**Definition 4.6.10** (Konische Hülle, Linearisierungskegel und Tangentialkegel).

- Wir benennen das Bild einer beliebigen Menge  $\mathcal{M} \subset \mathcal{X}$  unter dem Operator  $A_1$  mit  $A_1\mathcal{M} := \{A_1\mathbf{x} : \mathbf{x} \in \mathcal{M}\} \subset \mathcal{Y}$ .
- Wir definieren die offene Kugel in  $\mathcal{X}$  um den Punkt  $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$  mit Radius  $\epsilon > 0$  durch

$$B_{\mathcal{X}}(\mathbf{x}, \epsilon) = \{\mathbf{y} \in \mathcal{X} : \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathcal{X}} < \epsilon\}.$$

- Die Menge  $\mathcal{K}(\mathcal{M}; \mathbf{x})$  mit  $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^m$ ,  $\mathcal{M} \neq \emptyset$ , und  $\mathbf{x} \in \mathcal{M}$  ist die konische Hülle, definiert durch

$$\mathcal{K}(\mathcal{M}; \mathbf{x}) := \{\alpha(\mathbf{y} - \mathbf{x}) : \mathbf{y} \in \mathcal{M}, \alpha \geq 0 \in \mathbb{R}\}.$$

- Sei  $\tilde{\mathbf{y}} \in \mathcal{F}$ . Die Menge

$$T(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}) := \left\{ \mathbf{s} \in W : \exists \{\tilde{\mathbf{y}}_n\} \subset \mathcal{F}, \{t_n\} \subset \mathbb{R}^+ \right. \\ \left. \text{mit } t_n \searrow 0, \tilde{\mathbf{y}}_n \rightarrow \tilde{\mathbf{y}}, \frac{\tilde{\mathbf{y}}_n - \tilde{\mathbf{y}}}{t_n} \rightarrow \mathbf{s} \right\},$$

bezeichnet den Tangentialkegel. Der Linearisierungskegel ist bestimmt durch

$$L(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}) := \left\{ \mathbf{s} \in W : \mathbf{s} \in \mathcal{K}(W; \tilde{\mathbf{y}}), G'(\tilde{\mathbf{y}})\mathbf{s} \in \mathcal{K}(-K; G(\tilde{\mathbf{y}})) \right\},$$

wobei  $K \subset \mathbb{R}$  ein abgeschlossener, konvexer Kegel ist.

In Zowe [117] ist eine Verallgemeinerung von dem Satz über die offene Abbildung bewiesen, der im Folgendem benötigt wird.

**Theorem 4.6.11** (Verallgemeinerter Satz über die offene Abbildung).

Sei  $A_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{X}_1, \mathcal{Y}_1)$  ein linearer, beschränkter Operator mit Banachräume  $\mathcal{X}_1, \mathcal{Y}_1$ . Des Weiteren gelte  $C_1 \subset \mathcal{X}_1$  nichtleer, konvex und abgeschlossen. Die Menge  $K_1 \subset \mathcal{Y}_1$  sei ein abgeschlossener, konvexer Kegel und es gelte  $\bar{x} \in C_1$ ,  $\bar{y} \in K_1$ . Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

- $A_1\mathcal{K}(C_1; \bar{x}) + \mathcal{K}(K_1; \bar{y}) = \mathcal{Y}_1$
- Es existiert ein  $\epsilon$ , sodass

$$B_{\mathcal{Y}_1}(0, \epsilon) \subset A_1 \left( (C_1 - \bar{x}) \cap \overline{B_{\mathcal{X}_1}(0, 1)} \right) + (K_1 - \bar{y}) \cap \overline{B_{\mathcal{Y}_1}(0, 1)}.$$

Gehen wir nun wieder auf unser konkretes Optimierungsproblem ein. Wir geben jetzt die benötigte *Constraint Qualification* an.

**Definition 4.6.12** (Linearisierte Slaterbedingung).

Existiert ein  $h_0 \in L^2(\Gamma)$  und  $\delta > 0$ , sodass

$$g_i(\mathbf{r}^*(t)) + g'_i(\mathbf{r}^*(t))\phi_{\mathbf{r}}(t) \leq \delta < 0 \quad \forall t \in [0, T], \quad i = 1, \dots, m \quad (4.64)$$

gilt, wobei  $\phi = (\phi_{\mathbf{r}}, \phi_{\mathbf{p}}) \in Y$  die Lösung von (4.61) mit  $h = h_0$  ist. Wir nennen diese Bedingung die linearisierte Slaterbedingung.

Man definiert die Menge aller Punkte, die die Zustandsschranke erfüllen

$$K := \{\mathbf{k} \in R : k_i(t) \geq 0, \forall t \in [0, T], i = 1, \dots, m\}. \quad (4.65)$$

**Lemma 4.6.13.** *Die Menge  $K$ , die in (4.65) definiert ist, ist ein abgeschlossener, konvexer Kegel mit nichtleerem Inneren.*

**Beweis.** Mit der Definition von  $K$  ist das Innere von  $K$  nichtleer, da die konstante Funktion  $\mathbf{k} \equiv 1$  ein innerer Punkt ist. Darüber hinaus folgt direkt aus den Definitionen der Konevexität und des Kegels die konvexe Kegeleigenschaft von  $K$ . Die Abgeschlossenheit folgt aus der Stetigkeit der einzelnen Komponenten.  $\square$

**Bemerkung 4.6.14.** *Mit der Definition (4.65) schreibt sich (4.64) als*

$$-(g(\mathbf{r}^*(t)) + g'(\mathbf{r}^*(t))\phi_{\mathbf{r}}(t)) \in \text{int } K \quad \forall t \in [0, T].$$

**Definition 4.6.15** (Regularitätsbedingung nach Robinson).

*Erfüllt ein zulässiger Punkt  $\tilde{\mathbf{y}}^* := (\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, u^*)^\top \in \mathcal{F}$ , die Bedingung*

$$0 \in \text{int} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{g}(\mathbf{r}^*) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \partial_{\mathbf{r}}\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) & \partial_{\mathbf{p}}\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) & \partial_u\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) \\ \partial_{\mathbf{r}}\mathbf{g}(\mathbf{r}^*) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y - \mathbf{y}^* \\ L^2(\Gamma) - u^* \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ K \end{pmatrix} \right\} \quad (4.66)$$

*so nennt man  $\tilde{\mathbf{y}}^*$  regulär.*

**Bemerkung 4.6.16.** *Ist Robinsons Regularitätsbedingung gültig in  $\tilde{\mathbf{y}}^* \in \mathcal{F}$ , so gilt sowohl, dass der Linearisierungskegel  $L(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*)$  im Tangentialkegel  $T(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*)$  enthalten ist, als auch  $T(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*) \subset \overline{L(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*)}$ , damit also  $T(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*) = \overline{L(\mathcal{F}; \tilde{\mathbf{y}}^*)}$ . Ein ausführlicher Beweis lässt sich in [70, Kapitel 13] nachlesen.*

**Lemma 4.6.17** (Regularitätsbedingung nach Zowe & Kurcyusz).

*Der Punkt  $\tilde{\mathbf{y}}^* \in \mathcal{F}$  ist genau dann regulär, falls*

$$\begin{pmatrix} \partial_{\mathbf{r}}\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) & \partial_{\mathbf{p}}\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) & \partial_u\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) \\ \partial_{\mathbf{r}}\mathbf{g}(\mathbf{r}^*) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y \\ L^2(\Gamma) \end{pmatrix} + \mathcal{K} \left( \begin{pmatrix} 0 \\ K \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ -\mathbf{g}(\mathbf{r}^*) \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} Z \\ R \end{pmatrix} \quad (4.67)$$

*gilt. Die Bedingung (4.67) wird Regularitätsbedingung nach Zowe & Kurcyusz genannt.*

**Lemma 4.6.18.** *Sei  $\tilde{\mathbf{y}}^* = (\mathbf{y}^*, u^*) \in W$  eine lokale Optimallösung von (P). Des Weiteren gelte die linearisierte Slaterbedingung nach Definition 4.6.12. Dann ist die Regularitätsbedingung nach Robinson (4.66) erfüllt.*

**Bemerkung 4.6.19.** *Ein Nachweis von Lemma 4.6.17 findet sich in [117] wieder. Die Regularitätsbedingungen von Robinson und Zowe/Kurcyusz sind nach [70, Satz 14.9] äquivalent. Der Beweis von Lemma 4.6.18 erfolgt unter Ausnutzung von (4.64). Wir benötigen hierzu die Surjektivität von  $\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}, u)$ , die aus Lemma 4.6.7 folgt, um den Satz über die offene Abbildung (Theorem 4.6.11) anwenden zu können. Wir verweisen auf [56, Kapitel 1, Lemma 1.14]. Dies ist ausführlicher bewiesen in [70, Satz 15.6].*

Für den weiteren Verlauf der Arbeit nehmen wir Folgendes an:

**Annahme 4.6.20.** *Die linearisierte Slaterbedingung sei für ein  $h_0 \in L^2(\Gamma)$  erfüllt.*

#### 4.6.4. Notwendige Optimalitätsbedingungen.

Mit Hilfe der Regularitätsbedingungen von Robinson (4.66) lassen sich Optimalitätsbedingungen in Form der Karush-Kuhn-Tucker Bedingungen angeben. Die vorgestellten KKT-Bedingungen finden sich in dem Buch [56, Kapitel 1.7.3.4] wieder. Hierzu benötigt man noch die Definition des Dualkegels.

**Definition 4.6.21** (Dualkegel).

Der Dualkegel  $K_1^+ \subset \mathcal{X}^*$  eines konvexen Kegels  $K_1 \subset \mathcal{X}$  ist definiert durch

$$K_1^+ := \{\mathbf{k}^* \in \mathcal{X}^* : \langle \mathbf{k}^*, \mathbf{k} \rangle_{\mathcal{X}^*, \mathcal{X}} \geq 0 \quad \forall \mathbf{k} \in K_1\}.$$

**Bemerkung 4.6.22.** Der Dualkegel ist ein konvexer und abgeschlossener Kegel.

**Theorem 4.6.23** (KKT-System).

Sei  $\tilde{\mathbf{y}}^* = (\mathbf{y}^*, u^*) \in Y \times L^2(\Gamma)$  ein lokal optimaler Punkt von (P). Gelte Annahme 4.6.20. Dann existieren Lagrange-Multiplikatoren  $(\pi, \varrho, \lambda) \in Z \times R^*$ , sodass folgende KKT-Bedingungen erfüllt sind:

$$\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*)(t) = 0, \quad g(\mathbf{r}^*(t)) \leq 0 \quad \forall t \in [0, T] \quad (4.68a)$$

$$L_y(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, u^*, \pi, \varrho, \lambda) + \begin{pmatrix} g'(\mathbf{r}^*)^* \lambda \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{in } Y^* \quad (4.68b)$$

$$L_u(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, u^*, \pi, \varrho, \lambda) = 0 \quad \text{in } L^2(\Gamma) \quad (4.68c)$$

$$\lambda \geq 0, \quad \langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}^*) \rangle_{R^*, R} = 0 \quad \text{in } R^* \quad (4.68d)$$

**Beweis.** Sei  $\tilde{\mathbf{y}}^*$  eine lokale Optimallösung von (P). Dann folgt nach Lemma 4.6.18, dass (4.66) gilt. Die Funktionen  $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$  sind nach Annahme 4.2.19 genügend regulär und Fréchet differenzierbar. Die notwendige Optimalitätsbedingung in primaler Form ist nach [56, Theorem 1.52] durch

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \\ \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} s_y \\ s_u \end{pmatrix} \right\rangle_{W^*, W} \geq 0 \quad \forall \begin{pmatrix} s_y \\ s_u \end{pmatrix} \in T(\mathcal{F}; \mathbf{z}^*) = \overline{L(\mathcal{F}; \mathbf{z}^*)} \\ \Leftrightarrow & \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \\ \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*) \end{pmatrix} \in L(\mathcal{F}; \mathbf{z}^*)^+ \end{aligned}$$

gegeben. Die Gleichheit von Tangential- und Linearisierungskegel folgt nach Robinson. Nach Theorem [68, Kapitel 9.4, Theorem 1] (mit Hilfe des Eidelheit'schen Trennungssatzes) folgt, dass somit ein Multiplikator  $\tilde{\lambda} := [\tilde{\mu}; \lambda] \in Z^* \times R^*$  existiert mit

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \\ \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{e}_r(\mathbf{y}^*, u^*)^* & g_r(\mathbf{r}^*)^* \\ \mathbf{e}_p(\mathbf{y}^*, u^*)^* & 0 \\ \mathbf{e}_u(\mathbf{y}^*, u^*)^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{y} - \mathbf{y}^* \\ u - u^* \end{pmatrix} \right\rangle_{W^*, W} \geq 0 \\ & \quad \forall \mathbf{y} \in Y, u \in L^2(\Gamma) \quad (4.69a) \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix} \in (\{0\} \times K)^+, \quad \left\langle \begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix}, G(\mathbf{y}^*, u^*) \right\rangle_{Z^* \times R^*, Z \times R} = 0, \quad -G(\mathbf{y}^*, u^*) \in (\{0\} \times K). \quad (4.69b)$$

Dabei ist der Dualkegel  $(\{0\} \times K)^+$  gegeben durch

$$(\{0\} \times K)^+ = \left\{ \begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix} \in Z^* \times R^* : \left\langle \begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{k}_1 \\ \mathbf{k}_2 \end{pmatrix} \right\rangle_{Z^* \times R^*, Z \times R} \geq 0 \quad \forall \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \in \{0\} \times K \right\},$$

d.h.  $\tilde{\mu}$  ist an keine Bedingung geknüpft, so dass

$$(\{0\} \times K)^+ = \left\{ \begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix} \in Z^* \times R^* : \langle \lambda, \mathbf{k}_2 \rangle_{R^*, R} \geq 0 \quad \forall \mathbf{k}_2 \in K \right\} \quad (4.70)$$

gilt. Mit der Setzung  $\tilde{\mu} := [\tilde{\pi}; \tilde{\varrho}]$ , der Wahl von  $\mathbf{y} = \mathbf{y}^* \in Y$  und unter Berücksichtigung der Unterraum-Eigenschaft von  $L^2(\Gamma)$  ergibt sich aus (4.69a)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*) + e_u(\mathbf{y}^*, u^*)^* \tilde{\pi} &= 0 && \text{in } L^2(\Gamma) \\ \Leftrightarrow L_u(\mathbf{y}^*, u^*, \pi, \varrho, \lambda) &= 0 && \text{in } L^2(\Gamma) \end{aligned}$$

Hiebei gilt zu beachten, dass  $\partial_u(\mathbf{e}_2)(\mathbf{y}^*, u^*)\phi_u = 0$  ist und dass wir  $\mu := [\pi; \varrho] =: -\tilde{\mu} \in Z^*$  definieren. Also ist (4.68c) nachgewiesen. Wählen wir im Gegensatz hierzu  $u = u^* \in L^2(\Gamma)$  und  $\mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{y}^*$  mit beliebigen  $\mathbf{y} \in Y$ , schreibt sich (4.69a) als

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) - \begin{pmatrix} e_r(\mathbf{y}^*, u^*)^* \pi \\ e_p(\mathbf{y}^*, u^*)^* \varrho \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_r(\mathbf{r}^*)^* \lambda \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{y} \right\rangle_{Y^*, Y} &= 0 \quad \forall \mathbf{y} \in Y. \\ \Leftrightarrow \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) - e_y(\mathbf{y}^*, u^*)^* \begin{pmatrix} \pi \\ \varrho \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g_r(\mathbf{r}^*)^* \lambda \\ 0 \end{pmatrix} &= 0 && \text{in } Y^* \\ \Leftrightarrow L_y(\mathbf{y}^*, u^*, \pi, \varrho, \lambda) + \begin{pmatrix} g_r(\mathbf{r}^*)^* \lambda \\ 0 \end{pmatrix} &= 0 && \text{in } Y^* \end{aligned}$$

Dies entspricht jedoch eben der Formel (4.68b). Die Formeln aus (4.68a) sind durch die Zulässigkeit des lokalen Optimums  $\tilde{\mathbf{y}}^*$  sichergestellt. Es gilt noch (4.68d) zu zeigen. Aus

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mu} \\ \lambda \end{pmatrix} \in (\{0\} \times K)^+$$

und (4.70) folgt, dass  $\langle \lambda, \mathbf{k} \rangle_{R^*, R} \geq 0 \quad \forall \mathbf{k} \in K$ , somit gilt  $\lambda_i \geq 0 \in R^*, i = 1, \dots, m$ . Des Weiteren erhalten wir aufgrund der Zulässigkeit des Punktes  $\tilde{\mathbf{y}}^*$  ( $\mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) = 0$ )

$$\langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}^*) \rangle_{R^*, R} = \langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}^*) \rangle + \langle \mu, \mathbf{e}(\mathbf{y}^*, u^*) \rangle_{Z^*, Z} = \left\langle \begin{pmatrix} \mu \\ \lambda \end{pmatrix}, G(\mathbf{y}^*, u^*) \right\rangle_{Z^* \times R^*, Z \times R} = 0,$$

was abschließend unter Anwendung von (4.69b) die Formel (4.68d) beweist.  $\square$

**Bemerkung 4.6.24.** Die Regularitätsbedingung von Zowe & Kurcyusz ist in [117] gegeben. Weitere Literatur, die den Tangential- und Linearisierungskegel im unendlichdimensionalen Raum behandelt, stellen die Bücher [56, 68] dar. Die Diskussion von notwendigen Optimalitätsbedingungen und den sich ergebenden KKT-Systeme von Optimalsteuerproblemen mit Zustandsbeschränkungen findet sich in [104] von Fredi Tröltzsch und in [56] wieder.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wollen wir uns im Detail den Komponenten des KKT-Systems (4.68) zuwenden. Dabei werden wir zeigen, dass sich die Regularität der Multiplikatoren verbessern lässt und abschließend das adjungierte reduzierte System darstellen.

Die adjungierte Gleichung (4.68b) des Optimalsteuerproblems (P) besitzt folgende Gestalt

$$\frac{\partial \mathbf{e}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*)^* \begin{pmatrix} \pi \\ \varrho \end{pmatrix} - \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{r}^*, u^*) - \begin{pmatrix} g'(\mathbf{r}^*)^* \lambda \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{in } Y^*.$$

Um einen näheren Einblick auf (4.68b) zu erlangen, werden wir die erhaltene adjungierte Gleichung zunächst in ihrer schwachen Formulierung betrachten. Seien hierzu die Testfunktionen  $\phi \in Y$  gegeben, dann gilt nach (4.68b) für alle  $\phi \in Y$

$$\begin{aligned} \int_0^T \underbrace{\left[ \pi(t) \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi \right)(t) + \varrho(t) \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi \right)(t) \right]}_{(*)} dt \\ - \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}^*, u^*), \phi_r \right\rangle_{Y_r^*, Y_r} - \langle \lambda, g'(\mathbf{r}^*) \phi_r \rangle_{R^*, R} = 0 \quad \forall \phi \in Y \end{aligned} \quad (4.71)$$

wobei  $\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{r}^*, u^*) \equiv 0$  und  $\phi := [\phi_r; \phi_p]$  gelten.

Schauen wir uns zunächst den ersten Term von (4.71) an. Um eine überschaubare Struktur herleiten zu können, werden wir einige neue Definitionen einführen. Wir definieren deshalb

$$I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) := \int_0^T \pi(t) \cdot \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\partial_y \mathbf{F}_L(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*) \phi)(t) d\mathbf{x} dt, \quad (4.72a)$$

$$\mathbf{B}^*(t) := \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} + \int_0^t \mathcal{B}(t - \tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) d\tau \quad \forall t \in [0, T], \quad (4.72b)$$

$$\kappa : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3, \quad \kappa(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \pi) := \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \pi \\ \pi \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}) \end{pmatrix}. \quad (4.72c)$$

Somit wollen wir nun für die erste Komponente  $(\star)$  von (4.71) das Theorem von Fubini-Tonelli [2, Theorem 1.54] anwenden. Der Integrand von  $(\star)$  in (4.71) ist messbar, da sowohl  $\pi$  als auch  $\left(\frac{\partial e_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi\right)$  in  $Z$  liegen. Wir schreiben deshalb anstelle von  $(\star)$

$$\begin{aligned} & \int_0^T \pi(t) \cdot \left( \frac{\partial e_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi \right)(t) dt \\ &= \int_0^T \dot{\phi}_{\mathbf{p}}(t) \cdot \pi(t) dt - q I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) \\ &+ q \int_0^T \phi_{\mathbf{r}}(t) \cdot \left( \int_{\Omega} [\mathbf{F}_L(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t) \cdot \pi(t)] \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) d\mathbf{x} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R u^*) [\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t)] d\mathbf{x} \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Gamma} u^* [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \cdot \pi(t)] (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) d\zeta \right) dt \\ &- q \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \left( \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R u^*) [\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) \times \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))] d\mathbf{x} \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Gamma} u^* \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t)) d\zeta \right) dt \quad \forall \phi \in Y. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Dabei lässt sich  $I_L$  mit Definition (4.72a) und Fubinis Theorem schreiben

$$\begin{aligned}
I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) &= \int_0^T \int_{\Omega} \left[ \int_0^t \mathcal{E}(t-\tau) (j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) \phi(\tau)) d\tau \right. \\
&\quad + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \int_0^t \mathcal{B}(t-\tau) (j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) \phi(\tau)) d\tau \\
&\quad + \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \phi_{\mathbf{p}}(t) \times \left( \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. \left. + \int_0^t \mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) d\tau \right) \right] \cdot \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt \\
&= \int_0^T \int_0^t \left( \mathcal{G}(t-\tau) (j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) \phi(\tau)), \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(t) \right)_{X \times X} d\tau dt \\
&\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \left( \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + \int_0^t \mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) d\tau \right) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt
\end{aligned}$$

In obiger Gleichung verwenden wir die Definition für  $\kappa$  (4.72c). Mit Definition  $\mathbf{B}^*(t)$  (4.72b) als Optimallösungskomponente der Maxwell Gleichungen und einer Integraltransformation im Stile von  $\int_{t=0}^T \int_{\tau=0}^t a(\tau, t) d\tau dt = \int_{\tau=0}^T \int_{t=\tau}^T a(\tau, t) dt d\tau$  mit hinreichend regulären  $a$  ergibt sich

$$\begin{aligned}
I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) &= \int_{\tau=0}^T \phi(\tau) \cdot \int_{\Omega} \int_{t=\tau}^T j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau)^\top \mathcal{G}(t-\tau) \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(t) dt d\mathbf{x} d\tau \\
&\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \left( \mathcal{B}(t) \begin{pmatrix} \mathbf{E}_0 \\ \mathbf{B}_0 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + \int_0^t \mathcal{B}(t-\tau) \mathbf{j}(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(\tau) d\tau \right) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt \\
&= \int_{t=0}^T \phi(t) \cdot \int_{\Omega} j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t)^\top \int_{\tau=t}^T \mathcal{G}(\tau-t) \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(\tau) d\tau d\mathbf{x} dt \\
&\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt.
\end{aligned}$$

Hierbei ist durch  $\mathcal{G}(t)^* = (\mathcal{E}^*(t), \mathcal{B}^*(t))^\top$ ,  $\mathcal{G}(t)^* : X \times X \rightarrow X \times X$  die adjungierte  $C_0$ -Halbgruppe aus Theorem 4.3.26 gegeben, die durch Transposition der dualen Paarung entsteht. Man beachte hierbei, dass die Jacobi Matrix  $j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t)$  gegeben ist durch (4.60). Es ergibt sich damit für  $I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi)$

$$\begin{aligned}
I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) &= \int_{t=0}^T \phi(t) \cdot \int_{\Omega} j'(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t)^\top \int_{\tau=t}^T \mathcal{G}(\tau-t) \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(\tau) d\tau d\mathbf{x} dt \\
&\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt \\
&= \int_{t=0}^T \phi(t) \cdot \int_{\Omega} \begin{pmatrix} q \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*) \mathbf{v}(\mathbf{p}^*)^\top & 0 \\ -q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*) \mathbf{v}'(\mathbf{p}^*)^\top & 0 \end{pmatrix} \int_{\tau=t}^T \mathcal{G}(\tau-t) \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(\tau) d\tau d\mathbf{x} dt \\
&\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt.
\end{aligned}$$

Da dies die einzige Komponente von (4.71) ist in der die adjungierte Halbgruppe  $\mathcal{G}(\cdot)^*$  vorkommt, definieren wir uns im nächsten Schritt

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} &:= \int_t^T \mathcal{G}(\tau - t)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(\tau) d\tau \\ &= - \int_{s=T-t}^0 \mathcal{G}(T - t - s)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(T - s) ds \\ &= \int_0^{T-t} \mathcal{G}(T - t - s)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(T - s) ds, \end{aligned} \quad (4.74)$$

wobei wir die Substitution  $s = T - \tau$  nutzen mit Transformation des Integrators  $ds = -d\tau$  und anschließender Invertierung der Integralgrenzen. Wir erhalten für  $I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi)$  die folgende kompakte Schreibweise

$$\begin{aligned} I_L(\pi, \mathbf{y}^*, \phi) &= \int_0^T \phi(t) \cdot \int_{\Omega} \begin{pmatrix} q \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*) \mathbf{v}(\mathbf{p}^*)^\top \\ -q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*) \mathbf{v}'(\mathbf{p}^*)^\top \end{pmatrix} \Phi(t) d\mathbf{x} dt \\ &\quad + \int_0^T \phi_{\mathbf{p}}(t) \cdot \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} dt. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Hierbei wurde berücksichtigt, dass die Jacobi Matrix von  $\mathbf{j}(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)$  zwei Nullblöcke von jeweiliger Dimension  $\mathbb{R}^{3 \times 3}$  besitzt und somit die Komponente  $\Psi(t)$  in diesem Fall entfällt. Des Weiteren definieren wir

$$\begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(t) \\ \tilde{\Psi}(t) \end{pmatrix} := \int_0^t \mathcal{G}(t - s)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(T - s) ds. \quad (4.76)$$

Dann gilt

**Lemma 4.6.25.** *Der Vektor  $\begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(t) \\ \tilde{\Psi}(t) \end{pmatrix} \in C([0, T]; X)^2$  aus (4.76) ist die milde Lösung von folgendem Cauchy Problem*

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(t) \\ \tilde{\Psi}(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A}^* \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(t) \\ \tilde{\Psi}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(T - t)) \pi(T - t) \\ \pi(T - t) \times \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(T - t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(T - t)) \end{pmatrix}$$

a.e. in  $[0, T]$

$$\tilde{\Phi}(0) = \tilde{\Psi}(0) = 0 \in X.$$

(4.77)

**Beweis.** Nach Theorem 4.3.26 (basierend auf dem Satz von Stone) existiert ein Halbgruppenoperator  $\mathcal{G}(t)^*$ , der durch den infinitesimalen Generator  $-\mathcal{A}^*$  erzeugt wird und eine Lösung von (4.77) ist. Somit ist (4.76) milde Lösung von (4.77), deren rechte Seite dem Vektor  $\kappa$  entspricht. Die Anfangsdaten sind dabei  $\tilde{\Phi}(0) = \tilde{\Psi}(0) = 0 \in X$ .  $\square$

Wir folgern hieraus die Aussage

**Lemma 4.6.26.** *Es existiert eine milde Lösung von folgendem rückwärts in der Zeit laufendem Problem*

$$-\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A}^* \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t) \\ \pi(t) \times \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \end{pmatrix} \quad \text{a.e. in } [0, T]$$

$$\Phi(T) = \Psi(T) = 0 \in X.$$

(4.78)

Hierbei ist  $\begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} \in C([0, T]; X)^2$  aus (4.74) die milde Lösung.

**Beweis.** Betrachten wir

$$\begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} = \int_t^T \mathcal{G}(\tau - t)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(\tau) d\tau$$

aus Gleichung (4.74). Führen wir folgende Substitutionen ein

$$\tilde{s} := T - t, \quad s := T - \tau,$$

so dass  $d\tau = -ds$  ist und setzen dies in (4.74) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Phi(T - \tilde{s}) \\ \Psi(T - \tilde{s}) \end{pmatrix} &= - \int_{\tilde{s}}^0 \mathcal{G}(\tilde{s} - s)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(T - s) ds \\ &= \int_0^{\tilde{s}} \mathcal{G}(\tilde{s} - s)^* \kappa(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \pi)(T - s) ds \\ &= \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(\tilde{s}) \\ \tilde{\Psi}(\tilde{s}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Hierbei  $\begin{pmatrix} \tilde{\Phi} \\ \tilde{\Psi} \end{pmatrix}$  die milde Lösung von dem (vorwärts in der Zeit) Cauchy Anfangswert Problem (4.77). Aus

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{s}} \begin{pmatrix} \tilde{\Phi} \\ \tilde{\Psi} \end{pmatrix} = - \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi(T - \tilde{s}) \\ \Psi(T - \tilde{s}) \end{pmatrix} = - \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix}$$

folgt die Behauptung. Aufgrund der Anfangsdaten von der milden Lösung (4.76) folgt

$$\begin{pmatrix} \Phi(T - 0) \\ \Psi(T - 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\Phi}(0) \\ \tilde{\Psi}(0) \end{pmatrix} = 0 \quad \text{in } X.$$

□

Vergegenwärtigen wir uns die ursprüngliche adjungierte Gleichung (4.71) und definieren wir der Übersichtlichkeit halber

$$\omega := \begin{pmatrix} \varrho \\ \pi \end{pmatrix} \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2, \quad (4.79)$$

dann erhält man für den ersten Teil von (4.71) folgende Formulierung

$$\begin{aligned} \int_0^T \left[ \pi(t) \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{e}_1}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi \right)(t) + \varrho(t) \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{e}_2}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi \right)(t) \right] dt \\ = \int_0^T \dot{\phi}(t) \cdot \omega(t) dt + \int_0^T \phi(t) \cdot A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) dt \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) &= \begin{pmatrix} A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) \\ A_p(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) \end{pmatrix} \\ &:= q \begin{pmatrix} \int_{\Omega} [\mathbf{F}_L(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t) \cdot \pi(t)] \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) d\mathbf{x} \\ - \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} \end{pmatrix} \\ &\quad + q \begin{pmatrix} \int_{\Omega} \eta^* [\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t)] d\mathbf{x} \\ - \int_{\Omega} \eta^* [\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) \times \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))] d\mathbf{x} \end{pmatrix} \\ &\quad + q \begin{pmatrix} - \int_{\Gamma} u^* [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \cdot \pi(t)] (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) d\varsigma \\ \int_{\Gamma} u^* \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t)) d\varsigma \end{pmatrix} \\ &\quad + q^2 \begin{pmatrix} - \int_{\Omega} \mathbf{v}(\mathbf{p}^*(t)) [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \cdot \Phi(t)] d\mathbf{x} \\ \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) v'(\mathbf{p}^*(t)) \Phi(t) d\mathbf{x} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ v'(\mathbf{p}^*(t)) \varrho(t) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.80)$$

unter Berücksichtigung von (4.73), Lemma 4.6.3 und Einsetzung des Poisson Lösungsoptors  $\eta^* = (-\Delta^*)^{-1} R u^*$ . Außerdem verwendet man hierzu Formel (4.75), in der der adjungierte milde Lösungsoptor  $\Phi(t)$ , der adjungierten Maxwell Gleichung (4.78), eingeht.

Mit Hilfe von (4.80) lässt sich die adjungierte Gleichung (4.71) des KKT-Systems (4.68) als

$$\int_0^T \dot{\phi}(t) \cdot \omega(t) dt + \int_0^T \phi(t) \cdot A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) dt - \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}^*, u^*), \phi_r \right\rangle_{Y_r^*, Y_r} - \langle \lambda, g'(\mathbf{r}^*) \phi_r \rangle_{R^*, R} = 0 \quad \forall \phi \in Y. \quad (4.81)$$

schreiben. Unter Ausnutzung von (4.81) können nun weitere Aussagen über die Regularität der Multiplikatoren  $\pi, \varrho$ , die adjungierte Gleichung (4.68b) und die Komplementaritätsbedingung (4.68d) getroffen werden. Hierzu benötigt man den Begriff der Funktion von beschränkter Variation. Als Literaturangabe für BV-Funktionen sollen unter anderem die Bücher [10, 4] dienen.

Es gilt folgendes Variationslemma für Riemann Stieltjes Integrale (R-S-I), das in dem Buch [38, Lemma 3.1.9] für Funktionen  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^k)$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , bewiesen wird.

**Lemma 4.6.27** (Du Bois Reymond für R-S-I/ Variationslemma).

Seien die Funktionen  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^k)$ ,  $k \in \mathbb{N}$ ,  $s \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times k})$ ,  $m \in \mathbb{N}$ , und  $\mathbf{b} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$  gegeben. Des Weiteren gelte

$$\int_0^T (\mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{h}(t) + \mathbf{g}(t) \cdot \dot{\mathbf{h}}(t)) dt + \int_0^T (s(t) \mathbf{h}(t)) \cdot d\mathbf{b}(t) = 0 \quad (4.82)$$

für jedes  $\mathbf{h} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  mit  $\mathbf{h}(0) = \mathbf{h}(T) = 0$ . Dann existiert eine Konstante  $\tilde{\mathbf{c}} \in \mathbb{R}^k$  und eine Funktion  $\hat{\mathbf{g}} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$ , sodass

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{g}}(t) &= \mathbf{g}(t) \quad \text{f.ü. in } [0, T] \text{ und} \\ \hat{\mathbf{g}}(t) &= - \int_t^T \mathbf{f}(\tau) d\tau - \int_t^T s(\tau)^\top d\mathbf{b}(\tau) - \tilde{\mathbf{c}} \end{aligned} \quad (4.83)$$

gilt.

**Beweis.** Setzen wir hierzu das Integral bzw. das R-S-I

$$\mathbf{F}(t) := \int_t^T \mathbf{f}(\tau) d\tau, \quad \mathbf{G}(t) := \int_t^T s(\tau)^\top d\mathbf{b}(\tau).$$

Das Integral  $\mathbf{F}(\cdot)$  ist wohldefiniert, weil  $f \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  und  $\mathbf{G}(\cdot)$  nach Bemerkung C.0.2 (ii) existiert. Es gilt

$$\begin{aligned} \int_0^T \mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{h}(t) dt &= \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d \left( \int_T^t \mathbf{f}(\tau) d\tau \right) \\ &= - \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d \left( \int_t^T \mathbf{f}(\tau) d\tau \right) = - \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d\mathbf{F}(t). \end{aligned}$$

Die erste Gleichheit gilt nach Lemma C.0.3 (iv) mit  $a = T$  und der Tatsache, dass die Inklusion  $H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k) \subset C([0, T]; \mathbb{R}^k)$  gilt (sogar kompakte Einbettung). Außerdem folgt aus C.0.3 (iv)  $\mathbf{F} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$ . Im Folgenden wenden wir die

partielle Integrationsformel (C.1) an. Man erhält

$$\begin{aligned} - \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d\mathbf{F}(t) &= \int_0^T \mathbf{F}(t) \cdot d\mathbf{h}(t) - [\mathbf{h}(t) \cdot \mathbf{F}(t)]_0^T \\ &= \int_0^T \mathbf{F}(t) \cdot d\mathbf{h}(t) = \int_0^T \mathbf{F}(t) \cdot \dot{\mathbf{h}}(t) dt \end{aligned}$$

unter Ausnutzung von  $\mathbf{h}(0) = \mathbf{h}(T) = 0$ . Das letzte Gleichheitszeichen ergibt sich nach Lemma C.0.3 (v) und  $\mathbf{h} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  (damit auch in  $AC(]0, T[; \mathbb{R}^k)$ ). Ein ähnliches Vorgehen ergibt für das R-S-I in (4.82)

$$\begin{aligned} \int_0^T (s(t)\mathbf{h}(t)) \cdot d\mathbf{b}(t) &= \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d\left(\int_t^T s(\tau)^\top d\mathbf{b}(\tau)\right) = - \int_0^T \mathbf{h}(t) \cdot d\mathbf{G}(t) \\ &= \int_0^T \mathbf{G}(t) \cdot d\mathbf{h}(t) = \int_0^T \mathbf{G}(t) \cdot \dot{\mathbf{h}}(t) dt \end{aligned}$$

Dabei lässt sich wiederum Lemma C.0.3 (iv) anwenden, da  $s \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times k})$ ,  $\mathbf{b} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$  und  $\mathbf{h} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  ist. Mit Hilfe der partiellen Integrationsformel (C.1) und Lemma C.0.3 (v) ist obige Gleichung für das R-S-I gezeigt. Somit schreiben wir (4.82) als

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^T (\mathbf{f}(t) \cdot \mathbf{h}(t) + (\mathbf{g}(t) + \tilde{\mathbf{c}}) \cdot \dot{\mathbf{h}}(t)) dt + \int_0^T (s(t)\mathbf{h}(t)) \cdot d\mathbf{b}(t) \\ &= \int_0^T (\mathbf{F}(t) + \mathbf{G}(t) + \mathbf{g}(t) + \tilde{\mathbf{c}}) \cdot \dot{\mathbf{h}}(t) dt, \end{aligned} \quad (4.84)$$

wobei  $0 = \tilde{\mathbf{c}}(\mathbf{h}(T) - \mathbf{h}(0)) = \tilde{\mathbf{c}} \cdot \int_0^T \dot{\mathbf{h}}(t) dt = \int_0^T \tilde{\mathbf{c}} \cdot \dot{\mathbf{h}}(t) dt$  und  $\mathbf{h} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  mit  $\mathbf{h}(0) = \mathbf{h}(T) = 0$  ausgenutzt wird. Wählt man nun

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{c}} &:= \frac{1}{T} \int_0^T (-\mathbf{F}(t) - \mathbf{G}(t) - \mathbf{g}(t)) dt \\ \mathbf{h}(t) &:= \int_t^T (\mathbf{F}(\tau) + \mathbf{G}(\tau) + \mathbf{g}(\tau) + \tilde{\mathbf{c}}) d\tau, \end{aligned}$$

so ist  $\mathbf{h}(T) = 0$  und  $\mathbf{h}(0) = \int_0^T (\mathbf{F}(\tau) + \mathbf{G}(\tau) + \mathbf{g}(\tau)) d\tau - \frac{T}{T} \int_0^T (\mathbf{F}(\tau) + \mathbf{G}(\tau) + \mathbf{g}(\tau)) d\tau = 0$  erfüllt und es gilt  $\mathbf{h} \in H^1(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  nach Konstruktion von  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{G}$  und Voraussetzung an  $\mathbf{g}$ , das in  $L^2(]0, T[; \mathbb{R}^k)$  liegt. Einsetzen in (4.84) liefert

$$0 = \int_0^T \|\mathbf{F}(t) + \mathbf{G}(t) + \mathbf{g}(t) + \tilde{\mathbf{c}}\|_2^2 dt = \|\mathbf{F}(t) + \mathbf{G}(t) + \mathbf{g}(t) + \tilde{\mathbf{c}}\|_{L^2(]0, T[; \mathbb{R}^k)}^2$$

und damit folgt aus der Definitheit der Norm

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(t) &= -\mathbf{F}(t) - \mathbf{G}(t) - \tilde{\mathbf{c}} && \text{f.ü. in } (0, T) \\ &= - \int_t^T \mathbf{f}(\tau) d\tau - \int_t^T s(\tau)^\top d\mathbf{b}(\tau) - \tilde{\mathbf{c}} = \hat{\mathbf{g}}(t) && \text{f.ü. in } (0, T) \end{aligned}$$

Somit können wir abschließend, mit der Bemerkung, dass  $\int_t^T s(\tau)^\top d\mathbf{b}(\tau)$  nach Lemma C.0.3 (iii) in  $\text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$  liegt, folgern, dass  $\hat{\mathbf{g}} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$ .  $\square$

**Bemerkung 4.6.28.** Falls kein R-S-I in (4.82) vorhanden ist, vereinfacht sich (4.83) zu

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{g}}(t) = \mathbf{f}(t) \quad \text{f.ü. in } (0, T). \quad (4.85)$$

**Lemma 4.6.29** (Riesz Repräsentation mit BV-Funktion).

Sei  $\lambda \in R^*$  beliebig gegeben mit

$$\langle \lambda, \phi \rangle_{R^*, R} \geq 0 \quad \forall \phi \in R \text{ mit } \phi(t) \geq 0 \quad \forall t \in [0, T].$$

Dann gibt es eine monoton wachsende Funktion  $\mathbf{g} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$  mit  $\mathbf{g}(0) = 0$ , sodass

$$\langle \lambda, \phi \rangle_{R^*, R} = \int_0^T \phi(t) \cdot d\mathbf{g}(t) \quad \forall \phi \in R$$

gilt mit  $\|\lambda\|_{R^*} = \text{var}(\mathbf{g}, [0, T])$ .

**Bemerkung 4.6.30.** Die nach Lemma 4.6.29 existierende, monoton wachsende Funktion  $\mathbf{g} \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$  mit  $\mathbf{g}(0) = 0$ , ist somit ein Element von beschränkter Variation  $\text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$  (siehe Definition B.0.5).

**Bemerkung 4.6.31.** Ein Beweis von Lemma 4.6.29 kann in [68, Kapitel 5.5, Theorem 1] von Luenberger studiert werden. Dabei kommt im Wesentlichen der Satz von Hahn Banach zur Anwendung.

Kommen wir nun zu dem eigentlichen Resultat dieses Abschnittes, der Regularität der existierenden Multiplikatoren des KKT-Systems (4.68) unter Berücksichtigung der Zustandsbeschränkung und der Gestalt der adjungierten Gleichung (4.81).

**Lemma 4.6.32** (Regularität der adjungierte Zustände und des Multiplikators).

Es gelte Annahme 4.6.20. Die adjungierten Partikelpositionen  $\varrho$  und adjungierten Impulse  $\pi$  besitzen die Regularitäten  $\varrho \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^3)$  und  $\pi \in W^{1, \infty}([0, T]; \mathbb{R}^3)$ . Außerdem existiert eine Funktion  $\mu \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , sodass zusammen mit den adjungierten Zuständen  $\pi, \varrho$  von (4.68) und der lokalen optimalen Lösung  $(\mathbf{y}^*, u^*)$  von (P) folgendes ODE System (rückwärts in der Zeit) erfüllt ist:

$$-\dot{\pi}(t) = -A_p(\mathbf{y}^*, u^*, \varrho, \pi)(t) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[ \quad (4.86)$$

$$\pi(T) = 0 \quad (4.87)$$

$$-\dot{\varrho}(t) = -A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \varrho, \pi)(t) + \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) - g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \mu(t) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[ \quad (4.88)$$

$$\varrho(T) = \nabla J_2(\mathbf{r}^*(T)). \quad (4.89)$$

Darüber hinaus ist  $\mu$  monoton steigend und erfüllt

$$\int_0^T \mathbf{g}(\mathbf{r}^*(t)) \cdot d\mu(t) = 0. \quad (4.90)$$

Des Weiteren besitzt  $\varrho$  abzählbar viele Unstetigkeitsstellen  $t_1, \dots, t_\ell$  in  $]0, T[$ , in welchen die Formel

$$\varrho(t_i) - \varrho_-(t_i) = g'(\mathbf{r}^*(t_i))^\top (\mu_-(t_i) - \mu(t_i)), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (4.91)$$

gilt.

**Beweis.** Diskutieren wir zunächst die adjungierte Gleichung (4.81) und deren Komponenten. Nach Theorem 4.6.23 gilt, dass  $\lambda \in R^*$ ,  $\lambda \geq 0$ . Benutzt man den Satz von Riesz für BV-Funktionen (Lemma 4.6.29), so existiert eine eindeutige Funktion  $\mu \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , so dass

$$\langle \lambda, \mathbf{v} \rangle_{R^*, R} = \int_0^T \mathbf{v}(t) \cdot d\mu(t) \quad \forall \mathbf{v} \in R \quad (4.92)$$

gilt. Zusätzlich erhält man nach Lemma 4.6.29, dass  $\mu$  wie behauptet monoton wachsend ist. Nach der komplementären Schlupfbedingung (4.68d) und Lemma

4.6.29 folgt für  $\langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}^*(t)) \rangle_{R^*, R}$

$$\int_0^T \mathbf{g}(\mathbf{r}^*(t)) \cdot d\mu(t) = \langle \lambda, \mathbf{g}(\mathbf{r}^*(t)) \rangle_{R^*, R} = 0.$$

Dies erbringt den Nachweis für (4.90). Nutzt man als nächstes die Struktur der Zielfunktion aus,  $\mathcal{J}(\mathbf{r}, u) = \int_0^T J_1(\mathbf{r}(t)) dt + J_2(\mathbf{r}(T)) + \frac{\alpha}{2} \int_{\Gamma} u^2 d\zeta$ , und wendet sich der Ableitung eben dieser nach dem Zustand  $y$  zu, welche in (4.81) eingeht, so erhält man

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{y}}(\mathbf{r}^*, u^*), \phi \right\rangle_{Y^*, Y} &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{r}^*, u^*), \phi_r \right\rangle_{Y_r^*, Y_r} \\ &= \int_0^T J_1'(\mathbf{r}^*(t)) \phi_r(t) dt + J_2'(\mathbf{r}^*(T)) \phi_r(T). \end{aligned} \quad (4.93)$$

Führen wir im nächsten Schritt (4.93) und (4.92) in Formel (4.81) zusammen, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_0^T \left[ A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \right] \cdot \phi(t) + \omega(t) \cdot \dot{\phi}(t) dt \\ - \int_0^T (g'(\mathbf{r}^*(t)) \phi_r(t)) \cdot d\mu(t) = 0 \quad \forall \phi \in C_0^\infty(0, T; \mathbb{R}^3)^2. \end{aligned} \quad (4.94)$$

Man beachte hierbei, dass  $g'(\mathbf{r}^*) \phi_r \in C([0, T]; \mathbb{R}^m)$  ist, da  $g'(\mathbf{r}^*) \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times 3})$  nach Annahme 4.2.17 (c). Es gilt, dass die Komponenten  $\nabla J_1(\mathbf{r}^*(t))$ ,  $A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)$  von Regularität  $Z$  sind. Wir beschäftigen wir uns zunächst mit der Komponente  $A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)$ , die in (4.80) definiert ist. Man stellt fest, dass  $\omega$  nach (4.79) von Regularität  $L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2$  ist,  $\beta(\mathbf{p}(t))$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)$  und  $\mathbf{F}_L(\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*)(t) = \mathbf{E}^*(t) + \beta(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{B}^*(t)$ , mit  $\mathbf{E}^*(t)$ ,  $\mathbf{B}^*(t)$ ,  $\mathbf{y}^*(t)$  stetig (in der  $X$ -Norm) bzgl. der Zeit  $t$  sind. Es folgt

$$A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega) \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)^2.$$

Mit Hilfe des Lemmas von Du Bois Reymond für R-S-I (Lemma 4.6.27, alle Voraussetzungen sind erfüllt) gilt, dass die Äquivalenzklasse  $\omega$  einen Repräsentanten als BV-Funktion besitzt, den man der Einfachheit halber mit demselben Symbol schreibt. Des Weiteren gibt der Beweis von Lemma 4.6.27 eine konkrete Konstruktion von  $\tilde{\mathbf{c}}$  an. So ist  $\tilde{\mathbf{c}}$  im Beweis des Variationslemmas fest gegeben durch

$$\mathbf{g}(t) = -\tilde{\mathbf{c}} - \mathbf{F}(t) - \mathbf{G}(t),$$

wobei in unserem Fall

$$\begin{aligned} \mathbf{g}(t) &= \begin{pmatrix} \varrho(t) \\ \pi(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(t) = \int_t^T A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\tau)) \\ 0 \end{pmatrix} d\tau \\ \mathbf{G}(t) &= \begin{pmatrix} \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

sind. Daraus ergibt sich für  $t = T$ , dass  $\tilde{\mathbf{c}} = -(\varrho(T), \pi(T))^\top$  und somit lässt (4.94) mit Lemma 4.6.27 im Zeitintervall  $t \in [0, T]$  schreiben als

$$\begin{aligned} \varrho(t) &= \varrho(T) - \int_t^T [A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\tau))] d\tau \\ &\quad + \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \end{aligned} \quad (4.95)$$

$$\pi(t) = \pi(T) - \int_t^T A_p(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) d\tau. \quad (4.96)$$

Aus Gleichung (4.96) und Bemerkung 4.6.28 folgt sofort

$$-\dot{\pi}(t) = -A_p(\mathbf{y}^*, u^*, \varrho, \pi)(t) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[.$$

Somit ist (4.86) gezeigt. Es folgt auch aus Lemma 4.6.27, dass  $\pi, \varrho \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^3)$  und schließlich nach Lemma B.0.2 (iii), dass  $\pi, \varrho \in L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$ . Damit und mit Gleichung (4.86) schlußfolgert man, dass  $\dot{\pi} \in L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$ . Dies ist wie folgt begründet: Die Multiplikatoren  $\varrho, \pi$  sind aus  $L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$  und es gilt nach (4.80)

$$\begin{aligned} -\dot{\pi}(t) &= q \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) \, d\mathbf{x} \\ &\quad q \int_{\Omega} \eta^* \left[ \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) \times \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \right] d\mathbf{x} \\ &\quad - q \int_{\Gamma} u^* \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t)) \, d\zeta \\ &\quad - q^2 \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) v'(\mathbf{p}^*(t)) \Phi(t) \, d\mathbf{x} + v'(\mathbf{p}^*(t)) \varrho(t) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[. \end{aligned}$$

Wir wissen, dass  $\mathbf{B}^*(t), \Phi(t) \in C([0, T]; X)$  liegen und dass  $\mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*, \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*), \mathbf{v}(\mathbf{p}^*)$  und  $\varphi$  mindestens stetig differenzierbar sind. Hieraus und da  $\varrho \in L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$  ergibt sich die Regularität von  $A_p(\mathbf{y}^*, u^*, \varrho, \pi)$  bzw. von  $\partial_t \pi$  in  $L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$ . Damit gilt

$$\pi \in W^{1,\infty}(]0, T[; \mathbb{R}^3).$$

nach Definition 2.1.9.

Da  $\mu \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , also von beschränkter Variation ist, folgt aus Lemma B.0.2 (iii), dass  $\mu$  höchstens abzählbar viele Unstetigkeitsstellen besitzt. Wir benennen diese Sprungstellen im Folgendem mit  $t_i$ ,  $i = 1, \dots, \ell$  und  $\ell \in \mathbb{N}$ . Nach Bemerkung B.0.4 (ii) existiert die Ableitung von  $\mu$  fast überall in  $]0, T[$ , und es wurde gezeigt, dass  $\mu$  monoton wachsend ist. Man kann daher Lemma C.0.3 (ii) anwenden, da  $g'(\mathbf{r}^*) \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times 3})$  ist und erhält

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\int_{t+h}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) - \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau)}{h} \\ &= - \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\int_t^{t+h} g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau)}{h} \\ &= - \lim_{h \rightarrow 0} \frac{g'(\mathbf{r}^*(\theta_h))^\top (\mu(t+h) - \mu(t))}{h}, \quad t \leq \theta_h \leq t+h \\ &= - \lim_{h \rightarrow 0} g'(\mathbf{r}^*(\theta_h))^\top \frac{\mu(t+h) - \mu(t)}{h} = -g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \frac{d}{dt} \mu(t) \\ &= -g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \dot{\mu}(t) \quad \text{f.f.a. } t \in ]0, T[. \end{aligned}$$

Hierbei wurde für das dritte Gleichheitszeichen der Mittelwertsatz für R-S-I aus Lemma C.0.3 (vi) benutzt und im finalen Schritt zur Grenze übergegangen. Daraus folgt durch Ausnutzen von (4.95), dass

$$\begin{aligned} -\dot{\varrho}(t) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\varrho(t) - \varrho(t+h)}{h} = \\ &\quad - \left[ A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \right] - g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \dot{\mu}(t) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[ \end{aligned}$$

Gültigkeit hat und somit (4.88) verifiziert werden konnte.

Schauen wir uns im nächsten Schritt ein weiteres Mal Gleichung (4.95) an. Wendet man für das R-S-I die partielle Integrationsformel (C.1) an, führt dies zur folgenden

Gleichung

$$\begin{aligned}
& \varrho(t) + g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \mu(t) \\
&= \varrho(T) + g'(\mathbf{r}^*(T))^\top \mu(T) \\
&\quad - \int_t^T \left[ A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\tau)) + \sum_{j=1}^m \mu_j(\tau) g_j''(\mathbf{r}^*(\tau)) \dot{\mathbf{r}}^*(\tau) \right] d\tau.
\end{aligned} \tag{4.97}$$

Die rechte Seite von (4.97) weist keine Unstetigkeitsstellen im Zeithorizont auf. Dabei gilt, dass  $\mu(0) = 0$  ( $\mu \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ ) und  $g_j' \in \text{AC}([0, T]; \mathbb{R}^3)$ ,  $j = 1, \dots, m$  nach Annahme 4.2.17. Darüber hinaus gilt  $g'(\mathbf{r}^*(t)) \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times 3})$ , sodass die abzählbar vielen Unstetigkeitsstellen der BV-Funktion  $\varrho$  (Lemma B.0.2 (iii)) mit den Sprungstellen  $\{t_i : i = 1, \dots, \ell\}$  des Multiplikators  $\mu$  zusammenfallen müssen.

Des Weiteren folgt aus der beschränkten Variation von  $\mu$  und Lemma C.0.3 (iii), dass  $\int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^3)$  und

$$\int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) - \lim_{\varepsilon \searrow 0} \int_{t-\varepsilon}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) = g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \left( \lim_{\varepsilon \searrow 0} \mu(t-\varepsilon) - \mu(t) \right) \tag{4.98}$$

für jedes  $t \in ]0, T]$ . Da  $A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\cdot) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\cdot)) \in L^2(]0, T[; \mathbb{R}^3)$ , folgt aus (4.95)

$$\begin{aligned}
& \varrho(t_i) - \lim_{\varepsilon \searrow 0} \varrho(t_i - \varepsilon) = \\
& \quad \varrho(T) - \int_{t_i}^T [A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\tau))] d\tau + \int_{t_i}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \\
& \quad - \varrho(T) + \lim_{\varepsilon \searrow 0} \int_{t_i-\varepsilon}^T [A_r(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \nabla J_1(\mathbf{r}^*(\tau))] d\tau - \lim_{\varepsilon \searrow 0} \int_{t_i-\varepsilon}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \\
& \quad = \int_{t_i}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) - \lim_{\varepsilon \searrow 0} \int_{t_i-\varepsilon}^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \\
& \quad \stackrel{(4.98)}{=} g'(\mathbf{r}^*(t_i))^\top \left( \lim_{\varepsilon \searrow 0} \mu(t_i - \varepsilon) - \mu(t_i) \right) \quad i = 1, \dots, \ell
\end{aligned}$$

Dies zeigt (4.91). Es gilt nun noch die Endzeitbedingungen (4.87) und (4.89) zu zeigen.

Betrachtet man sich hierzu die ursprüngliche adjungierte Gleichung (4.81) und integriert deren erstes Integral mit der partiellen Integrationsformel (C.1) und Lemma C.0.3 (v), so erhält man

$$\begin{aligned}
& - \int_0^T \phi(t) \cdot d\omega(t) + \int_0^T \phi(t) \cdot \left[ A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(t) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \right] dt \\
& - \int_0^T (g'(\mathbf{r}^*(t)) \phi_r(t)) \cdot d\mu(t) = J_2'(\mathbf{r}^*(T)) \phi_r(T) - \phi(T) \cdot \omega(T) \quad \forall \phi \in Y
\end{aligned} \tag{4.99}$$

unter Berücksichtigung der Anfangsbedingungen und dass  $\phi \in Y$  ist. Aus der Stetigkeit von  $g'(\mathbf{r}^*(\cdot))$  and  $\phi_r$  folgert man mit dem zweiten Teil von Lemma C.0.3 (iv) (mit  $a = T$ ), dass

$$\begin{aligned}
& - \int_0^T (g'(\mathbf{r}^*(t)) \phi_r(t)) \cdot d\mu(t) = - \int_0^T \phi_r(t) \cdot d \left( \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \right) \\
& \quad = \int_0^T \phi_r(t) \cdot d \left( \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \right)
\end{aligned} \tag{4.100}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned}
& \int_0^T \phi(t) \cdot d\omega(t) \\
&= \int_0^T \phi(t) \cdot d \left( \omega(T) - \int_t^T A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \right) d\tau \\
&\quad + \left( \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \right) \\
&= \int_0^T \phi(t) \cdot d \left( - \int_t^T A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \right) d\tau \\
&\quad + \int_0^T \phi_r(t) \cdot d \left( \int_t^T g'(\mathbf{r}^*(\tau))^\top d\mu(\tau) \right)
\end{aligned} \tag{4.101}$$

wobei  $d\omega(T) = 0$  ist. Für den ersten Term von (4.101) nutzen wir den ersten Teil des Lemmas C.0.3 (iv) (mit  $a = T$ ), für den zweiten Term von (4.101) verwenden wir (4.100), so dass gilt

$$\begin{aligned}
& \int_0^T \phi(t) \cdot d\omega(t) \\
&= \int_0^T \phi(t) \cdot \left( A(\mathbf{y}^*, u^*, \omega)(\tau) - \begin{pmatrix} \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \right) dt - \int_0^T (g'(\mathbf{r}^*(t))\phi_r(t)) \cdot d\mu(t)
\end{aligned}$$

Damit folgt nach Einsetzen in (4.99), dass

$$J'_2(\mathbf{r}^*(T))\phi_r(T) - \phi(T) \cdot \omega(T) = 0 \quad \forall \phi \in Y$$

gilt. Hieraus ist folgende Endzeit-Bestimmungsgleichung für die adjungierten Zustände  $\varrho, \pi$  gegeben

$$\omega(T) \cdot \phi(T) = \begin{pmatrix} J'_2(\mathbf{r}^*(T)) \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \phi_r(T) \\ \phi_p(T) \end{pmatrix} \quad \forall \phi \in Y \hookrightarrow C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2.$$

Da die Abbildung  $\text{tr} : C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2 \rightarrow \mathbb{R}^6$  mit  $\text{tr}(\phi) := \phi(T)$ , aufgrund der Dichtigkeit von  $Y$  in  $C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ , surjektiv ist, ergeben sich die Endzeitbedingungen zu

$$\varrho(T) = \nabla J_2(\mathbf{r}^*(T)) \quad \wedge \quad \pi(T) = 0.$$

Somit sind (4.89) und (4.87) nachgewiesen und damit wurde die Gültigkeit der Gleichungen (4.86)-(4.91) mit den dazugehörigen Multiplikatoren und Adjungierten bewiesen.  $\square$

**Lemma 4.6.33** (Gradientengleichung und Regularität von  $\chi$ ).

Es gelte Annahme 4.6.20. Seien die lokale Optimallösung  $(\mathbf{y}^*, u^*)$  von (P) und die adjungierten Zustände  $\varrho, \pi$  von (4.86)-(4.89) gegeben. Dann ergibt sich die Bestimmungsgleichung für die optimale Steuerung  $u^*$  durch

$$u^* = \frac{q}{\alpha} \int_0^T \left[ \partial_n \chi(t) + [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n}] \cdot \pi(t) \right] dt \quad \text{f.ü. auf } \Gamma, \tag{4.102}$$

mit

$$\chi(t) = -\Delta^{-1} \left[ (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t) \right] \in \mathcal{H}.$$

Des Weiteren gilt für die Lösung der adjungierten Poisson Gleichung

$$\chi \in W^{1,\infty}([0, T]; \mathcal{H}).$$

**Beweis.** Vergegenwärtigt man sich die Lagrangefunktion (4.63) und betrachtet man deren Ableitung nach der Steuerung  $u \in L^2(\Gamma; \mathbb{R})$  (Differenzierbarkeit nach Lemma 4.6.3 sichergestellt), dann resultiert hieraus die Gradientengleichung (4.68c) gegeben durch

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial u}(\mathbf{r}^*, u^*) + \frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*)^* \begin{pmatrix} \pi \\ \varrho \end{pmatrix} = 0. \quad \text{in } L^2(\Gamma) \quad (4.103)$$

Konzentriert man sich zunächst auf die zweite Komponente von (4.103). Der Tatsache, dass  $\frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*)$  von  $L^2(\Gamma)$  nach  $Z$  abbildet, geschuldet, folgt für die adjungierte Abbildung  $\frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*)^* : Z \rightarrow L^2(\Gamma)$ . So gilt für alle  $\phi_u \in L^2(\Gamma)$  mittels Transposition und Lemma 4.6.3

$$\begin{aligned} & \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*)^* \begin{pmatrix} \pi \\ \varrho \end{pmatrix} \right) \phi_u(\varsigma) d\varsigma \\ &= \int_0^T \begin{pmatrix} \pi(t) \\ \varrho(t) \end{pmatrix} \cdot \left( \frac{\partial e}{\partial u}(\mathbf{y}^*, u^*) \phi_u(\varsigma) \right)(t) dt \\ &= q \int_0^T \pi(t) \cdot \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} R \phi_u(\varsigma)) [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))] d\mathbf{x} dt \\ &\quad - q \int_0^T \pi(t) \cdot \int_{\Gamma} \phi_u(\varsigma) \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n} d\varsigma dt \\ &= q \int_0^T \pi(t) \cdot \left( ((-\Delta^*)^{-1} R \phi_u(\varsigma)), [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))] \right)_{L^2(\Omega)} dt \\ &\quad - q \int_0^T \pi(t) \cdot \int_{\Gamma} \phi_u(\varsigma) \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n} d\varsigma dt \\ &= q \int_0^T \left( \phi_u(\varsigma), R^*((-\Delta)^{-1}) [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))] \cdot \pi(t) \right)_{L^2(\Gamma)} dt \\ &\quad - q \int_0^T \pi(t) \cdot \int_{\Gamma} \phi_u(\varsigma) \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n} d\varsigma dt \\ &= \int_{\Gamma} \phi_u(\varsigma) q \int_0^T \left( R^*(-\Delta)^{-1} [(\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t)] \right. \\ &\quad \left. - [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n}] \cdot \pi(t) \right) dt d\varsigma \quad \forall \phi_u(\varsigma) \in L^2(\Gamma). \end{aligned} \quad (4.104)$$

Dabei sei erwähnt, dass  $\frac{\partial e_2}{\partial u} \phi_u$  gleich Null ist und dass  $(-\Delta)^{-1} : L^2(\Omega) \rightarrow \mathcal{H}$ . Im nächsten Schritt definieren wir die Lösung der adjungierten Poisson Gleichung als

$$\chi(t) := -\Delta^{-1} \left[ (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t) \right] \in \mathcal{H}. \quad (4.105)$$

wobei  $\varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \in L^2(\Omega)$  nach (4.1) gilt. Es gilt, dass  $\partial_u \mathcal{J}(\mathbf{r}^*, u^*) = \alpha u^* \in L^2(\Gamma)$ . Darüber hinaus folgt aus der Definition von  $R$  in (4.30) und der Reflexivität von  $\mathcal{H}$  nach Bemerkung 4.2.16

$$(R^* v, w)_{L^2(\Gamma)} = \langle v, R w \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} = - \int_{\Gamma} \partial_n v w d\varsigma,$$

mit  $R : L^2(\Gamma) \rightarrow \mathcal{H}^*$ ,  $R^* : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\Gamma)$ , so dass

$$\int_{\Gamma} (R^* v + \partial_n v) w d\varsigma = 0.$$

Somit gilt mit dem Fundamentallemma der Variationsrechnung, dass

$$R^* v = -\partial_n v \quad \text{f.ü. auf } \Gamma$$

für alle  $v \in \mathcal{H}$ . Daher erhalten wir mit  $R^* := -\partial_n : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\Gamma)$  und unter Verwendung von (4.104) aus (4.103)

$$\int_{\Gamma} \left( q \int_0^T \left[ -\partial_n \chi(t) - [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n}] \cdot \pi(t) \right] dt + \alpha u^* \right) \phi_u d\zeta = 0$$

$$\forall \phi_u \in L^2(\Gamma).$$

Da des Weiteren  $\partial_n \chi \in C([0, T]; L^2(\Gamma))$ ,  $\alpha u^* \in L^2(\Gamma)$ , ergibt sich somit, dass die optimale Steuerung  $u^*$  folgende Bedingung zu erfüllen hat

$$u^* = \frac{q}{\alpha} \int_0^T \left[ \partial_n \chi(t) + [\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n}] \cdot \pi(t) \right] dt \quad \text{f.ü. auf } \Gamma$$

mit Tychonov Parameter  $\alpha > 0$ .

Wir zeigen nun, dass  $\chi \in W^{1,\infty}([0, T[, \mathcal{H})$ . Seien hierzu  $\phi \in C_0^\infty([0, T[)$  und  $h \in \mathcal{H}^*$  beliebig und nutzen wir zuerst die Definition der distributionellen Zeitableitung in Definition 2.1.9 aus. Damit gilt

$$\begin{aligned} \langle \partial_t \chi(\phi), h \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} &= - \left\langle \int_0^T \chi(t) \partial_t \phi(t) dt, h \right\rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} \\ &= - \int_0^T \langle \chi(t), h \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} \partial_t \phi(t) dt. \quad \forall h \in \mathcal{H}^* \end{aligned} \quad (4.106)$$

Die letzte Gleichheit folgt nach [97, Theorem 10.4 (iii)]. Dann schreiben wir (4.106) mit der Definition von  $\chi$  gegeben in (4.105) und den linearen Abbildungen des inversen und adjungiert, inversen Laplace Operator aus (4.29)

$$\begin{aligned} &\langle \partial_t \chi(\phi), h \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} \\ &= \int_0^T \left\langle \Delta^{-1} \left[ (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t) \right], h \right\rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} \partial_t \phi(t) dt \\ &= \int_0^T \int_{\Omega} \left[ (\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t) \right] ((\Delta^*)^{-1} h)(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \partial_t \phi(t) dt \\ &= \int_{\Omega} ((\Delta^*)^{-1} h)(\mathbf{x}) \int_0^T \left[ (\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \pi(t) \right] \partial_t \phi(t) dt d\mathbf{x} \\ &= - \int_{\Omega} ((\Delta^*)^{-1} h)(\mathbf{x}) \int_0^T \left\{ \left[ -\nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t) \right] \cdot \pi(t) \right. \\ &\quad \left. + (\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \right\} \phi(t) dt d\mathbf{x} \end{aligned}$$

für alle  $h \in \mathcal{H}^*$ , unter Anwendung des Theorems von Fubini [2, Theorem 1.54] auf messbare Funktionen und unter Zuhilfenahme der partiellen Integrationsformel für die Zeitableitung. Dabei beachte man, dass die Testfunktion  $\phi$  auf dem Rand verschwindet und dass sowohl von  $\pi \in W^{1,\infty}([0, T[; \mathbb{R}^3)$  als auch von den restlichen Funktionen die schwachen Ableitungen existieren. Im Folgendem wenden wir ein weiteres Mal das Theorem von Fubini an mit dem Wissen, dass  $\dot{\pi} \in L^\infty([0, T[; \mathbb{R}^3)$

ist. So erhält man

$$\begin{aligned} \langle \partial_t \chi(\phi), h \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} &= - \int_0^T \int_{\Omega} ((\Delta^*)^{-1} h)(\mathbf{x}) \{ [-\nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \\ &\quad + \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t)] \cdot \pi(t) \\ &\quad + (\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \} d\mathbf{x} \phi(t) dt \\ &= - \int_0^T \left\langle h, \Delta^{-1} \{ [-\nabla^2 \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \right. \\ &\quad + \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t)] \cdot \pi(t) \\ &\quad \left. + (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \} \right\rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}} \phi(t) dt \end{aligned}$$

für alle  $h \in \mathcal{H}^*$ , mit Hilfe von Transposition und der Tatsache, dass  $\varphi$  nach (4.1) genügend regulär ist. Damit folgt wieder aus [97, Theorem 10.4 (iii)], dass

$$\begin{aligned} \langle \partial_t \chi(\phi), h \rangle_{\mathcal{H}, \mathcal{H}^*} &= - \left\langle h, \int_0^T \Delta^{-1} \{ [-\nabla^2 \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \right. \\ &\quad + \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t)] \cdot \pi(t) \\ &\quad \left. + (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \} \phi(t) dt \right\rangle_{\mathcal{H}^*, \mathcal{H}} \\ &\quad \forall h \in \mathcal{H}^* \end{aligned}$$

Aus der letzten Gleichung ergibt sich somit für die distributionelle Ableitung die Form

$$\begin{aligned} \partial_t \chi(\phi) &= - \int_0^T \Delta^{-1} \{ [-\nabla^2 \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \\ &\quad + \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t)] \cdot \pi(t) \\ &\quad + (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \} \phi(t) dt \text{ in } \mathcal{H}. \end{aligned}$$

Setzen wir abschließend

$$\begin{aligned} \tilde{z}(t) &:= -\Delta^{-1} \{ [-\nabla^2 \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \dot{\mathbf{r}}^*(t) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \\ &\quad + \nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \dot{\mathbf{p}}^*(t)] \cdot \pi(t) + (\nabla \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \dot{\pi}(t) \}. \end{aligned}$$

Dann gilt  $\tilde{z} \in L^\infty(]0, T[; \mathcal{H})$ , weil  $\dot{\pi} \in L^\infty(]0, T[; \mathbb{R}^3)$  und damit folgt aus Definition 2.1.9, dass

$$\chi \in W^{1, \infty}(]0, T[; \mathcal{H})$$

liegt. □

Fassen wir die Resultate von Lemma 4.6.32 und Lemma 4.6.33 zusammen, so ist es uns nun möglich, folgendes Theorem über die Zustände, adjungierten Zustände und deren Lagrange Multiplikatoren zu formulieren.

#### 4.6.5. KKT-Bedingungen.

Die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung von (P) ergeben sich zu

**Theorem 4.6.34** (KKT-Bedingungen).

*Sei  $u^* \in L^2(\Gamma)$  die lokale, optimale Randsteuerung. Die dazugehörigen Zustände, Lösungen des Zustandssystems (4.32), bezeichnen wir mit  $(\mathbf{E}^*, \mathbf{B}^*, \eta^*, \mathbf{r}^*, \mathbf{p}^*) \in C([0, T]; X)^2 \times L^2(\Omega) \times C^1([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$ . Des Weiteren gelte Annahme 4.6.20.*

*Dann existieren die adjungierten Zustände*

$$(\Phi, \Psi, \chi, \varrho, \pi) \in C([0, T]; X)^2 \times W^{1, \infty}(]0, T[; \mathcal{H}) \times \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^3) \times W^{1, \infty}(]0, T[; \mathbb{R}^3)$$

und ein Lagrange-Multiplikator  $\mu \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , so dass folgendes Optimalitätssystem erfüllt ist:

Zustandsgleichungen:

Maxwell Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^*(t) \\ \mathbf{B}^*(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A} \begin{pmatrix} \mathbf{E}^*(t) \\ \mathbf{B}^*(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -q \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \mathbf{v}(\mathbf{p}^*(t)) \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{f.ü. in } (0, T) \\ \mathbf{E}^*(0) &= \mathbf{E}_0, \quad \mathbf{B}^*(0) = \mathbf{B}_0 \end{aligned}$$

Newton-Lorentz Gleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}}^*(t) &= q \left( \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\mathbf{E}^*(t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{B}^*(t)) d\mathbf{x} \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Gamma} u^* \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n} d\zeta \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Omega} \eta^* [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))] d\mathbf{x} \right) \quad \forall t \in [0, T] \\ \mathbf{p}^*(0) &= \mathbf{p}_0 \\ \dot{\mathbf{r}}^*(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}^*(t)) \quad \forall t \in [0, T] \\ \mathbf{r}^*(0) &= \mathbf{r}_0 \end{aligned}$$

Poisson Gleichung:

$$\int_{\Omega} \eta^* \Delta v d\mathbf{x} = \int_{\Gamma} u^* \partial_n v d\zeta \quad \forall v \in \mathcal{H}$$

Zustandsbeschränkung:

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}^*)(t) \leq 0 \quad \forall t \in [0, T]$$

Adjungierte Gleichungen:

Adjungierte Maxwell Gleichung:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A}^* \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t) \\ \pi(t) \times \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \end{pmatrix} \quad \text{f.ü. in } (0, T) \\ \Phi(T) &= \Psi(T) = 0 \end{aligned} \tag{4.107}$$

Adjungierte Newton-Lorentz Gleichung:

$$\begin{aligned} -\dot{\pi}(t) &= q \int_{\Omega} \mathbf{B}^*(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) d\mathbf{x} \\ &\quad + q \int_{\Omega} \eta^* [\boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t) \times \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))] d\mathbf{x} \\ &\quad - q \int_{\Gamma} u^* \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}'(\mathbf{p}^*(t)) \pi(t)) d\zeta \\ &\quad - q^2 \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) v'(\mathbf{p}^*(t)) \Phi(t) d\mathbf{x} + v'(\mathbf{p}^*(t)) \varrho(t) \end{aligned} \tag{4.108}$$

f.ü. in  $]0, T[$

$$\pi(T) = 0$$

$$\begin{aligned}
-\dot{\varrho}(t) &= -q \int_{\Omega} \eta^* [\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \nabla^2 \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t)] d\mathbf{x} \\
&\quad + q \int_{\Gamma} u^* [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \cdot \boldsymbol{\pi}(t)] (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) d\varsigma \\
&\quad - q \int_{\Omega} [(\mathbf{E}^*(t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{B}^*(t)) \cdot \boldsymbol{\pi}(t)] \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) d\mathbf{x} \quad (4.109) \\
&\quad + q^2 \int_{\Omega} \mathbf{v}(\mathbf{p}^*(t)) [\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \cdot \Phi(t)] d\mathbf{x} \\
&\quad + \nabla J_1(\mathbf{r}^*(t)) - g'(\mathbf{r}^*(t))^\top \dot{\boldsymbol{\mu}}(t) \quad f.\ddot{u}. \text{ in } ]0, T[ \\
\varrho(T) &= \nabla J_2(\mathbf{r}^*(T))
\end{aligned}$$

*Sprungbedingungen:*

$$\varrho(t_i) - \lim_{\varepsilon \searrow 0} \varrho(t_i - \varepsilon) = g'(\mathbf{r}^*(t_i))^\top \left( \lim_{\varepsilon \searrow 0} \boldsymbol{\mu}(t_i - \varepsilon) - \boldsymbol{\mu}(t_i) \right), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (4.110)$$

*Adjungierte Poisson-Gleichung:*

$$\begin{aligned}
-\Delta \chi(\mathbf{x}, t) &= (\nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \boldsymbol{\pi}(t) \quad f.f.a. (\mathbf{x}, t) \in ]0, T[ \times \Omega \\
\chi(\mathbf{x}, t) &= 0 \quad f.f.a. (\mathbf{x}, t) \in ]0, T[ \times \Gamma
\end{aligned} \quad (4.111)$$

*Gradienten Gleichung:*

$$u^*(\varsigma) = \frac{q}{\alpha} \int_0^T \left[ \partial_n \chi(\varsigma, t) + [\varphi(\varsigma - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \times \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\pi}(t) \right] dt \quad f.\ddot{u}. \text{ auf } \Gamma \quad (4.112)$$

*Komplementaritätsbedingungen:*

$$\begin{aligned}
\mu_j \text{ monoton wachsend, } \int_0^T g_j(\mathbf{r}^*(t)) d\mu_j(t) = 0, \quad g_j(\mathbf{r}^*(t)) \leq 0 \quad \forall t \in [0, T] \\
\text{für alle } j = 1, \dots, m
\end{aligned} \quad (4.113)$$

**Beweis.** Es ist offensichtlich, dass aus Lemma 4.6.32 und Lemma 4.6.26 die Existenz und Regularität, der adjungierten Maxwell Operatoren  $\Phi, \Psi \in C([0, T]; \mathbb{R}^3)^2$  mit zugehöriger adjungierter Maxwell Gleichung (4.107) und der adjungierten Zustände  $(\varrho, \boldsymbol{\pi}) \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^3) \times W^{1,\infty}([0, T]; \mathbb{R}^3)$  mit erfülltem adjungiertem System (4.108) und (4.109) und angegebenen Endzeitbedingungen folgt. Die Sprungbedingung (4.110) und die Komplementaritätsbedingungen (4.113) sind nach Lemma 4.6.32 und Formeln (4.91) und (4.90) erfüllt. Hieraus folgt ebenso die Regularität des Multiplikators  $\boldsymbol{\mu} \in \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ . Die Gradientengleichung (4.112) und die adjungierte Poisson Gleichung (4.111) wurden für die optimale Randsteuerung  $u^*$  in Lemma 4.6.33 bewiesen. □

#### 4.7. Formulierung der adjungierten Maxwell Gleichungen.

Wir werden nun abschließend die adjungierten Maxwell Gleichungen (4.107) etwas genauer studieren. In Lemma 4.6.26 konnten wir zeigen, dass (4.74) die milde Lösung zu (4.78) ist, wobei  $\begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} \in C([0, T]; X \times X)$ . Wir wollen im Folgenden die Gestalt der adjungierten Maxwell Gleichungen herausarbeiten. Hierzu führen wir den Begriff der starken Lösung ein, der sich zwischen dem Begriff der klassischen und milden Lösung wiederfindet.

**Definition 4.7.1** (Starke Lösung des Cauchy Anfangswertproblems).

Sei das Cauchy Anfangswertproblem (A.1) gegeben. Wir nennen eine Funktion  $w$  starke Lösung von (A.1), falls

- $w$  differenzierbar in  $X$  fast überall in  $(0, T)$  ist,
- $w' \in L^1(0, T; X)$ ,
- $w(0) = w_0$  und  $w'(t) = Aw(t) + f(t)$  fast überall in  $(0, T)$  ist.

Das folgende Theorem, bewiesen in [85, Kapitel 4, Theorem 2.9], gibt an, wann eine milde Lösung von (A.1) eine starke Lösung ist.

**Theorem 4.7.2.** Sei  $\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator zu der  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)$ , seien  $f \in L^1(0, T; X)$  und

$$v(t) = \int_0^t \mathcal{G}(t-s)f(s) ds, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Dann hat das Anfangswertproblem (A.1) eine starke Lösung  $w$  in  $[0, T]$  für jedes  $w_0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ , falls eine der folgenden beiden Bedingungen erfüllt ist

- (i)  $v(t)$  ist fast überall differenzierbar in  $(0, T)$  und  $v'(t) \in L^1(0, T; X)$
- (ii)  $v(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$  fast überall in  $(0, T)$  und  $\mathcal{A}v(t) \in L^1(0, T; X)$ .

Falls (A.1) eine starke Lösung  $w$  in  $[0, T]$  für ein Anfangswert  $w_0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$  hat, dann erfüllt  $v$  die Bedingungen (i) und (ii).

Kommen wir nun zu unserer Betrachtung der Maxwell Gleichungen bzw. der adjungierten Maxwell Gleichungen zurück. Vergegenwärtigt man sich der Gestalt der Adjungierten  $\Phi, \Psi \in C([0, T]; X)$  mit  $X = L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$ , d.h.

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} + \mathcal{A}^* \begin{pmatrix} \Phi(t) \\ \Psi(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t) \\ \pi(t) \times \varphi(\cdot - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \end{pmatrix} \quad \text{f.ü. in } (0, T) \\ \Phi(T) = \Psi(T) &= 0, \end{aligned}$$

mit Domäne  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = H_{\text{curl}}^\Gamma$ .

**Annahme 4.7.3.** Es gelten die folgenden Annahmen:

- (i) Es erfüllen  $(\Phi(t), \Psi(t))^\top$  eine der beiden Bedingungen aus Theorem 4.7.2,
- (ii)  $\Phi, \Psi \in L^2([0, T]; H(\text{curl}; \Omega)) \cap H^1([0, T]; X)$ .

**Lemma 4.7.4.** Es gelte Annahme 4.7.3. Dann formulieren sich die adjungierten Maxwell Gleichungen als

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) + \text{curl } \Psi(\mathbf{x}, t) &= \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ -\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) - \text{curl } \Phi(\mathbf{x}, t) &= \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ \text{div} \left( \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t) \right) &= -\text{div}(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \pi(t)) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ \text{div} \left( \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) \right) &= -\text{div}(\pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ \Phi(\boldsymbol{\zeta}, t) \times \mathbf{n} &= 0 && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Gamma \times ]0, T[ \\ \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{\zeta}, t) \cdot \mathbf{n} &= -\pi(t) \times \varphi(\boldsymbol{\zeta} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \mathbf{n} && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Gamma \times ]0, T[ \\ \Phi(\mathbf{x}, T) = 0, \quad \Psi(\mathbf{x}, T) &= 0 && \text{f.ü. in } \Omega. \end{aligned}$$

**Beweis.** Es gilt nach Annahme 4.7.3 (i), dass die milde Lösung  $(\Phi(t), \Psi(t))^\top$  eine starke Lösung von (4.107) ist  $(\Phi(T) = \Psi(T) = 0 \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*))$ . Somit ist  $(\Phi(t), \Psi(t))^\top$  fast überall auf  $(0, T)$  differenzierbar und  $(\Phi(t), \Psi(t))^\top \in \mathcal{D}(\mathcal{A}^*) = \mathbf{H}_{\text{curl}}^\Gamma$ . Damit folgt aus (4.107) und Annahme 4.7.3 (ii), dass

$$\begin{aligned} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{x}, t)}_{\in L^2(]0, T[ \times \Omega)} + \underbrace{\text{curl } \Psi(\mathbf{x}, t)}_{\in L^2(]0, T[ \times \Omega)} &= \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ - \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t)}_{\in L^2(]0, T[ \times \Omega)} - \underbrace{\text{curl } \Phi(\mathbf{x}, t)}_{\in L^2(]0, T[ \times \Omega)} &= \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) && \text{f.f.a. } (x, t) \in \Omega \times ]0, T[ \\ \Phi(\mathbf{x}, T) = 0, \quad \Psi(\mathbf{x}, T) = 0 &&& \text{f.ü. in } \Omega. \end{aligned} \tag{4.114}$$

gilt. Wir testen (4.114) mit Testfunktionen

$$\mathbf{V}, \mathbf{W} \in C^1(\overline{\Omega}; \mathbb{R}^3), \tag{4.115}$$

so dass

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\partial_t \begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{x}, t) \\ \Psi(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{W}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \text{curl } \Psi(\mathbf{x}, t) \\ -\text{curl } \Phi(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{W}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} d\mathbf{x} \\ = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t) \\ \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{V}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{W}(\mathbf{x}) \end{pmatrix} d\mathbf{x}, \quad \text{f.f.a. } t \in ]0, T[ \end{aligned} \tag{4.116}$$

gilt. Mit der partiellen Integrationsformel (4.20) und  $\Phi \times \mathbf{n} = 0$  f.f.a.  $(x, t) \in \Gamma \times ]0, T[$  folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) + \text{curl } \mathbf{V}(\mathbf{x}) \cdot \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} (\mathbf{V} \times \mathbf{n}) \cdot \Psi d\zeta \\ = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t) \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \text{f.f.a. } t \in ]0, T[ \\ \int_{\Omega} -\partial_t \Psi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{W}(\mathbf{x}) - \text{curl } \mathbf{W}(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \\ = \int_{\Omega} \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \mathbf{W}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \text{f.f.a. } t \in ]0, T[ \\ \forall \mathbf{V}, \mathbf{W} \in C^1(\overline{\Omega}; \mathbb{R}^3). \end{aligned} \tag{4.117}$$

Aus der Dichtheit von  $C^1(\overline{\Omega}; \mathbb{R}^3)$  in  $H(\text{curl}; \Omega)$  schließt man

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) + \text{curl } \mathbf{V}(\mathbf{x}) \cdot \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} + \langle \gamma_t(\mathbf{V}), \Psi \rangle \\ = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t) \cdot \mathbf{V}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{4.118a}$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\partial_t \Psi(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{W}(\mathbf{x}) - \text{curl } \mathbf{W}(\mathbf{x}) \cdot \Phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \\ = \int_{\Omega} \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \mathbf{W}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \end{aligned} \tag{4.118b}$$

$$\text{f.f.a. } t \in ]0, T[, \quad \forall \mathbf{V}, \mathbf{W} \in H(\text{curl}; \Omega). \tag{4.118c}$$

Wir testen somit (4.118a) mit den Eigenschaften  $\mathbf{V}(\mathbf{x}) = \nabla_x \phi(\mathbf{x})$  mit  $\phi \in \mathcal{D}(\Omega)$ , und  $\mathbf{V} \times \mathbf{n} = 0$  f.ü. auf  $\Gamma$ . Man erhält

$$- \int_{\Omega} \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \cdot \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t) \cdot \nabla_x \phi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \text{f.f.a. } t \in ]0, T[$$

Die partielle Integration (Formel (4.9)) der rechten Seite liefert

$$\int_{\Omega} \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \cdot \partial_t \Phi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \operatorname{div}(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t)) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[, \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Damit ergibt sich nach Definition des distributionellen Operators, dass

$$\operatorname{div} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \right) = -\operatorname{div}(\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t))\pi(t)) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[ \times \Omega \quad (4.119)$$

und somit  $\frac{\partial \Phi}{\partial t} \in L^2(]0, T[; H(\operatorname{div}; \Omega))$ .

Wenden wir uns Gleichung (4.118b) zu. Als Testfunktionen wählen wir  $\mathbf{W}(\mathbf{x}) = \nabla_x \phi(\mathbf{x})$  mit  $\phi \in \mathcal{D}(\Omega)$ . Man erhält

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \cdot \partial_t \Psi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \\ = \int_{\Omega} \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[ \end{aligned}$$

Die partielle Integration (Formel (4.9)) der rechten Seite liefert

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \cdot \partial_t \Psi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \\ = \int_{\Omega} \operatorname{div}(\pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[, \forall \phi \in \mathcal{D}(\Omega). \end{aligned}$$

Somit ergibt sich mit der Definition des Divergenz-Operators, dass

$$\operatorname{div} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) \right) = -\operatorname{div}(\pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \quad \text{f.ü. in } ]0, T[ \times \Omega. \quad (4.120)$$

und damit  $\frac{\partial \Psi}{\partial t} \in L^2(]0, T[; H(\operatorname{div}; \Omega))$ . Im letzten Schritt weisen wir die Randbedingung für  $\Psi$  nach.

Wir testen ein weiteres Mal (4.118b). Man verwendet nun  $\mathbf{W}(\mathbf{x}) = \nabla_x \phi(\mathbf{x})$  mit  $\phi \in C^2(\bar{\Omega})$ . Es gilt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \cdot \partial_t \Psi(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} \\ = - \int_{\Omega} \pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \nabla_x \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[, \forall \phi \in C^2(\bar{\Omega}). \end{aligned}$$

Mit der partiellen Integrationsformel (4.9) angewandt auf die beiden Seiten der Gleichung, folgt

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) \operatorname{div}(\partial_t \Psi(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} + \langle \gamma_n(\partial_t \Psi), \phi \rangle_{H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma), H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \\ = \int_{\Omega} \operatorname{div}(\pi(t) \times \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \phi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ - \int_{\Gamma} (\pi(t) \times \varphi(\boldsymbol{\varsigma} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \mathbf{n} \phi(\boldsymbol{\varsigma}) \, d\boldsymbol{\varsigma} \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[, \forall \phi \in C^2(\bar{\Omega}), \end{aligned} \quad (4.121)$$

wobei obige Randterme von den jeweiligen partiellen Integrationsformeln herkommen. Der erste Term der linken Seite aufsummiert mit dem ersten Term der rechten Seite ergibt nach (4.120) Null, sodass aus (4.121) folgt

$$\partial_t \Psi \cdot \mathbf{n} = -(\pi(t) \times \varphi(\boldsymbol{\varsigma} - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t))) \cdot \mathbf{n} \quad \text{in } H^{-\frac{1}{2}}(\Gamma), \text{ f.f.a. } t \in ]0, T[.$$

Aufgrund der Regularität der rechten Seite ( $\varphi \in C^{2,1}(\mathbb{R}^3)$ ), siehe (4.1)) gilt die Gleichung im Sinne von

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\varsigma, t) \cdot \mathbf{n} = -\pi(t) \times \varphi(\varsigma - \mathbf{r}^*(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^*(t)) \cdot \mathbf{n} \quad \text{f.f.a. } (x, t) \in \Gamma \times ]0, T[.$$

□

**Bemerkung 4.7.5.** *Vergleicht man die Formulierung der Maxwell Gleichung (3.2) mit der Formulierung der adjungierten Maxwell Gleichung, so ist zuerkennen, dass in der rechten Seite der Adjungierten der Multiplikator  $\pi$  eingeht und darüber hinaus es einen Bruch der Struktur im Vergleich zu den Maxwellschen Zustandsgleichungen gibt. Aufgrund der Tatsache, dass in der rechten Seite der Multiplikator  $\pi$  auftritt, hat man kein Äquivalent zur Ladungserhaltung wie im Falle der Zustandsgleichungen gegeben, sodass sowohl die obigen Divergenzgleichungen als auch die Randbedingungen von den zeitlichen Ableitungen der Adjungierten  $\Phi, \Psi$  abhängen. Des Weiteren handelt sich hierbei um ein rückwärts in der Zeit gerichtetes Gleichungssystem.*

#### 4.8. Divergenzfreie Erweiterung des externen Magnetfelds.

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der Frage beschäftigen, ob es möglich ist das externe Magnetfeld  $\mathbf{b}$ , welches die Bedingungen

$$\operatorname{div} \mathbf{b} = 0, \quad \operatorname{curl} \mathbf{b} = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (4.122)$$

erfüllt, divergenz- und rotationsfrei auf einem beschränkten, einfach zusammenhängenden, offenen Gebiet  $\Omega'$  mit  $\Omega \subset\subset \Omega'$  fortzusetzen. Die Motivation, die hinter dieser Fragestellung steht, ist, dass man möglichst keine Oberflächenströme auf dem Rand des Gebiets haben möchte. Es gilt folgendes Lemma.

**Lemma 4.8.1** (Divergenzfreie Fortsetzung von  $\mathbf{b}$ ).

*Seien  $\Omega, \Omega' \subset \mathbb{R}^3$  offene, beschränkte und einfach zusammenhängende Gebiete und  $\Omega \subset\subset \Omega'$ . Darüber hinaus besitzt  $\Omega$  einen  $C^1$ -Rand. Sei  $\mathbf{b} \in X$  und die Bedingung (4.122) erfüllt, dann gibt es eine divergenzfreie Fortsetzung*

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) := \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1(\mathbf{x}) \\ \mathbf{B}_2(\mathbf{x}) \end{pmatrix} := \begin{cases} \mathbf{b}(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega \\ \nabla \phi(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega' \setminus \Omega, \end{cases}$$

bis auf Mengen mit Maß Null, mit  $\phi$  Lösung der Poisson Gleichung

$$\begin{aligned} \int_{\Omega' \setminus \Omega} \nabla \phi \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} &= - \left\langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \right\rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)^*, H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \quad \forall v \in H^1(\Omega' \setminus \Omega) \\ \int_{\Omega' \setminus \Omega} \phi \, d\mathbf{x} &= 0. \end{aligned} \quad (4.123)$$

Hierbei bezeichnen  $\gamma_\tau^{\Omega'}$  die Spur definiert in Theorem 4.2.5 mit  $\Gamma := \partial\Omega$  und  $\gamma_n^\Omega$  die Normalenspur definiert in Theorem 4.2.6 (iv).

**Beweis.** Es gilt  $\mathbf{b} \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$  und nach Voraussetzung ist  $\operatorname{div} \mathbf{b} = 0 \in L^2(\Omega)$ , somit ist  $\mathbf{b}$  ein Element aus  $H(\operatorname{div}; \Omega)$ . Damit ist die Spur  $\gamma_n^\Omega \mathbf{b}$  nach Theorem 4.2.6 (iv) wohl definiert. Die duale Paarung auf der rechten Seite von (4.123)

$$\left\langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} \cdot \right\rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)^*, H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} : H^1(\Omega' \setminus \Omega) \rightarrow \mathbb{R}$$

mit  $\Gamma := \partial\Omega$  ist ein lineares Funktional in  $H^1(\Omega' \setminus \Omega)$ , das beschränkt ist, denn

$$\left| \left\langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \right\rangle \right| \leq \tilde{c} \|\mathbf{b}\|_{H(\operatorname{div}; \Omega)} \|v\|_{H^1(\Omega' \setminus \Omega)},$$

wobei dies aus den Theoremen 4.2.5, 4.2.6(iv) mit  $\tilde{c} \geq 0$  folgt und  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  die Dualität zwischen  $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)^*$ ,  $H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$  im Folgendem bezeichnen soll. Damit gilt

$$\sup_{\|v\|_{H^1(\Omega' \setminus \Omega)}=1} \left| \langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle \right| \leq \tilde{c} \|\mathbf{b}\|_{H(\text{div}; \Omega)}.$$

Dann existiert nach Lax-Milgram eine Lösung  $\phi \in H^1(\Omega' \setminus \Omega)$  von (4.123), die eindeutig ist (unter Zuhilfenahme der Mittelung  $\int_{\Omega' \setminus \Omega} \phi \, d\mathbf{x} = 0$ , siehe Alt [4, Kapitel 6.17/6.18]). Die Lösung erfüllt für alle  $v \in H_0^1(\Omega' \setminus \Omega)$

$$0 = \int_{\Omega' \setminus \Omega} \nabla \phi \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega' \setminus \Omega} \text{div} \nabla \phi v \, d\mathbf{x}$$

Es gilt somit  $\text{div} \nabla \phi = 0$  f.ü. in  $\Omega' \setminus \Omega$ . Mit der Definition von  $\mathbf{B}$ , (4.123) und  $\text{div} \nabla \phi = 0 \in \Omega' \setminus \Omega$  folgt für alle  $v \in H_0^1(\Omega')$ , dass

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} \mathbf{B} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega' \setminus \Omega} \nabla \phi \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} \\ &= - \int_{\Omega} \underbrace{\text{div} \mathbf{b}}_{=0} v \, d\mathbf{x} + \langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle - \langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle \\ &= \langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle - \langle \gamma_n^\Omega \mathbf{b}, \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle \quad v \in H_0^1(\Omega') \end{aligned} \quad (4.124)$$

Nach Theorem 4.2.5 ist für  $v \in H^1(\Omega')$  die Spur eindeutig, sodass  $\gamma_\tau^{\Omega'} v = \gamma_\tau^{\Omega'} v$  gilt und aus (4.124) folgt

$$\int_{\Omega'} \mathbf{B} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall v \in H_0^1(\Omega').$$

Somit ist die schwache Divergenz  $\text{div} \mathbf{B} = 0$  f.ü. in  $\Omega'$  bewiesen, und nach Definition von  $\mathbf{B}$  gilt  $\mathbf{B} \in H(\text{div}; \Omega')$ .  $\square$

**Bemerkung 4.8.2.** *Das divergenzfreie Feld  $\mathbf{B}$  ist jedoch nicht rotationsfrei auf  $\Omega'$  fortsetzbar, trotz der Tatsache, dass  $\text{curl} \mathbf{b} = 0$  in  $\Omega$  ist.*

**Lemma 4.8.3** (Keine gleichzeitige divergenz- und rotationsfreie Fortsetzung).

*Seien  $\Omega, \Omega' \subset \mathbb{R}^3$  offene, beschränkte und einfach zusammenhängende Gebiete und  $\Omega \subset \subset \Omega'$ . Darüber hinaus besitzt  $\Omega$  einen  $C^1$ -Rand. Des Weiteren sei (4.122) erfüllt. Dann gibt es i.A. keine divergenz- und rotationsfreie Fortsetzung von  $\mathbf{b}$  auf  $\Omega'$ .*

**Beweis.** Wir nehmen im Folgendem an, dass es eine divergenz- und rotationsfreie Fortsetzung  $\tilde{\mathbf{B}}$  von  $\mathbf{b}$  auf  $\Omega'$  gibt und leiten hieraus einen Widerspruch her. Sei somit  $\eta$  das zu  $\mathbf{b}$  dazugehörige Skalarpotential. Da  $\Omega'$  einfach zusammenhängend ist und  $\text{curl} \tilde{\mathbf{B}} = 0$  in  $\Omega'$ , existiert nach Theorem 4.2.13 (Theorem von de Rham) ein Potential  $\tilde{\phi} \in \Omega'$  mit  $\nabla \tilde{\phi} = \tilde{\mathbf{B}}$ . Die Divergenzfreiheit von  $\tilde{\mathbf{B}}$  auf  $\Omega'$  führt zu

$$\int_{\Omega'} \nabla \tilde{\phi} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall v \in H_0^1(\Omega'). \quad (4.125)$$

Unter Ausnutzung der partiellen Integrationsformel (4.9) folgert man mit (4.125) und  $\gamma_\tau^{\Omega'} v = \gamma_\tau^{\Omega'} v$  für  $v \in H^1(\Omega')$

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega'} \tilde{\mathbf{B}} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega'} \nabla \tilde{\phi} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \nabla \eta \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega' \setminus \Omega} \nabla \tilde{\phi} \cdot \nabla v \, d\mathbf{x} \\ &= - \int_{\Omega} \underbrace{\text{div}(\nabla \eta)}_{=0} v \, d\mathbf{x} + \langle \gamma_n^\Omega(\nabla \eta), \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle - \int_{\Omega' \setminus \Omega} \underbrace{\text{div}(\nabla \tilde{\phi})}_{=0} v \, d\mathbf{x} + \langle \gamma_n^{\Omega'}(\nabla \tilde{\phi}), \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle \\ &= \langle \gamma_n^\Omega(\nabla \eta) - \gamma_n^{\Omega'}(\nabla \tilde{\phi}), \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle = \langle \gamma_n^\Omega(\mathbf{b}) - \gamma_n^{\Omega'}(\nabla \tilde{\phi}), \gamma_\tau^{\Omega'} v \rangle \quad \forall v \in H_0^1(\Omega'). \end{aligned}$$

Somit folgt aus  $\mathbf{b} \in H(\operatorname{div}; \Omega)$ ,  $\nabla \tilde{\phi} \in H(\operatorname{div}; \Omega')$ , aus der Surjektivität des Spuroperators  $\gamma_r^\Omega$  (siehe Theorem 4.2.5) und der Eindeutigkeit, Linearität der Normalenspur, dass ein Element  $\psi := \nabla \tilde{\phi}|_\Gamma \in H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)$  existiert, sodass

$$\gamma_n^\Omega(\mathbf{b}) = \gamma_n^{\Omega'}(\psi) \quad \text{in } H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)^* \quad (4.126)$$

Es gilt nach Evans [34, Theorem 3, S.316], dass für die Lösung  $\tilde{\phi}$  im Inneren  $\Omega \subset\subset \Omega'$  von (4.125) die Regularität von  $\tilde{\phi} \in C^\infty(\Omega)$  gilt. Hieraus ergibt sich für die Normalenspur

$$\gamma_n^\Omega(\mathbf{b}) = n \cdot \nabla \tilde{\phi} \quad \text{in } C^1(\Gamma),$$

unter der Berücksichtigung des  $C^1$ -Randes. Aber die Normalenspur  $\gamma_n^\Omega(\mathbf{b})$  ist im Allgemeinen nur aus  $H^{1/2}(\Gamma)^*$ . Deshalb kann es keine rotations- **und** divergenzfreie Fortsetzung von  $b$  auf  $\Omega'$  geben.  $\square$

**Bemerkung 4.8.4.** *Betrachten wir ein Magnetfeld  $\mathbf{b}$  gegeben durch  $\mathbf{b} := \nabla \tilde{v}$ , mit  $\Delta \tilde{v} = 0$  in  $\Omega$ ,  $\tilde{v} = g$  auf  $\Gamma$ , wobei  $\tilde{v} \in H^1(\Omega)$  und Randdaten  $g \in H^{1/2}(\Gamma)$ . Setzen wir dies harmonisch fort ([34, Kapitel 5.4, Theorem 1]). Es gilt  $\operatorname{curl} \mathbf{b} = 0$  und  $\operatorname{div} \mathbf{b} = \operatorname{div} \nabla \tilde{v} = 0$  in  $\tilde{\Omega}$ . Dann ist  $\gamma_n^\Omega(\mathbf{b}) \notin C^1(\Gamma)$ .*

**Bemerkung 4.8.5** (Flächenstromdichte).

Sei  $\mathbf{H}$  ein hinreichend reguläres Magnetfeld mit zugehöriger magnetischer Flussdichte  $\mathbf{B}$  (mit  $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{H})$ , z.B. unter Annahme einer linearen Beziehung  $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$ ), wobei  $\mathbf{H}_1$  das rotationsfreie Magnetfeld in  $\Omega$  und  $\mathbf{H}_2$  das rotationsfreie Magnetfeld in  $\Omega' \setminus \Omega$  bezeichnet. Dann gilt für das Magnetfeld  $\mathbf{H}$  und hinreichend glatte Funktionen  $\phi$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'} \mathbf{H} \cdot \operatorname{curl} \phi \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \operatorname{curl} \mathbf{H}_1 \cdot \phi \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} (\mathbf{H}_1 \times \mathbf{n}) \cdot \phi \, d\varsigma \\ &\quad + \int_{\Omega' \setminus \Omega} \operatorname{curl} \mathbf{H}_2 \cdot \phi \, d\mathbf{x} - \int_{\Gamma} (\mathbf{H}_2 \times \mathbf{n}) \cdot \phi \, d\varsigma \\ &= \int_{\Gamma} (\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \times \mathbf{n} \cdot \phi \, d\varsigma \\ &= \int_{\Gamma} \mathbf{K} \cdot \phi \, d\varsigma. \end{aligned}$$

Hierbei zerlegen wir das Gebiet  $\Omega'$  in die Teilgebiete  $\Omega$  und  $\Omega' \setminus \Omega$ , wenden die partielle Integrationsformel (4.7) für den curl-Operator an und definieren uns im letzten Schritt nach [61, Kapitel I.5]  $(\mathbf{H}_1 - \mathbf{H}_2) \times \mathbf{n} := \mathbf{K}$ . Dabei ist  $\mathbf{K}$  eine idealisierte Flächenstromdichte auf der Trennfläche  $\Gamma$ . Anmerkungen hierzu finden sich auch in Kapitel 3.2 wieder.



## 5 Numerische Lösung des Optimalsteuerproblems

Das Ziel des Kapitels ist die numerische Lösung des Optimalsteuerproblems (P). Um auf Lösungen und Resultate näher eingehen zu können, werden wir uns zunächst mit den Diskretisierungen der einzelnen Komponenten des Zustandssystems des Optimierungsproblems beschäftigen. Das Optimalsteuerproblem (P) zur Steuerung von  $n_p$  Partikeln schreibt sich zu

$$\begin{aligned}
\min \quad & \mathcal{J}(\mathbf{r}^i, u) \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{r}^i(t), \mathbf{p}^i(t) \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^3), \quad i = 1, \dots, n_p, \\
& u \in L^2(\Gamma), \\
& \mathbf{e}(\mathbf{r}^i, \mathbf{p}^i, u)(t) = 0 \quad i = 1, \dots, n_p \quad \forall t \in [0, T], \\
& \mathbf{g}(\mathbf{r}^i(t)) \leq 0 \quad i = 1, \dots, n_p \quad \forall t \in [0, T] \\
& \mathbf{p}^i(0) = \mathbf{p}_0^i, \mathbf{r}^i(0) = \mathbf{r}_0^i \quad i = 1, \dots, n_p
\end{aligned} \tag{P_M}$$

Das Problem, bestehend aus einer *tracking type* Formulierung für den Zustand der Position der Partikel und einem Tikhonov Term, der die Randsteuerung  $u$  beinhaltet, in der Zielfunktion, berücksichtigt damit den Verlauf der  $n_p$  Partikeltrajektorien unter Vorgabe einer Trajektorie. Die Zielfunktion hat somit die Gestalt

$$\mathcal{J}(\mathbf{r}^i, u) := \sum_{i=1}^{n_p} \int_0^T \mathcal{J}_1(\mathbf{r}^i(t)) dt + \sum_{i=1}^{n_p} \mathcal{J}_2(\mathbf{r}^i(T)) + \frac{\alpha}{2} \int_{\Gamma} u^2 d\zeta, \tag{5.1}$$

in der die Anteile der  $n_p$ -Partikel mitberücksichtigt werden.

Das Zustandssystem beinhaltet neben den punktweisen Zustandsbeschränkungen an die Positionen der Partikel, das Maxwell-Newton-Lorentz System (in der reduzierten Form zusammengefasst) und die Poisson Gleichung, deren Randdaten die Steuerung  $u$  ist. Des Weiteren fassen wir die reduzierte Form  $\mathbf{e} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)^\top$  in diesem Kontext als

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_1(\mathbf{r}^i, \mathbf{p}^i, u)(t) &:= \dot{\mathbf{p}}^i(t) - q \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^i(t)) \sum_{j=1}^{n_p} \mathbf{F}_L^j(\mathbf{r}^i, \mathbf{p}^i)(t) d\mathbf{x} \\
&\quad + q \int_{\Omega} ((-\Delta^*)^{-1} Ru) \left[ \nabla \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^i(t)) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^i(t)) \right] d\mathbf{x} \\
&\quad - q \int_{\Gamma} u \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}^i(t)) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}^i(t)) \times \mathbf{n} d\zeta \\
\mathbf{e}_2(\mathbf{r}^i, \mathbf{p}^i, u)(t) &:= \dot{\mathbf{r}}^i(t) - \mathbf{v}(\mathbf{p}^i(t)).
\end{aligned} \tag{5.2}$$

auf, wobei  $\mathbf{F}_L^j$  die Lorentzkraft kennzeichnet, die induziert von dem  $j$ -ten Partikel auf das  $i$ -te Partikel wirkt. Die Lösung der Maxwell Gleichung findet sich in der Lorentzkraft  $\mathbf{F}_L^j$  wieder.

Wir konzentrieren uns zunächst auf das Zustandsgleichungssystem bestehend aus den Maxwell-Newton-Lorentz Gleichungen und der Poisson Gleichung.

### 5.1. Diskretisierung der Zustandsgleichungen.

Im Folgenden werden wir eine detaillierte Diskussion der Diskretisierung der einzelnen Komponenten des reduzierten Systems führen. Wir werden uns hierfür zunächst die in das modifizierte Abraham Modell eingehende PDE, die Maxwell Gleichung, anschauen.

### 5.1.1. Diskretisierung der Maxwell Gleichungen.

Die Maxwell Gleichungen (3.2) wurden von uns im analytischen Teil, Kapitel 4.3.1, mittels der Halbgruppentheorie betrachtet und diskutiert. Als Resultat ergab sich eine eindeutige Lösung eben dieser Gleichungen in schwachen Räumen, nämlich in  $C([0, T]; X)^2$ .

Bei unserer numerischen Untersuchung des Optimierungsproblems sind wir deshalb in einem ersten Schritt dazu übergegangen, die Maxwell Gleichungen mit Hilfe ihrer Fundamentallösung darzustellen und deren Lösung zu berechnen. Die Fundamentallösung, die wir in Kapitel 5.2.1 einführen werden, entspricht der Halbgruppe, die im Fall, dass das Gebiet  $\Omega$  der ganze Raum  $\mathbb{R}^3$  ist, entsteht. Folglich werden die Randbedingungen der Maxwell Gleichung nicht berücksichtigt.

Zur numerischen Lösung der Maxwell Gleichungen bieten sich unterschiedliche Methoden bzw. Strategien an. Die Beschreibung der effizienten numerischen Lösung der hyperbolischen Maxwell Gleichungen mittels *Discontinuous* Galerkin-Methoden (DG-Methoden) kann in folgender Literatur gefunden werden: [24, 54]. Man verwendet häufig DG-Methoden für die räumliche Diskretisierung in Kombination mit einem expliziten Runge-Kutta Schema für die Zeitintegration, siehe hierzu [25]. Im Buch [74] von Peter Monk werden *Finite Element Methoden* zur Lösung der Maxwell Gleichungen beschrieben. In [73] werden Fehlerabschätzungen bzgl. der Diskretisierung mittels finiter Elemente der zeitabhängigen Maxwell Gleichungen gezeigt. Hierzu werden rotations-konforme Nédélec Elemente benutzt. In den Arbeiten [113, 114] von I. Yousept wird die optimale Steuerung der zeitharmonischen eddy current equations bzw. der Maxwell Gleichungen mit regularisierten Zustandsbedingungen untersucht und eine Finite Elemente Analysis der vorhandenen Probleme durchgeführt.

### 5.1.2. Diskretisierung der Poisson Gleichung.

Für die Diskretisierung der Poisson Gleichung

$$-\int_{\Omega} \eta \Delta h \, dx + \int_{\Gamma} u \partial_n h \, d\zeta = 0 \quad \forall h \in \mathcal{H}$$

werden wir als Ansatzfunktionen trilineare Finite Elemente benutzen, die sowohl für die Test- als auch Lösungsfunktionen verwendet werden. Die Methode der Finiten-Elemente und deren Analysis wird z.B in [18, 102] beschrieben. Dabei verwenden wir ein Hexaeder-Gitter mit gleichmäßig verteilten Elementen. Hierbei gilt es zu betonen, dass wir trilineare, stetige Ansatzfunktionen benutzen, was eigentlich der Struktur, wie die Poisson Gleichung behandelt wird, nämlich in ihrer sehr schwachen Formulierung mit schwach regulärer Lösung, widerspricht. In [12] findet sich die *a priori* Fehleranalysis zu diesem Procedere, der numerischen Approximation basierend auf der variationellen *Lions-type* Formulierung, wieder. In der Arbeit [12] von Berggren werden ebenso Konvergenzraten von optimaler Ordnung für lineare, konforme Elemente bewiesen.

Die Lösung der diskreten Poisson Gleichung wird durch die Konjugierte- Gradienten (CG) Methode realisiert. Wir verwenden hierbei eine Vorkonditionierung mittels einer unvollständigen LR-Zerlegung der entstehenden Steifigkeitsmatrix.

### 5.1.3. Diskretisierung der Newton-Lorentz-Gleichungen.

Als weitere Komponente zur Bestimmung der Partikelbahnen sind die relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen (3.15) zu erwähnen. Die relativistischen Newton Lorentz Gleichungen werden mit Hilfe eines expliziten Zeitschrittschemas gelöst,

welches häufig im Bereich der Plasma Physik seine Anwendung findet und vor allem als eine standardmäßige Particle-in-Cell-Methode (*kurz: PIC method*) besonders in Verbindung mit Teilchenbeschleunigern benutzt wird. Der Artikel [106] gibt einen Überblick über Particle-in-Cell-Methoden. Das sogenannte Boris Schema, was wir im Nachfolgenden vorstellen werden, hat drei wesentliche Vorteile: Es ist einfach zu implementieren, darüber hinaus ist es explizit und Energie erhaltend. Der größte Nachteil ist jedoch der sehr kleine Stabilitätsbereich des expliziten Schemas. Eine genauere Untersuchung des expliziten Schemas findet sich in Kapitel 5.2.3 wieder. Einen Überblick über Lösungsverfahren zu gewöhnlichen Differentialgleichungen findet sich z.B. in [51] von E. Hairer et al. wieder.

Als eine Alternative zum Boris Schema seien Runge Kutta Methoden genannt. Diese finden auch Anwendung bei der numerischen Lösung der Newton-Lorentz Gleichungen, sind jedoch aufgrund ihrer meist höheren Ordnung auch aufwendiger zu implementieren. Im Hinblick auf die adjungierte Newton-Lorentz Gleichung gibt es Runge-Kutta Schemata, deren adjungierte Schema die gleiche Ordnung aufweisen wie die ursprünglichen Schemata, was in der optimalen Steuerung häufig wünschenswert erscheint. Ein Überblick über solche Schemata findet sich in den Arbeiten [48, 49] von William Hager. Im Buch von R.W. Hockney [58, Kapitel 4.7] findet man eine Reihe von Zeitintegrationsschemata zur Lösung der Newton Lorentz Gleichungen.

Die in die Newton-Lorentz Gleichungen eingehenden physikalischen Größen und Konstanten unterscheiden sich teilweise um viele Größenordnungen. Um numerische Auslöschungseffekte zu vermeiden wird im Folgenden ein Enddimensionalisierungsfaktor eingeführt werden. Es stellt sich des Weiteren die Frage, wie die Integrale mit den ausgeschmierten Delta Dirac Distributionen ausgewertet werden sollen, da auch bei dieser Auswertung Auslöschung auftreten kann. Der Grund hierfür ist der sehr kleine Träger von  $\varphi$ . Wir werden auf die Umsetzung der eben angesprochenen Aspekte in Kapitel 5.2 eingehen.

## 5.2. Praktische Aspekte bei der numerischen Lösung der Zustandsgleichungen.

In der Diskussion des physikalischen Modells wurde zunächst angenommen, dass die elektrische Stromdichte und die Ladungsdichte durch eine Punktladung generiert wird und hierfür wurde die Dirac Delta Distribution eingeführt. In der Entwicklung und Diskussion des modifizierten Abraham Modells (4.2) *schmiert* man die Dirac Distribution aus, gewinnt Regularität und gelangt so zur ausgeschmierten Dirac Delta Funktion  $\varphi$ , die die Eigenschaften (4.1) erfüllt. Wir verwenden für unsere Implementierung folgende polynomiale Funktion  $\varphi_\epsilon : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}_0^+$

$$\begin{aligned} \varphi_\epsilon(\mathbf{x}) &= \varphi_{\epsilon_x}(x_1)\varphi_{\epsilon_y}(x_2)\varphi_{\epsilon_z}(x_3) \\ &:= \left( \frac{15}{16\epsilon_x^5}x_1^4 - \frac{15}{8\epsilon_x^3}x_1^2 + \frac{15}{16\epsilon_x} \right) \left( \frac{15}{16\epsilon_y^5}x_2^4 - \frac{15}{8\epsilon_y^3}x_2^2 + \frac{15}{16\epsilon_y} \right) \\ &\quad \left( \frac{15}{16\epsilon_z^5}x_3^4 - \frac{15}{8\epsilon_z^3}x_3^2 + \frac{15}{16\epsilon_z} \right), \quad \mathbf{x} \in H_\epsilon. \end{aligned} \quad (5.3)$$

mit  $0 < \epsilon := (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)^\top < (R, R, R)^\top \in \mathbb{R}^3$ ,  $H_\epsilon := [-\epsilon_x, \epsilon_x] \times [-\epsilon_y, \epsilon_y] \times [-\epsilon_z, \epsilon_z]$  und setzen im Rest des Gebietes mit Null fort. Es gilt  $\varphi_\epsilon(\mathbf{x}) = 0 \forall \mathbf{x} \in \partial H_\epsilon$ . Wir erhalten also

$$\varphi(\mathbf{x}) := \begin{cases} \varphi_\epsilon(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in H_\epsilon \\ 0, & \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus H_\epsilon. \end{cases} \quad (5.4)$$

mit  $R := \max \left\{ \sqrt{\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2}, \sqrt{\epsilon_x^2 + \epsilon_z^2}, \sqrt{\epsilon_y^2 + \epsilon_z^2} \right\}$  und  $H_\epsilon \subset B_R(0)$ . Somit gilt, da  $\varphi_\epsilon$  eine Komposition und Hintereinanderausführung von Polynomen 4ten Grades ist, dass  $\varphi_\epsilon$  differenzierbar ist. Der Träger ist nach Wahl von (5.4) in der Menge  $B_R(0)$  enthalten. Des Weiteren gilt

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \int_{H_\epsilon} \varphi_\epsilon(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-\epsilon_x}^{\epsilon_x} \varphi_{\epsilon_x}(x_1) \int_{-\epsilon_y}^{\epsilon_y} \varphi_{\epsilon_y}(x_2) \int_{-\epsilon_z}^{\epsilon_z} \varphi_{\epsilon_z}(x_3) dx_3 dx_2 dx_1 \\ &= \int_{-\epsilon_x}^{\epsilon_x} \varphi_{\epsilon_x}(x_1) \int_{-\epsilon_y}^{\epsilon_y} \varphi_{\epsilon_y}(x_2) \underbrace{\left[ \frac{x_3}{\epsilon_z} \left( \frac{3x_3^4}{16\epsilon_z^4} - \frac{5x_3^2}{8\epsilon_z^2} + \frac{15}{16} \right) \right]_{-\epsilon_z}^{\epsilon_z}}_{=1} dx_2 dx_1 \\ &= 1 \end{aligned}$$

und somit ist  $\varphi$  normalisiert.

### 5.2.1. Umsetzung bei den Maxwell-Gleichungen.

Wie in Kapitel 5.1.1 kurz umschrieben werden wir zur Lösung der Maxwell Gleichungen (3.2) auf deren Fundamentallösung zurückgreifen. Man muss erwähnen, dass die von uns in diesem Kapitel eingeführten Liénard-Wiechert Potentiale, die Halbgruppenrepräsentanten der Maxwell Gleichungen sind für den Fall, dass das Gebiet  $\Omega = \mathbb{R}^3$  ist. Sowohl essentielle als auch natürliche Randbedingungen werden hierbei vernachlässigt. Die Herleitung der Liénard-Wiechert Felder ist in den Büchern [61, Kapitel 14.1] und [100, Kapitel 2.1] ausführlich dargestellt.

#### Liénard-Wiechert Potentiale und EM-Feld Repräsentation

Unter der Annahme, dass sich elektrische Ströme und Ladungsdichten durch die Bewegung von einzelnen Punktladungen ergeben, ist es möglich, explizit die Skalar- und Vektorpotentiale anzugeben. Hierzu betrachten wir eine Punktladung, die sich mit Geschwindigkeit  $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t)$  auf der Trajektorie  $\mathbf{r}(t)$  fortbewegt. Des Weiteren führen wir den Begriff der retardierten Zeit ein:

**Definition 5.2.1.** *Wir bezeichnen*

$$t_{ret}(\mathbf{x}, t) := t - \frac{1}{c} |\mathbf{x} - \mathbf{r}(t_{ret})|_2$$

als retardierte Zeit, wobei  $\mathbf{x}, \mathbf{r}(t_{ret}) \in \tilde{\Omega}$  liegen (mit  $\tilde{\Omega}$  definiert in (4.12)).

Es soll somit gelten, dass sich Änderungen der elektromagnetischen Felder mit endlicher Geschwindigkeit, Lichtgeschwindigkeit  $c$ , ausbreiten und nicht instantan. Ein Signal, das von einem Beobachter am Ort  $\mathbf{x}$  zum Zeitpunkt  $t$  wahrgenommen wird, wurde von einer Ladung zum Zeitpunkt  $t_{ret}$  am Ort  $\mathbf{r}(t_{ret})$  ausgesendet. Aufgrund der impliziten Form gilt es zunächst, diese Gleichung zu lösen, um anschließend die aus den Maxwell Gleichungen resultierenden Felder aufstellen zu können.

Darüberhinaus definieren wir  $\mathbf{R}(t) := \mathbf{x} - \mathbf{r}(t)$  und  $\mathbf{R}_v(t, \mathbf{p}) := (\mathbf{R}(t) - \beta(\mathbf{p})\mathbf{R}(t))$ . Die retardierten Skalar- und Vektorpotentiale  $\phi$  and  $\mathbf{A}$  sind dann gegeben als

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, t) &= \frac{q}{4\pi\epsilon |\mathbf{R}(t_{ret})|_2} \left[ \frac{1}{(1 - \beta(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{n})} \right]_{t=t_{ret}}, \\ \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) &= \frac{q\mu}{4\pi |\mathbf{R}(t_{ret})|_2} \left[ \frac{\beta(\mathbf{p})}{(1 - \beta(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{n})} \right]_{t=t_{ret}} = \frac{\beta(\mathbf{p}(t_{ret}))}{c} \phi(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (5.5)$$

wobei wir berücksichtigt haben, dass  $\epsilon\mu = \frac{1}{c^2}$ . Hierbei ist  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{R}(t)}{|\mathbf{R}(t)|_2}$  der Einheitsvektor, der vom Send- zum Empfangspunkt orientiert ist. Dieses Skalarpotential  $\phi$

und das Vektorpotential  $\mathbf{A}$  werden die Liénard-Wiechert Potentiale genannt. Eine ausführliche Darstellung dieser Potentiale findet sich in [61, Kapitel 14.1].

Durch die Einführung von Skalar- und Vektorpotentialen in (5.5) lassen sich die elektromagnetischen Felder in der Form

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= -\nabla\phi(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \text{curl}\mathbf{A}(\mathbf{x}, t).\end{aligned}$$

darstellen. Man beachte auch hierzu das Kapitel 3.4.2 über Skalarpotentiale und konservative Vektorfelder. Im nächsten Schritt differenziert man die Potentiale (5.5) nach  $\mathbf{x}$  und der Zeit  $t$ , die implizit von den retardierten Zeiten  $t_{ret}$  abhängen. Somit ergeben sich nach einigem rechnerischen Aufwand die elektromagnetischen Felder, die die Fundamentallösungen der Maxwell Gleichungen in  $\mathbb{R}^3$  sind, zu

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{x}, t_{ret}) &= \frac{q}{4\pi\epsilon} \left( \frac{(1 - |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t_{ret}))|_2^2)}{|\mathbf{R}_v(t_{ret}, \mathbf{p}(t_{ret}))|_2^3} \mathbf{R}_v(t_{ret}, \mathbf{p}(t_{ret})) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{c^2 |\mathbf{R}_v(t_{ret}, \mathbf{p}(t_{ret}))|_2^3} \mathbf{R}(t_{ret}) \times (\mathbf{R}_v(t_{ret}, \mathbf{p}(t_{ret})) \times \dot{\mathbf{v}}(\mathbf{p}(t_{ret}))) \right) \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t_{ret}) &= c\epsilon\mu \frac{\mathbf{R}(t_{ret})}{|\mathbf{R}(t_{ret})|_2} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t_{ret}) \\ t_{ret} = t_{ret}(\mathbf{x}, t) &= t - \frac{|\mathbf{R}(t_{ret})|_2}{c}.\end{aligned}\tag{5.6}$$

Man kann also feststellen, dass das so erhaltene  $\mathbf{E}$ -Feld sich in zwei Komponenten zerlegen lässt. Hierbei ist der erste Term des elektrischen Feldes nur abhängig von der Geschwindigkeit des Partikels und proportional zu  $\frac{1}{|\mathbf{R}|_2}$  (Nahfeld), der zweite Term wird durch die Beschleunigung des Partikels bestimmt und ist proportional zu  $\frac{1}{|\mathbf{R}|_2^2}$  (Fernfeld).

Aufgrund der Form der elektrischen und magnetischen Felder (5.6) gibt es zwei wesentliche Schwierigkeiten, die sich bei der Berechnung dieser Felder ergeben. Einerseits gilt es nun, die retardierte Zeit  $t_{ret}$  zu bestimmen aus ihrer implizit gegebenen Gleichung, was sich jedoch nur für wenige einfache Bewegungsprobleme realisieren lässt. Andererseits sind die oben beschriebenen Felder singularär, d.h. die Potentiale weisen eine Singularität auf der Weltlinie des Partikels auf. Hierbei bezeichnet die Weltlinie des Partikels seine Trajektorie in der Raumzeit  $(ct, \mathbf{x})$ . Da jedoch eben in den ursprünglichen Newton-Lorentz Gleichungen die elektromagnetischen Felder an der Position der Ladungen ausgewertet werden müssen, spielt die Singularität der Felder eine entscheidende Rolle. Dies wird in der Arbeit dadurch umgangen, dass das semi-relativistische Abraham Modell eingeführt wird. Hierbei verwendet man die geglättete Dirac Funktion, die in Formel (5.4) definiert ist, und faltet diese mit den EM-Feldern. Das so entstandene Integral wird mit einer gewichteten Simpsonregel ausgewertet, siehe hierzu Kapitel 5.2.3.

### Annahme 5.2.2.

- Für die numerische Umsetzung nehmen wir an, dass der zweite Term von  $\mathbf{E}$  in (5.6) verschwindet, also keine Beschleunigung auf das Partikel wirkt. Somit vernachlässigen wir das Fernfeld in der Fundamentallösung. Es gilt zu beachten, dass wir in unserer Anwendung annehmen, dass

$$|\mathbf{R}|_2 \ll 1 \Rightarrow |\mathbf{R}|_2^2 \ll |\mathbf{R}|_2 \Rightarrow \frac{1}{|\mathbf{R}|_2} \ll \frac{1}{|\mathbf{R}|_2^2}.$$

- Wir vernachlässigen hierbei die retardierende Effekte und nehmen somit an, dass  $t_{ret} \approx t$ .

Die Lösungsformeln in (5.6) ergeben sich unter Berücksichtigung der Annahme 5.2.2 zu

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= \frac{q}{4\pi\epsilon} \frac{(1 - |\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t))|_2^2)}{|\mathbf{R}_v(t, \mathbf{p}(t))|_2^3} \mathbf{R}_v(t, \mathbf{p}(t)) \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= c\epsilon\mu \frac{\mathbf{R}(t)}{|\mathbf{R}(t)|_2} \times \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{U}(\mathbf{x}, t) &:= (\mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \mathbf{B}(\mathbf{x}, t))^\top. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Diese Form der  $\mathbf{E}$ - und  $\mathbf{B}$ -Felder wird als vereinfachte Lösung der Maxwell Gleichungen in unserer Programmierung verwendet.

**Bemerkung 5.2.3.** Eine ausführlichen Überblick über die Liénard-Wiechert Potential erhält man in [61, Kapitel 6].

**Bemerkung 5.2.4.** Die Kopplung der Maxwell Gleichungen und der Newton-Lorentz Gleichungen und das Einsetzen der Fundamentallösung in die relativistische Bewegungsgleichung führt zu den retardierten Bewegungsgleichungen. Berücksichtigt man für ein Bündel an Partikeln, dass die Kraft (die Kräfte sind additiv), die auf dem  $i$ -ten Partikel wirkt, einerseits aus der der eigenen Kraft besteht und andererseits aus der Krafteinwirkung der übrigen Partikel, gelangt man zu den retardierten Gleichungen, die in [100, Kapitel 11.1] dargestellt sind.

### 5.2.2. Umsetzung bei der Poisson-Gleichung.

Die Diskretisierung des Gebietes  $\Omega \subset \mathbb{R}^3$  erfolgt mittels Finiten Elementen und der Galerkin Methode. Unser Rechengebiet  $\Omega$  stellt hierbei einen Quader im dreidimensionalen Raum da. Das Gebiet  $\Omega$  sei in einem beliebigen Koordinatensystem  $\mathbf{X}$  in Koordinaten  $\mathbf{x}$  gegeben. Wir halten uns bei der Definition der Finiten Elemente an die Definition von Ciarlet [23, Kapitel 2.1]. Als eine gute Übersicht dient das Buch [33, Kapitel 1.2, 1.3]. Hierfür definieren wir eine Familie von Gittern  $\{\mathcal{Q}_h\}$  mit Gitterweite  $h > 0$ . Das Gitter  $\mathcal{Q}_h$  besteht aus finiten Elementen  $Q$  (Hexaeder) mit den Eigenschaften

- Die Menge  $\bar{\Omega}$  besteht aus einer endlichen Anzahl an Teilmengen  $Q$  mit

$$\bar{\Omega} := \bigcup_{Q \in \mathcal{Q}_h} Q.$$

- Für jedes  $Q \in \mathcal{Q}_h$  ist die Menge  $Q$  abgeschlossen und das Innere  $\text{int}(Q)$  ist nicht leer.
- Für  $Q_1, Q_2 \in \mathcal{Q}_h$  gilt,  $\text{int}(Q_1) \cap \text{int}(Q_2) = \emptyset$ .
- Für jedes  $Q \in \mathcal{Q}_h$  ist der Rand  $\partial Q$  Lipschitz-stetig.

Als weiterführende Literatur sei [18] erwähnt. Die Gitterweite wird definiert durch

$$h := \max_{Q \in \mathcal{Q}_h} h_Q \quad \text{mit} \quad h_Q := \text{diam}(Q),$$

wobei  $\text{diam}$  den Durchmesser von  $Q$  bezeichnet. Wir verwenden uniforme Hexaeder  $Q$  mit in jeder Raumdimension gleicher Gitterweite  $h$ . Die Anzahl der Gitterpunkte von  $\mathcal{Q}_h$  kennzeichnen wir mit  $n_s$  und die Knoten mit der globalen Nummerierung  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n_s}\}$ . Wir definieren die Anzahl der Randpunkte als  $n_b$  (mit  $n_b < n_s$ ) und benennen diese mit der globalen Nummerierung  $\{\mathbf{x}_1^b, \dots, \mathbf{x}_{n_b}^b\}$ , sodass  $\{\mathbf{x}_1^b, \dots, \mathbf{x}_{n_b}^b\} \subset \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n_s}\}$  ist.

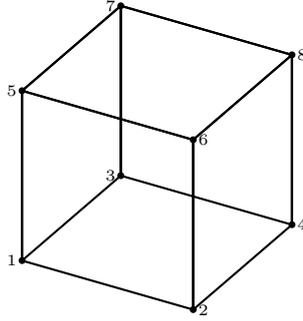


ABBILDUNG 5.1. Referenzelement und lokale Nummerierung.

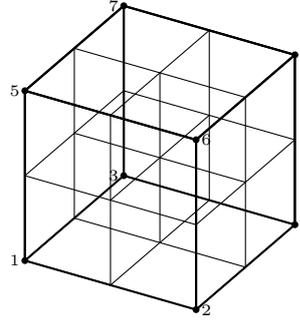


ABBILDUNG 5.2. Uniforme Diskretisierung mit Hexaedern.

Außerdem definieren wir den folgenden Testraum der stückweisen trilinearen Finite Elemente

$$V_h = \{v \in C(\bar{\Omega}) : v|_Q \in \mathbb{Q}_1, \forall Q \in \mathcal{Q}_h\} \quad (5.8)$$

wobei  $\mathbb{Q}_1$  den Polynomraum aller Polynome von maximalen Grad 1 in jeder Komponente bezeichnet. Des Weiteren führen wir die Notation  $V_h^0 := V_h \cap H_0^1(\Omega)$  ein, und  $V_h^\Gamma$  bezeichne den zu  $V_h$  dazugehörigen Spurraum.

Die Wahl der finiten Elemente fällt bei uns auf den mit am verbreitetsten Elemententyp in drei Raumdimension, den der hexahedralen Elemente. Eine ausführliche Betrachtung dieser Elemente findet sich im Buch [102, Kapitel 13.3] wieder. Die Nummerierung der acht Knoten eines Elementes  $Q$  ist in Abbildung 5.1 gegeben, wobei

$$\mathbf{x}_i^Q, i = 1, \dots, 8 \quad (5.9)$$

die lokale Nummerierung in Koordinatensystem  $\mathbf{X}$  und somit die einzelnen Knoten des Elementes  $Q$  darstellt.

Das Referenzelement  $\hat{\Omega}$ , das in Abbildung 5.1 zu finden ist, ist der Einheitswürfel mit den Koordinaten  $(-1, -1, -1)^\top$  für Knoten 1 und  $(1, 1, 1)^\top$  für Knoten 8, sodass  $(\zeta, \eta, \mu)^\top \in [-1, 1]^3 = \hat{\Omega}$  und  $\zeta_i, \eta_i, \mu_i \in \{-1, 1\}$ ,  $i = 1, \dots, 8$  sind. In Abbildung 5.2 ist eine uniforme Diskretisierung des Gebiets dargestellt. Da man mit dem Referenzelement rechnet, wird eine Koordinatentransformation der Punkte aus  $\Omega$  in die Konfiguration des Referenzelementes notwendig. Die Transformation von  $\mathbf{x} \in Q \subset \Omega$  ist gegeben durch

$$\begin{pmatrix} \zeta \\ \eta \\ \mu \end{pmatrix} = 2 \left( \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_1^Q}{h} \right) - 1.0 \in \hat{\Omega}.$$

Mit der Wahl von uniformen hexahedralen Elementen sind die Gitter auf der Oberfläche vorgegeben. Die nodale Basis ist in diesem Fall durch acht Basisfunktionen gegeben, die wir mit  $N_i^{\hat{\Omega}}$ ,  $i = 1, \dots, 8$ , bezeichnen. Man formuliert diese als

$$N_i^{\hat{\Omega}}(\zeta, \eta, \mu) = \frac{1}{8} (1 + \zeta \zeta_i) (1 + \eta \eta_i) (1 + \mu \mu_i), \quad i = 1, \dots, 8,$$

wobei

$$N_i^{\hat{\Omega}}(\zeta_j, \eta_j, \mu_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, 8$$

gilt ( $\delta_{ij}$  bezeichne das Kronecker-Delta). Sei  $\mathbf{v}_h^Q \in V_h$ , dann bezeichnen wir mit  $\mathbf{v} = (v_i)_{i=1}^{n_s} \in \mathbb{R}^{n_s}$  den Koeffizientenvektor zur Basis  $\{N_1, \dots, N_{n_s}\}$ , sodass  $\mathbf{v}_h^Q = \sum_{i=1}^{n_s} v_i N_i = \sum_{i=1}^8 v_i^Q N_i^{\hat{\Omega}}$  gilt.

Die Diskretisierung des Randes von  $\Omega$ , die Oberfläche  $\partial\Omega$  des Gebiets, nehmen wir wie folgt vor. Wir betrachten das Skelett

$$S := \bigcup_{\partial Q \in \bar{\Omega}} \partial Q$$

und definieren

$$\bar{\Gamma} := S \cap \partial\Omega.$$

Der Spurraum ist somit als  $V_h^\Gamma = \text{span}_{i=1, \dots, n_b} \{N_i|_\Gamma\}$  gegeben. Die Poisson Gleichung (4.27) sei in ihrer schwachen, diskreten Formulierung durch

$$(\nabla \eta_h, \nabla \varphi_h) = 0, \quad \eta_h|_\Gamma = u_h \quad \forall \varphi_h \in V_h^0 \quad (5.10)$$

gegeben. Da (5.10) eine Lösung besitzt, findet man ein  $\eta_h \in V_h \subset H^1(\Omega)$ , so dass (5.10) gilt. Hierbei sei  $V_h$  der finite Elemente Unterraum (5.8), der auf dem gleichmäßigen Hexaedergitter definiert ist. So lässt sich die variationelle Formulierung (5.10) mit Hilfe der trilinearen Elemente umschreiben zu

$$(\nabla \eta_h, \nabla \varphi_h) = 0, \quad \eta_h|_\Gamma = u_h \quad \forall \varphi_h \in V_h^0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{A}\boldsymbol{\eta} = \mathbf{v}^b. \quad (5.11)$$

Dies bedarf einiger Klärung. Die Werte der Poisson Lösung in den einzelnen Knoten sind im Vektor  $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{n_s}$  gegeben. Des Weiteren sind die Randwerte in den vektoriellen Größen  $\boldsymbol{\eta}^b = \mathbf{u}^b$  mit  $\boldsymbol{\eta}^b, \mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_b}$  befindlich. Die Matrix  $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_s}$  bezeichnet die Steifigkeitsmatrix, die von der folgenden Gestalt ist:

Die einzelnen Komponenten  $\mathcal{A}_{ij}$ ,  $i, j = 1, \dots, n_s$ , lassen sich in der nachfolgenden Art und Weise schreiben

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ij} &= \int_{\text{supp}(N_i) \cap \text{supp}(N_j)} \nabla N_i(\mathbf{x}) \cdot \nabla N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ &= \sum_{Q \subset \text{supp}(N_i) \cap \text{supp}(N_j)} \int_Q \nabla N_i(\mathbf{x}) \cdot \nabla N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad i, j = 1, \dots, n_s \end{aligned} \quad (5.12)$$

wobei gilt

$$\int_Q \nabla N_i(\mathbf{x}) \cdot \nabla N_j(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \frac{8}{h^3} \int_{\hat{\Omega}} \frac{h^2}{4} \nabla N_i^{\hat{\Omega}}(\zeta, \eta, \mu) \cdot \nabla N_j^{\hat{\Omega}}(\zeta, \eta, \mu) \, d\zeta \, d\eta \, d\mu.$$

Es sei angemerkt, dass sowohl die Funktionaldeterminante, die bei der Transformation des Gebietes entsteht, als auch die Terme, die durch die Ableitung der trilinearen Ansatzfunktionen entstehen, mitberücksichtigt wurden. In den Randpunkten werden die Einträge der Steifigkeitsmatrix  $\mathcal{A}_{ij}$  identisch 1 gesetzt und der Vektor  $\mathbf{v}^b \in \mathbb{R}^{n_b}$  ist gegeben durch

$$\mathbf{v}_i^b := \begin{cases} \frac{h}{2} u_i^b, & \mathbf{x}_i \in \{\mathbf{x}_1^b, \dots, \mathbf{x}_{n_b}^b\} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Zum Abschluss dieses Unterkapitels geben wir zusätzlich die Randmassenmatrix  $\mathcal{M}$  an, die wir in Kapitel 5.3.3 benötigen. Die Randmassenmatrix  $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b}$  ist durch folgende Komponenten gegeben

$$\mathcal{M}_{ij} := \int_{\text{supp}(N_i|_\Gamma) \cap \text{supp}(N_j|_\Gamma)} N_i|_\Gamma N_j|_\Gamma \, dS \quad i, j = 1, \dots, n_b \quad (5.13)$$

Man gelangt analog zu der Vorgehensweise wie bei der Steifigkeitsmatrix zu einer Darstellung über das Referenzgebiet.

### 5.2.3. Umsetzung bei den Newton-Lorentz-Gleichungen.

Wir werfen nun einen Blick auf die numerische Lösung der Bewegungsgleichung eines Partikels und die daraus resultierende Impulse und Positionen (wir nehmen der Übersichtlichkeit halber zunächst  $n_p = 1$  an). Wir werden hierfür zunächst uns die Newton Lorentz Bewegungsgleichungen (3.15) gegeben durch

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{p}}(t) &= q\left(\mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t)\right) & t \in [0, T] \\ \dot{\mathbf{r}}(t) &= \mathbf{v}(\mathbf{p}(t)) & t \in [0, T] \\ \mathbf{p}(0) &= \mathbf{p}_0, \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0\end{aligned}\quad (5.14)$$

anschauen, in denen die  $\mathbf{E}$ - und  $\mathbf{B}$ -Felder in der Position  $\mathbf{r}(t)$  des Partikels ausgewertet werden. Zum Abschluss dieses Kapitels werden wir auf die in unserer Arbeit betrachteten Newton-Lorentz-Formulierung (4.6) und deren Diskretisierung eingehen.

Als Lösungsverfahren von (5.14) sind Runge-Kutta Methoden (siehe z.B. [86, 87]) und das *Leapfrog* Schema (siehe [108, 13]) in der Literatur als klassische Zeit-Diskretisierungsschemata weit verbreitet. Wir haben für unsere Implementierung eine Variante des *Leapfrog* Schemas verwendet, dessen Form wir uns im Folgenden für (5.14) erarbeiten wollen und damit außerdem begründen wollen, weshalb wir das so entstehende Boris Schema in unseren Ausführungen als Zeitintegrationsschema implementieren. Wir werden damit beginnen das Zeitintervall äquidistant zu diskretisieren und die Form des Leapfrog Schemas für die Bewegungsgleichung aufzustellen. Zu einer überschaubaren Darstellung der nachfolgenden Schemata nehmen wir die Setzung

$$\tilde{\mathbf{p}}(t) := \frac{\mathbf{p}(t)}{m_0^q} \quad \text{für alle } t \in [0, T]. \quad (5.15)$$

vor, die auch in [17] verwendet wird.

#### Das implizite Leapfrog Schema

Wir wählen folgende äquidistante Zeitintervall Diskretisierung von  $[0, T]$

$$t_{-0.5} < t_0 = 0 < t_{0.5} < t_1 < \dots < t_{N-0.5} < t_N = T \quad \text{mit } \Delta t = \frac{t_N}{n_t - (N + 1)}, \quad (5.16)$$

wobei  $n_t = 2N + 1$  die Anzahl der Zeitschritte wiedergibt. Damit ist  $\Delta t = t_{j+1} - t_j$ ,  $\forall j = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ . Das Leapfrog Schema ist ein zentrales, implizites Finites-

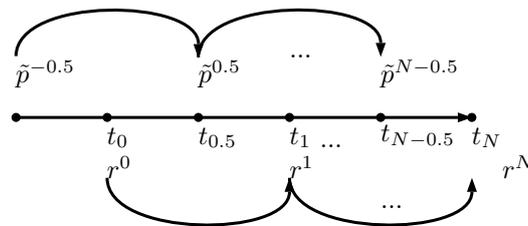


ABBILDUNG 5.3. Leapfrog Zeitschrittverfahren

Differenzen-Schema zweiter Ordnung (siehe [14, Kapitel 4.3/15.4] und [58, Kapitel

4.7]), und angewandt auf (5.14) erhält man

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} - \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= \frac{q}{m_0^q} \left( \mathbf{E}(\mathbf{r}^i) + \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} + \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}}{2\tilde{\gamma}^i c} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}^i) \right) & i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \\ \frac{\mathbf{r}^{i+1} - \mathbf{r}^i}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}}{\tilde{\gamma}^{i+\frac{1}{2}}} & i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \\ \tilde{\mathbf{p}}^{-\frac{1}{2}} &= \frac{\mathbf{p}_0}{m_0^q}, \quad \mathbf{r}^0 = \mathbf{r}_0.\end{aligned}\tag{5.17}$$

mit  $\tilde{\mathbf{p}}^{i-1/2} = \tilde{\gamma}^{i-1/2} \mathbf{v}^{i-1/2}$ ,  $\tilde{\gamma} = \sqrt{1 + \frac{|\tilde{\mathbf{p}}|_2^2}{c^2}}$  und  $\tilde{\gamma}^i = \frac{\gamma^{i-\frac{1}{2}} + \gamma^{i+\frac{1}{2}}}{2}$ ,  $i = 0, 1, \dots, N-1$ . Wir schreiben auch im Folgenden  $\mathbf{E}(\mathbf{r}^i)$ ,  $\mathbf{B}(\mathbf{r}^i)$  als  $\mathbf{E}^i$  bzw.  $\mathbf{B}^i$ . In Abbildung 5.3 ist der schematische Ablauf des Leapfrog Schemas (auch in der Literatur zu finden unter den Namen Störmer Verlet Verfahren [50]) dargestellt. Die EM-Felder diskretisieren wir hier ausschließlich nach der Zeit. Als weitere Literatur für den nicht relativistischen Fall sei hierzu [14, Kapitel 4] angegeben.

Aufgrund der impliziten Struktur des Schemas hat sich besonders eine Modifikation des Leapfrogs Schemas (5.17) als numerisch effizient und die Struktur der Lorentzkraft erhaltend bei der Berechnung der Partikelbahnen herausgestellt: Das in [17] beschriebene und später als *Boris Schema* (auch bekannt als Boris-Buneman Methode, Boris Leapfrog Methode) benannte explizite Verfahren. Diese Schema wird in unserer Implementierung das Schema der Wahl sein.

### Das explizite Boris Schema

Bei der Berechnung der Partikelbahnen in Beschleunigern mittels der relativistischen Newton-Lorentz Gleichung wird das Boris Schema aufgrund folgender Eigenschaften häufig verwendet [87, 108] und [14, Kapitel 15.4]:

- explizites Finites-Differenzen Verfahren von 2ter Ordnung,
- symplektisch und somit Energie erhaltend,
- Struktur der Lorentzkraft wird berücksichtigt.

Das explizite Verfahren zur Bestimmung der Position  $\mathbf{r}^{i+1}$ ,  $i = 0, 1, \dots, N-1$  ergibt sich durch folgende Vorschrift:

$$\tilde{\mathbf{p}}^- = \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q},\tag{5.18a}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}' = \tilde{\mathbf{p}}^- + \tilde{\mathbf{p}}^- \times \mathbf{s}^i,\tag{5.18b}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^+ = \tilde{\mathbf{p}}^- + \tilde{\mathbf{p}}' \times \frac{2\mathbf{s}^i}{1 + |\mathbf{s}^i|_2^2},\tag{5.18c}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} = \tilde{\mathbf{p}}^+ + \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q},\tag{5.18d}$$

$$\mathbf{r}^{i+1} = \mathbf{r}^i + \Delta t \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}}{\tilde{\gamma}^{i+\frac{1}{2}}}\tag{5.18e}$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{-\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{p}_0}{m_0^q}, \quad \mathbf{r}^0 = \mathbf{r}_0.\tag{5.18f}$$

und

$$\mathbf{s}^i = \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2} \tan\left(\frac{q\Delta t}{2m_0^q \tilde{\gamma} c} |\mathbf{B}^i|_2\right).\tag{5.19}$$

Man zerlegt somit sowohl die Beschleunigung des Partikels, die durch das  $\mathbf{E}$ -Feld zustande kommt, als auch die Drehung (Lorentzkraft), die das Partikel durch das

$\mathbf{B}$ -Feld erfährt, in jeweils zwei Schritte. In Formel (5.18a) wird zunächst die Beschleunigung über das Zeitintervall  $\frac{\Delta t}{2}$  ausgeführt, gefolgt von einer halben Rotation von  $\tilde{\mathbf{p}}^-$  um das Magnetfeld  $\mathbf{B}^i$  in (5.18b). Eine weitere halbe Rotation von  $\tilde{\mathbf{p}}'$  (5.18c) um das Magnetfeld und das Ausführen der verbliebenen Beschleunigung (5.18d) bestimmt die neue Geschwindigkeit  $\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}$  zum Zeitpunkt  $t_{i+\frac{1}{2}}$ . In der Literatur [72, Kapitel 2.3] wird

$$\Omega_L := \frac{q|\mathbf{B}^i|_2}{m_0^q}$$

als Larmorfrequenz bezeichnet. Des Weiteren vereinfacht man nach [17],

$$\tan\left(\frac{q\Delta t}{2m_0^q\tilde{\gamma}-c}|\mathbf{B}^i|_2\right) \approx \frac{q\Delta t}{2m_0^q\tilde{\gamma}-c}|\mathbf{B}^i|_2, \quad (5.20)$$

denn

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_L\Delta t}{\tilde{\gamma}-c} &\approx 2 \arctan\left(\frac{1}{2\tilde{\gamma}-c}\Omega_L\Delta t\right) \\ &= \frac{\Omega_L\Delta t}{\tilde{\gamma}-c}\left(1 - \frac{\Omega_L^2\Delta t^2}{12(\tilde{\gamma}-c)^2} + \mathcal{O}(\Delta t^3)\right). \end{aligned} \quad (5.21)$$

nach der Reihenentwicklung des Arkustangens. Das Boris Schema hat die selbe Konsistenzordnung wie das Leapfrog Schema (siehe Lemma 5.2.7). Durch die Vereinfachung von (5.20) verschlechtert sich die Ordnung des Verfahrens nicht, da nur Fehlerterme der Ordnung  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$  hinzukommen. Somit wird

$$\mathbf{s}^i = \frac{1}{2} \frac{\Omega_L\Delta t}{\tilde{\gamma}-c} \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2}. \quad (5.22)$$

(auch tan-Transformation genannt) in der Implementierung gesetzt. Weitere Vorteile, wie in [84] beschrieben, sind die sehr einfache Implementierung und, dass nur eine Auswertung der EM-Felder pro Zeitschritt anfällt (im Gegensatz zu Runge-Kutta Methoden). Der große Nachteil des Boris Schema ist der sehr kleine Stabilitätsbereich des Verfahrens, der in der Literatur [84] angegeben wird durch  $\Omega_L\Delta t \approx \mathcal{O}(1)$ . Der Boris Integrator ist wie erwähnt symplektisch. Der Beweis findet sich in [109] wieder.

Das Schema (5.18) wird Boris Schema genannt und kann mittels Vereinfachungen und einer geometrischen Argumentation aus dem Leapfrog Schema (5.17) hergeleitet werden. Dies wollen wir in Lemma 5.2.5 zeigen. Die Idee basiert auf der Arbeit [17] von J.P. Boris, und ist in [14, Kapitel 4] zu Teilen ausgeführt.

**Lemma 5.2.5.** *Das explizite Boris Schema (5.18) lässt sich aus dem impliziten Leapfrog Schema (5.17) herleiten.*

**Beweis.** Es gelte die erste Gleichung aus dem Leapfrog Schema (5.17). Wir definieren uns die Vektoren  $\tilde{\mathbf{p}}^-, \tilde{\mathbf{p}}^+ \in \mathbb{R}^3$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{p}}^- &:= \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta t\mathbf{E}(\mathbf{r}^i)}{2m_0^q}, \\ \tilde{\mathbf{p}}^+ &:= \tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} - \frac{q\Delta t\mathbf{E}(\mathbf{r}^i)}{2m_0^q} \end{aligned}$$

Einsetzen in die erste Gleichung von (5.17) ergibt

$$\frac{\tilde{\mathbf{p}}^+ - \tilde{\mathbf{p}}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2m_0^q\tilde{\gamma}^i c}(\tilde{\mathbf{p}}^+ + \tilde{\mathbf{p}}^-) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}^i) \quad i = 0, \dots, N-1, \quad (5.23)$$

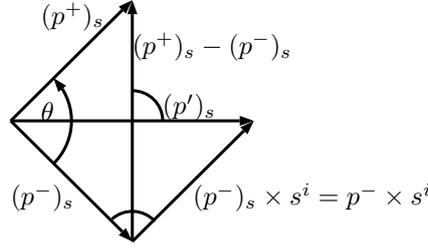


ABBILDUNG 5.4. In einer Ebene senkrecht zu  $\mathbf{B}^i \parallel \mathbf{s}^i$

wobei  $\mathbf{E}(\mathbf{r}^i)$  vollständig verschwindet. Skalare Multiplikation von (5.23) einerseits mit  $(\tilde{\mathbf{p}}^+ + \tilde{\mathbf{p}}^-)$  liefert

$$|\tilde{\mathbf{p}}^+|_2^2 = |\tilde{\mathbf{p}}^-|_2^2 \quad (5.24)$$

andererseits mit  $\mathbf{B}$  liefert

$$\tilde{\mathbf{p}}^+ \cdot \mathbf{B}^i = \tilde{\mathbf{p}}^- \cdot \mathbf{B}^i \Leftrightarrow (\tilde{\mathbf{p}}^+)_p = (\tilde{\mathbf{p}}^-)_p \quad (5.25)$$

und es gilt  $|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s|_2 = |(\tilde{\mathbf{p}}^+)_s|_2$ . Dabei bezeichnet ein Vektor  $(\mathbf{w})_p$  die zu  $\mathbf{B}^i$  parallele Komponente

$$(\mathbf{w})_p := \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2} \left( \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2} \cdot \mathbf{w} \right), \quad (\mathbf{w})_s := \mathbf{w} - (\mathbf{w})_p \quad (5.26)$$

und  $(\mathbf{w})_s$  die senkrechte Komponente zu  $\mathbf{B}^i$ . Es folgt somit aus (5.24) und (5.25), dass in (5.23) nur die Komponenten senkrecht zu  $\mathbf{B}^i$ , also  $(\tilde{\mathbf{p}}^+)_s$ ,  $(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s$ , verändert werden. Damit müssen wir uns nur auf den Fall, in dem die Vektoren in der senkrechten Ebene zu  $\mathbf{B}^i$  liegen, konzentrieren. Darüber hinaus folgt aus (5.25) und (5.26)

$$\tilde{\mathbf{p}}^+ - \tilde{\mathbf{p}}^- = (\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s. \quad (5.27)$$

Im Folgenden definiert man sich einen Vektor  $\tilde{\mathbf{p}}' \in \mathbb{R}^3$  gegeben durch

$$\tilde{\mathbf{p}}' := \tilde{\mathbf{p}}^- + \tilde{\mathbf{p}}^- \times \mathbf{s}^i, \quad (5.28)$$

mit  $\mathbf{s}^i \in \mathbb{R}^3$  und der die Eigenschaft

$$\tilde{\mathbf{p}}' \perp (\tilde{\mathbf{p}}^+ - \tilde{\mathbf{p}}^-) \quad (5.29)$$

erfüllen soll. Nach Gleichheit (5.27) ist (5.29) äquivalent zu

$$\tilde{\mathbf{p}}' \perp ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s). \quad (5.30)$$

und (5.28) impliziert nach (5.26)

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{p}}' &= (\tilde{\mathbf{p}}')_s + (\tilde{\mathbf{p}}')_p = (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s + (\tilde{\mathbf{p}}^-)_p + ((\tilde{\mathbf{p}}^-)_s + (\tilde{\mathbf{p}}^-)_p) \times \mathbf{s}^i, \\ &\Rightarrow (\tilde{\mathbf{p}}')_s = (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s + (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s \times \mathbf{s}^i. \end{aligned}$$

Man wählt im nächsten Schritt  $\mathbf{s}^i$  parallel zu  $\mathbf{B}^i$ . Nach [14, Kapitel 15] ist der Winkel  $\theta$  aus Abbildung 5.4 als  $\theta = 2 \arctan\left(\frac{\Omega_L \Delta t}{2\tilde{\gamma} - c}\right)$  und nach der Vereinfachung (5.20) als  $\theta \approx \frac{\Omega_L \Delta t}{\tilde{\gamma} - c}$  gegeben, dann gilt mit Abbildung 5.4 und  $|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s|_2 = |(\tilde{\mathbf{p}}^+)_s|_2$ , dass

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s \times \mathbf{s}^i|_2}{|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s|_2} = \frac{|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s|_2 |\mathbf{s}^i|_2}{|(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s|_2} \Rightarrow |\mathbf{s}^i|_2 = \tan\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (5.31)$$

Man beachte hierbei, dass  $(\tilde{\mathbf{p}}^-)_s$  senkrecht auf  $\mathbf{s}^i$  steht. Damit definiert man

$$\mathbf{s}^i := \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2} \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \approx \frac{1}{2} \frac{\Omega_L \Delta t}{\tilde{\gamma} - c} \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2} \quad (5.32)$$

Mit dieser Wahl von  $\mathbf{s}^i$  gilt somit

$$(\tilde{\mathbf{p}}')_s \perp ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s) \quad (5.33)$$

und wir können des Weiteren folgern

$$\begin{aligned} 0 &= (\tilde{\mathbf{p}}')_s \cdot ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s) = (\tilde{\mathbf{p}}' - (\tilde{\mathbf{p}}')_p) \cdot ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s) \\ &= \tilde{\mathbf{p}}' \cdot ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s) - \underbrace{(\tilde{\mathbf{p}}')_p \cdot ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s)}_{=0} \\ &= \tilde{\mathbf{p}}' \cdot ((\tilde{\mathbf{p}}^+)_s - (\tilde{\mathbf{p}}^-)_s), \end{aligned} \quad (5.34)$$

sodass  $(\tilde{\mathbf{p}}') \perp ((\tilde{\mathbf{p}}^+) - (\tilde{\mathbf{p}}^-))$ . Unter Verwendung von (5.27) gilt zudem  $(\tilde{\mathbf{p}}^+ - \tilde{\mathbf{p}}^-) \perp \mathbf{B}^i$ . Daraus folgt, dass  $(\tilde{\mathbf{p}}^+ - \tilde{\mathbf{p}}^-)$  parallel zu  $(\tilde{\mathbf{p}}') \times \mathbf{B}^i$  ist und somit existiert ein Vektor  $\mathbf{t}^i \in \mathbb{R}^3$  mit

$$\tilde{\mathbf{p}}^+ = \tilde{\mathbf{p}}^- + (\tilde{\mathbf{p}}') \times \mathbf{t}^i. \quad (5.35)$$

Die Form von  $\mathbf{t}^i$  bestimmt man mit (5.24) und nach [14, Kapitel 15.4] folgt

$$\mathbf{t}^i = \frac{2\mathbf{s}^i}{1 + |\mathbf{s}^i|_2^2}.$$

Die zweite Bestimmungsgleichung für die Position von (5.17) entspricht (5.18e). Damit haben wir das Boris Schema (5.18) mit Gleichung (5.22) aus dem Leapfrog Schema entwickelt.  $\square$

**Bemerkung 5.2.6.** *Die Explizitat des Schemas verdanken wir (5.35).*

Wir schreiben das Boris Schema (5.18) in kompakter Form als

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} - \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}}{\Delta t} &= f_1^{Bo}(\mathbf{U}^i, \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}) \quad i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \\ \frac{\mathbf{r}^{i+1} - \mathbf{r}^i}{\Delta t} &= f_2^{Bo}(\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N-1 \\ \tilde{\mathbf{p}}^{-\frac{1}{2}} &= \frac{\mathbf{p}_0}{m_0^q}, \quad \mathbf{r}^0 = \mathbf{r}_0. \end{aligned} \quad (5.36)$$

mit

$$\begin{aligned} f_1^{Bo}(\mathbf{U}^i, \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}) &:= \left( \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q} + \left( \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q} \right) \times \frac{2\mathbf{s}^i}{1 + |\mathbf{s}^i|_2^2} \right. \\ &\quad \left. + \left( \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}} + \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q} \right) \times \mathbf{s}^i \times \frac{2\mathbf{s}^i}{1 + |\mathbf{s}^i|_2^2} \right) + \frac{q\Delta t \mathbf{E}^i}{2m_0^q}, \\ f_2^{Bo}(\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}) &:= \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}}}{\tilde{\gamma}^{i+\frac{1}{2}}} \\ \mathbf{U}^i &= (\mathbf{E}^i, \mathbf{B}^i)^\top, \quad \mathbf{s}^i = \frac{1}{2} \frac{\Omega_L \Delta t}{\tilde{\gamma}^{-c}} \frac{\mathbf{B}^i}{|\mathbf{B}^i|_2}. \end{aligned}$$

Wir verwenden hierbei die Notation  $\mathbf{U}$  aus (5.7) fur die EM-Felder. Widmet man sich genauer der Konsistenzordnung und dem Stabilitatsbereich von (5.18), so ergeben sich folgende Abschatzungen fur das Boris Schema. Betrachtet man sich den lokalen Diskretisierungsfehler  $\tau^i, i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ , so erhalt man

**Lemma 5.2.7.** *Das Boris Schema (5.36) ist von 2ter Konsistenzordnung.*

**Beweis.** Sei  $i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$  beliebig. Wendet man die Taylor Entwicklung fur Positions- und Impulsgleichung in (5.17) um den Punkt  $t_{i+\frac{1}{2}}$  und  $t_i$  an, so ergibt

sich

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t_{i+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}) &= \mathbf{r}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t}{2} \dot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t^2}{4} \ddot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t^3}{12} \mathbf{r}^{(3)}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ \mathbf{r}(t_{i+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2}) &= \mathbf{r}(t_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t}{2} \dot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t^2}{4} \ddot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{\Delta t^3}{12} \mathbf{r}^{(3)}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ \tilde{\mathbf{p}}(t_i + \frac{\Delta t}{2}) &= \tilde{\mathbf{p}}(t_i) + \frac{\Delta t}{2} \dot{\tilde{\mathbf{p}}}(t_i) + \frac{\Delta t^2}{4} \ddot{\tilde{\mathbf{p}}}(t_i) + \frac{\Delta t^3}{12} \tilde{\mathbf{p}}^{(3)}(t_i) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \\ \tilde{\mathbf{p}}(t_i - \frac{\Delta t}{2}) &= \tilde{\mathbf{p}}(t_i) - \frac{\Delta t}{2} \dot{\tilde{\mathbf{p}}}(t_i) + \frac{\Delta t^2}{4} \ddot{\tilde{\mathbf{p}}}(t_i) - \frac{\Delta t^3}{12} \tilde{\mathbf{p}}^{(3)}(t_i) + \mathcal{O}(\Delta t^4). \end{aligned}$$

Nach Einsetzen in die Gleichung für die Trajektorie in (5.17) resultiert daraus unter Berücksichtigung der ODE (5.14)

$$\Delta t \dot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{\Delta t^3}{6} \mathbf{r}^{(3)}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta t^4) = +\Delta t \frac{\tilde{\mathbf{p}}(t_{i+\frac{1}{2}})}{\gamma(t_{i+\frac{1}{2}})} + \mathcal{O}(\Delta t^4) - \tau_r^{i+\frac{1}{2}}$$

$$\Leftrightarrow \tau_r^{i+\frac{1}{2}} = \left| -\frac{\Delta t^3}{6} \mathbf{r}^{(3)}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \right|_2,$$

da  $\dot{\mathbf{r}}(t_{i+\frac{1}{2}}) = \mathbf{v}(\mathbf{p}(t_{i+\frac{1}{2}})) = \frac{\tilde{\mathbf{p}}(t_{i+\frac{1}{2}})}{\gamma(t_{i+\frac{1}{2}})}$ . Für die Impulsgleichung in (5.17) gilt

$$\Delta t \dot{\tilde{\mathbf{p}}}(t_i) + \frac{\Delta t^3}{6} \tilde{\mathbf{p}}^{(3)}(t_i) + \mathcal{O}(\Delta t^4) = +\Delta t \frac{q}{m_0^q} \left( \mathbf{E}^i + \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{i+\frac{1}{2}} + \tilde{\mathbf{p}}^{i-\frac{1}{2}}}{2\tilde{\gamma}^i c} \times \mathbf{B}^i \right) - \tau_{\tilde{\mathbf{p}}}^i.$$

Mit (5.14) folgt

$$\tau_{\tilde{\mathbf{p}}}^i = \left| -\frac{\Delta t^3}{6} \tilde{\mathbf{p}}^{(3)}(t_i) + \mathcal{O}(\Delta t^4) \right|_2,$$

so dass die Konsistenzordnung des lokalen Diskretisierungsfehlers  $\tau^i$  von Ordnung  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$  für das Leapfrog Schema (5.17) ist. Somit stellt das Leapfrog Schema ein Verfahren zweiter Konsistenzordnung dar. Da die Methode von Boris nur in (5.20) Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$  und höher nach (5.21) nicht berücksichtigt, hat diese Annahme somit keinen Einfluss auf die Ordnung des Verfahrens. Damit folgt, dass das Boris Verfahren (5.36) ebenso von 2ter Konsistenzordnung ist.  $\square$

**Bemerkung 5.2.8.** Um die Stabilität von (5.18) garantieren zu können, kann man folgende Stabilitätsbedingung herleiten: Das Boris Verfahren (5.36) ist für  $\frac{\Omega_L \Delta t}{\gamma c} < 1$  stabil. Man betrachte die Ausführungen in [14, Kapitel 15.4] und [107].

**Bemerkung 5.2.9.** Als eine Alternative zum obigen Boris Integrationsschema gibt es Abwandlungen des Boris Integrator (Leapfrog Integrator zweiter Ordnung), so z.B. den Vay Integrator, welcher in [107] beschrieben wird.

Dieses eingeführte explizite Zeitschrittverfahren werden wir nun für die Diskretisierung von (5.2) nutzen.

### Diskretisierung der vorliegenden Newton Lorentz Gleichungen

Im nun Folgenden wird die konkrete Diskretisierung von (5.2) der Newton Lorentz Gleichungen aus Optimierungsproblem ( $P_M$ ) angeben. Zunächst möchten wir darauf hinweisen, dass die rechte Seite der reduzierten Formulierung (5.2) nicht die relativistischen Newton-Lorentz Gleichung (5.14), bestehend aus

$$[\dot{\mathbf{p}}(t), \dot{\mathbf{r}}(t)]^\top = [q(\mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t)), \mathbf{v}(\mathbf{p}(t))]^\top \quad \forall t \in [0, T],$$

beinhaltet, sondern aufgrund des verwendeten Abraham Modells (4.2) aus den Gleichungen (4.6) besteht, die diskretisiert werden. Der Zustandssystem Operator  $\mathbf{e}$ , der

in (5.2) definiert wird, findet sich in seiner diskreten Variante in (5.37a) – (5.37c) des diskreten Zustandssystems (5.37) wieder.

$$\frac{\tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i} - \tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}}{\Delta t} = \tilde{f}_1^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), \quad j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p, \quad (5.37a)$$

$$\frac{\mathbf{r}^{j+1,i} - \mathbf{r}^{j,i}}{\Delta t} = \tilde{f}_2^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), \quad j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p, \quad (5.37b)$$

$$\tilde{\mathbf{p}}^{-\frac{1}{2},i} = \frac{\mathbf{p}_0^i}{m_0^q}, \quad \mathbf{r}^{0,i} = \mathbf{r}_0^i, \quad i = 1, \dots, n_p. \quad (5.37c)$$

Wir verwenden hierbei wieder die Notation aus (5.36) und die Definition (5.15). Der Index  $i$  steht hierbei für das  $i$ -te Partikel und der Index  $j$  für die Zeitdiskretisierung aus (5.16). Damit bezeichnet  $\tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}$  den Impuls des  $i$ -ten Partikel zum Zeitpunkt  $t_{j+\frac{1}{2}}$ . Der Vektor  $\mathbf{r}^{j+1,i}$  gibt die Position des  $i$ -ten Partikel zum Zeitpunkt  $t_j$  an und  $\boldsymbol{\eta}$  benennt die Lösung der Poisson Gleichung aus (5.11). Die genau Form der rechten Seiten  $\tilde{f}_1^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta})$  und  $\tilde{f}_2^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta})$  wird in Formel (5.40) angegeben.

Zur numerischen Berechnung der Integrale in (5.2) benutzen wir die Quadraturformel von Simpson [32, Kapitel 5] und nutzen die polynomiale Form der ausgeschmierten Deltafunktion, sodass sich eine gewichtete Simpson Regel mit  $\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r})$  und  $\nabla\varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \times \boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})$  ergibt. Man berechnet auf Basis von (5.4), die in (5.37a) vorhandenen Integrale über  $\varphi$  und  $\nabla\varphi$  exakt und benötigt somit keine Approximation. Dies führen wir kurz an einem Beispiel aus. Seien in unserem Koordinatensystem  $\mathbf{X}$  die einzelnen Komponenten als  $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3) \in \mathbf{X}$  gegeben. Man betrachtet sich einen Quader  $Q \in \mathcal{Q}_h$ . Des Weiteren definieren wir uns folgende Auswertungsstellen  $\tilde{\mathbf{x}}_i \in \mathbb{R}^3, i = 0, 1, 2$ , im Quader  $Q$  mit lokalen Knoten  $\mathbf{x}_i^Q, i = 1, \dots, 8$ ,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{x}}_0^1 &:= (x_1^Q)^1, \quad \tilde{\mathbf{x}}_1^1 := \frac{(x_1^Q)^1 + (x_2^Q)^1}{2}, \quad \tilde{\mathbf{x}}_2^1 := (x_2^Q)^1, \quad \text{in Richtung } x^1 \\ \tilde{\mathbf{x}}_0^2 &:= (x_1^Q)^2, \quad \tilde{\mathbf{x}}_1^2 := \frac{(x_1^Q)^2 + (x_3^Q)^2}{2}, \quad \tilde{\mathbf{x}}_2^2 := (x_3^Q)^2, \quad \text{in Richtung } x^2 \\ \tilde{\mathbf{x}}_0^3 &:= (x_1^Q)^3, \quad \tilde{\mathbf{x}}_1^3 := \frac{(x_1^Q)^3 + (x_5^Q)^3}{2}, \quad \tilde{\mathbf{x}}_2^3 := (x_5^Q)^3, \quad \text{in Richtung } x^3. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Dann lässt sich das Integral  $\int_Q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \mathbf{w}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$  mit der Simpson Regel und den Auswertungsstellen (5.38) approximieren, wobei  $\mathbf{w} : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  eine vorgegebene Funktion ist, als

$$\int_Q \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \mathbf{w}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \approx \sum_{m,n,l=0}^2 \mathbf{w}(\tilde{\mathbf{x}}_m^1, \tilde{\mathbf{x}}_n^2, \tilde{\mathbf{x}}_l^3) \int_Q l_{m,n,l}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{r}) d\mathbf{x}. \quad (5.39)$$

Dabei ist  $l_{m,n,l}(\mathbf{x}) = l_m(x^1)l_n(x^2)l_l(x^3)$ ,  $m, n, l = 0, 1, 2$  mit den einzelnen Lagrange Polynomen  $l_k(x^o), k \in \{m, n, l\}, o \in \{1, 2, 3\}$  gegeben und  $\varphi$  ist nach (5.3) zu verstehen.

Unter Berücksichtigung von (5.39) erhält man unter Verwendung des expliziten Boris Schemas und dessen Vorschrift, welche in (5.36) aufgeschrieben wurde, als

Diskretisierung der rechten Seite von (5.37) folgenden Ausdruck

$$\begin{aligned}
& \tilde{f}_1^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}) \\
&= \sum_{\substack{Q \in \mathcal{Q}_h \\ Q \subset \text{supp}(\varphi(\mathbf{x}-\mathbf{r}^{j,i}))}} \sum_{\substack{m,n,j=0 \\ k=1}}^2 \sum_{n_p} f_1^{Bo^k}((\mathbf{U}(\tilde{x}_m^1, \tilde{x}_n^2, \tilde{x}_l^3))^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}) \int_Q l_{m,n,l}(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}-\mathbf{r}^{j,i}) d\mathbf{x} \\
&\quad - \frac{q}{m_0^q} \sum_{\substack{Q \in \mathcal{Q}_h \\ Q \subset \text{supp}(\varphi(\mathbf{x}-\mathbf{r}^{j,i}))}} \sum_{m,n,l=0}^2 \eta_{m,n,l}^Q \left( \int_Q l_{m,n,l}(\mathbf{x}) \nabla \varphi(\mathbf{x}-\mathbf{r}^{j,i}) d\mathbf{x} \times \boldsymbol{\beta}(\tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i}) \right) \\
& \tilde{f}_2^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}) = f_2^{Bo}(\tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}) = \frac{\tilde{\mathbf{p}}^{j+\frac{1}{2},i}}{\gamma^{j+\frac{1}{2},i}},
\end{aligned} \tag{5.40}$$

Dabei beschreibt  $\eta_{m,n,l}^Q$ ,  $m, n, l \in \{0, 1, 2\}$  die Auswertungsstellen im Sinne von (5.38) der  $\eta$ , die im Quader  $Q$  liegen. Mit Gleichungen (5.40) ist das diskrete Zustandssystem (5.37) vollständig beschrieben. Man beachte, dass wir hierbei über die Anzahl  $n_p$  der im System vorhandenen Partikel aufsummieren müssen um die sich ergebenden Kräfte der einzelnen Partikel aufzuaddieren.

### Vermeidung von Auslöschungseffekten

Des Weiteren werden wir im Folgenden kurz auf die auftretenden numerischen Auslöschungen eingehen. Wenden wir uns noch einmal dem Boris Schema aus Kapitel 5.2.3 zu und führen eine Enddimensionalisierung von diesem numerischen Schema durch. Die Entscheidung für diesen Schritt ist wie folgt begründet:

Betrachtet man sich die in Tabelle 5.2 beschriebenen Konstanten und deren Dimensionen, so liegt die Enddimensionalisierung des Boris Schemas (5.37a), (5.37b) und (5.37c) auf der Hand. Hierbei seien nur die Masse eines Elektrons  $\approx 9 \cdot 10^{-31}$  kg und die Lichtgeschwindigkeit  $\approx 3 \cdot 10^8$   $ms^{-1}$  erwähnt, sodass man Unterschiede in der Größenordnung von  $\approx 10^{39}$  verzeichnen kann. Zur Enddimensionalisierung schreiben wir den Impuls  $\mathbf{p}$  des Partikels mittels zweier Komponenten  $p_c \in \mathbb{R}$ ,  $\mathbf{p}_d \in \mathbb{R}^3$ , sodass die folgende Transformation

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}(t) &:= p_c \mathbf{p}_d(t), \\
p_c &:= c
\end{aligned}$$

gilt und sich der Lorentzfaktor als  $\tilde{\gamma}_d(\mathbf{p}_d) := \sqrt{1 + |\mathbf{p}_d|_2^2}$  schreiben lässt. Die Newton Lorentz Gleichungen (5.14) ergeben sich mittels der obigen Transformation zu

$$\begin{aligned}
p_c \frac{d\mathbf{p}_d}{dt} &= q \left( \mathbf{E}(\mathbf{r}(t), t) + \boldsymbol{\beta}(p_c \mathbf{p}_d(t)) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}(t), t) \right) & t \in [0, T], \\
\frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \mathbf{v}(p_c \mathbf{p}_d(t)) & t \in [0, T], \\
\mathbf{p}_d(0) &= \mathbf{p}_0, \quad \mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0
\end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung der Struktur der rechten Seite, bei der der Impuls nur nichtlinear im Term  $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p})$  eingeht, ist die Form des Lorentzfaktors die bestimmende Größe bei der Setzung des Enddimensionalisierungsfaktors. Durch die Setzung  $p_c := c$  ist der Bruch, der im Lorentzfaktor entsteht,  $\frac{p_c^2}{c^2} = 1$  und es gilt  $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{p}(t)) = \boldsymbol{\beta}(p_c \mathbf{p}_d(t)) = \frac{\mathbf{p}_d(t)}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}_d(t)|_2^2}} = \frac{\mathbf{p}_d(t)}{\tilde{\gamma}_d(\mathbf{p}_d(t))} =: \boldsymbol{\beta}_d(\mathbf{p}_d(t))$ . Wendet man die Notation auf das Boris Schema (5.18) an, ist es nun möglich, den Term  $\Delta t p_c \approx 10^{-4}$  vorab zu berechnen und somit ergibt sich das diskrete Boris Schema (5.37a) und

(5.37b) zu

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{p}}_d^{j+\frac{1}{2},i} &= \tilde{\mathbf{p}}_d^{j-\frac{1}{2},i} + \tilde{f}_1^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}_d^{j-\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), & j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p, \\ \mathbf{r}^{j+1,i} &= \mathbf{r}^{j,i} + \Delta t p_c \tilde{f}_2^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}_d^{j+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), & j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p.\end{aligned}\tag{5.41}$$

Damit entfällt das Neuberechnen der Multiplikationen von  $\frac{|\tilde{\mathbf{p}}_d|^2}{c^2}$  in den Termen von  $\tilde{f}_1^d$  und  $\tilde{f}_2^d$  in jedem Zeitschritt. Die Dimension der Position der Partikel (in der Regel bei uns  $\mathbf{r}^{j,i} \approx 10^{-4}$ ) wird hierbei nicht verändert.

### Transformation des Integrals

Darüber hinaus wurde in Kapitel 5.2 die ausgeschmierte, polynomiale Delta Funktion (5.4) definiert, wobei das Gebiet des Trägers mit  $H_\epsilon$  gekennzeichnet wurde. Basierend auf der Form von (5.4) und dem sehr kleinen *support* (häufig kleiner als  $\approx 10^{-3}$  in jede Raumrichtung) wird der Gradient  $\nabla\varphi$ , aufgrund der Normalisierung von  $\varphi$ , sehr groß. Daher ist eine lineare Transformation der Integralausdrücke, in denen sowohl  $\varphi$  als auch  $\nabla\varphi$  auftreten, als sinnvoll. Wir setzen daher  $\tilde{\mathbf{x}} := (\epsilon_x^{-1}x_1, \epsilon_y^{-1}x_2, \epsilon_z^{-1}x_3)^\top$  und mit  $\epsilon := (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)^\top$  erhalten wir die Transformationen

$$\begin{aligned}\int_{H_\epsilon} \varphi_\epsilon(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \epsilon_x \epsilon_y \epsilon_z \int_{H_1} \varphi_\epsilon(\epsilon * \tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} = \int_{H_1} \varphi_1(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}}, \\ \int_{H_\epsilon} \nabla\varphi_\epsilon(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \epsilon_x \epsilon_y \epsilon_z \int_{H_1} \nabla\varphi_\epsilon(\epsilon * \tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} = \epsilon^{-1} * \int_{H_1} \nabla\varphi_1(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}},\end{aligned}$$

mit dem Gebiet  $H_1 := [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ . Hierbei kennzeichnet  $*$  das Hadamard Produkt. Berücksichtigt man, dass der Definitionsbereich der ausgeschmierte Delta Distribution um die Position  $\mathbf{r}$  verschoben ist, multipliziert man aufgrund obiger Transformation ein  $\epsilon^{-1} * \mathbf{r}$ . Unter Anwendung obiger Transformation auf die Integrale der rechten Seite  $\tilde{f}_1$  lassen sich somit numerische Auslöschungseffekte aufgrund starker Steigungen (im Fall von  $|\epsilon|_2 \sim 1 \cdot 10^{-3}$  ist der Gradient von Größenordnung  $|\nabla\varphi_\epsilon|_2 \sim 1 \cdot 10^6$ ) vermeiden.

Nachdem wir uns im nun zurückliegenden Kapitel mit der Diskretisierung der einzelnen Komponenten des Zustandssystems beschäftigt haben, werden wir im folgenden Kapitel auf die Diskretisierung und die Implementierung des Optimalsteuerproblems (P) eingehen.

### 5.3. Beschreibung des Optimierungsalgorithmus.

In diesem Abschnitt werden wir den von uns implementierten Optimierungsalgorithmus vorstellen. Dessen Darstellung findet sich in Kapitel 5.3.4 wieder. Der Algorithmus basiert auf einem globalisierten Quasi-Newton-Innere-Punkte-Verfahren. Die Approximation der Hessematrix wird mittels BFGS- Updateformel realisiert. Der Optimierungsalgorithmus verwendet hierbei die auf die Steuerung  $u$  reduzierte Formulierung. Man beachte, dass die Randsteuerung  $u$  zweidimensional ist, sodass ihr Träger sich auf den Rand  $\Gamma$  beschränkt und nicht auf das ganze Gebiet  $\Omega$ . In den kommenden Kapiteln (Kapitel 5.3.1-5.3.4) werden wir näher auf die Besonderheiten des Algorithmus eingehen. In Kapitel 5.3.1 beschäftigen wir uns mit den Zustandsbeschränkungen unseres Optimalsteuerproblems. Darüber hinaus blicken wir in Kapitel 5.3.2 auf die Möglichkeiten der Findung von numerischen Lösungen. Im nachfolgenden Kapitel 5.3.3 stellen wir das konkrete diskretisierte Optimierungsproblem dar. Des Weiteren sei angemerkt, dass wir aufgrund der Verwendung einer BFGS-Updateformel keine zweiten Ableitungsinformationen benötigen. Dennoch sei darauf hingewiesen, dass wegen der auftretenden nichtlinearen Terme in

der reduzierten Form  $e$ , die Ableitungen teilweise schwer zu berechnen sind. Als Hilfsmittel werden wir deshalb Automatisches Differenzieren (AD) benutzen, welches exakte Ableitungen berechnet und im Kontext der Optimalensteuerung sich als sinnvolles und nützliches Tool erweist. In Kapitel 5.4 werden wir die Gelegenheit nutzen, die Methode ausführlich zu betrachten. Vor allem soll die Art und Weise, wie der von AD generierte Code in die bestehende Implementierung integriert werden kann, beleuchtet werden. Zunächst schreiben wir das zustandsbeschränkte Optimalsteuerproblem (P) mithilfe eines log-Barriereterms um.

### 5.3.1. Behandlung der Zustandsbeschränkungen durch eine Barriere-Methode.

Eine wesentliche Komponente des Optimalsteuerproblems (P) ist die punktweise Zustandsbeschränkung an die Position des Partikels. Um das Verbleiben des Partikels im Gebiet  $\tilde{\Omega}$  sicherzustellen, verfolgen wir den Ansatz, das Optimierungsproblem mittels eines primalen Inneren-Punkte-Verfahrens zu implementieren. Wir verwenden hierzu einen log-Barriere-term und einen Homotopie Parameter  $\mu^H$ , dessen Update wir im Folgendem näher beschreiben werden. Man definiert sich die Barriere Funktion von Ordnung 1 und  $l(z, \mu^H) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$  mit beliebig aber festen  $\mu^H > 0$  durch

$$l(z, \mu^H) := \begin{cases} -\mu^H \ln(z), & z \in [0, +\infty[ \\ +\infty, & z \leq 0. \end{cases}$$

Damit lässt sich das Barrierefunktional  $b_l(\mathbf{g}(\mathbf{r}), \mu^H)$  um die Zustandsbeschränkungen  $\mathbf{r}(t) \in \tilde{\Omega}$  bzw.  $g_i(\mathbf{r}(t)) \leq 0$ ,  $i = 1, \dots, m$ , die in Annahme 4.2.17 definiert werden, im Zielfunktional schreiben als

$$b_l(\cdot, \mu^H) : C^1(\mathbb{R}^3) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$$

$$\mathbf{r} \mapsto \sum_{i=1}^m \int_0^T l(-g_i(\mathbf{r}(t)), \mu^H) dt.$$

Das Optimalsteuerproblem (P) lässt sich nun mittels der Barriere Regularisierung und Homotopie Parameter  $\mu^H \in \mathbb{R}^+$  formulieren als

$$\begin{aligned} \min \quad & \mathcal{J}(\mathbf{r}, u) + b_l(\mathbf{g}(\mathbf{r}), \mu^H) := \tilde{\mathcal{J}}(\mathbf{r}, u) \\ \text{s.t.} \quad & (\mathbf{r}, \mathbf{p}) \in Y, u \in U \\ & \mathbf{e}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, u)(t) = 0 \quad \forall t \in [0, T], \end{aligned} \tag{P_b}$$

Falls  $\mathbf{r}(t) \notin \tilde{\Omega}$ , dann gilt  $b_l(\mathbf{g}(\mathbf{r}), \mu^H) = +\infty$ . In den *Papern* [94, 93] von A. Schiela findet man eine Diskussion und Behandlung des Innere-Punkte-Verfahren in Funktionenräumen für eindimensionale Probleme mit dem Fokus auf deren Konvergenz. Eine Updatestrategie für den Homotopie Parameter für Innere-Punkte-Verfahren im Funktionenraum mit Zustandsschranken ist in [95] gegeben.

Des Weiteren befassen wir uns mit dem Ansatz, der der numerischen Umsetzung des Optimalsteuerproblems zugrunde liegt, dem sogenannten "*first-discretize-then-optimize approach*".

### 5.3.2. Behandlung des Optimalsteuerproblems.

Im Wesentlichen unterscheidet man, bei der Behandlung von Optimierungsproblemen im Funktionenraum und deren numerischen Umsetzung und Lösung zwei unterschiedliche Strategien. Der Ansatz *first optimize, then discretize*, stellt zu dem

gegebenen Optimalsteuerproblem (P) die Optimalitätsbedingungen (4.68) im Funktionenraum auf. Der Grundgedanke ist der, das Optimierungsproblem im Funktionenraum zu betrachten und hierauf wohl bekannte Algorithmen aus der endlichdimensionalen Optimierung wie Gradienten Verfahren, SQP Verfahren oder Penalty Verfahren an die Banachraumstrukturen anzupassen und die so modifizierten Methoden auf die unendlichdimensionalen Optimalsteuerprobleme anzuwenden. So wird z.B. in [16] das aus der Maxwell Gleichung entstehende Optimalitätssystem mit einem *semismooth* Newton Algorithmus im Funktionenraum gelöst. Die entwickelten Algorithmen lösen das oben angegebene KKT System (4.68). Das entstandene Optimalitätssystem (4.68) wird bei dieser Strategie diskretisiert und anschließend numerisch gelöst.

Während im Buch [38, Kapitel 8] von Matthias Gerds ein Blick auf die Funktionenraum Methoden für Optimalsteuerprobleme mit gewöhnlichen Differentialgleichungen in den Nebenbedingungen geworfen wird, befassen sich die Bücher [104, Kapitel 2.12, 3.7, 4.11, 5.9] und [56, Kapitel 2, 3] mit Optimierungsalgorithmen im Funktionenraum für partielle Differentialgleichungen. Der Funktionenraum Ansatz ist sehr beliebt, da die Algorithmen in den Funktionenräumen arbeiten, in denen die Optimalsteuerprobleme formuliert sind, sodass an dieser Stelle kein Diskretisierungsfehler gemacht wird. Außerdem wird hierbei die Struktur der Optimierungsprobleme sehr stark ausgenutzt. Die Diskretisierung spielt dann erst eine Rolle bei der numerischen Umsetzung der entwickelten Algorithmen. Bei der Diskretisierung der Adjungierten hat man in diesem Fall die Freiheit einen passenden Diskretisierungsansatz zu wählen.

Im Gegensatz hierzu steht der Ansatz *first discretize, then optimize*. Bei dieser Strategie diskretisiert man das Optimalsteuerproblem ( $P_b$ ) direkt und ersetzt alle auftretenden Funktionenräume durch endlich dimensionale Räume (so z.B.  $U$  durch  $U_d \subset U$  durch eine konforme Diskretisierung (siehe z.B. [23, Kapitel 3]) und Kapitel 5.2.2) und alle vorhandenen Operatoren durch passende diskrete Approximationen. Wir schreiben das diskrete Optimierungsproblem in folgender kompakter Form auf

$$\begin{aligned} \min \quad & \tilde{\mathcal{J}}_d(\mathbf{r}_d, u_d) \\ \text{s.t.} \quad & (\mathbf{r}_d, \mathbf{p}_d) \in Y_d, u_d \in U_d, \\ & \mathbf{e}_d(\mathbf{r}_d, \mathbf{p}_d, u_d) = 0 \end{aligned} \quad (P_d)$$

mit  $\mathcal{J}_d : Y_d \times U_d \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\mathbf{e}_d : Y_d \times U_d \rightarrow Z$ , wobei  $d$  den Diskretisierungsparameter bezeichnen soll, der sowohl für die Zeitdiskretisierung als auch für die Raumdiskretisierung in dieser Form verwendet werden soll. Die Zustandsbeschränkung  $\mathbf{g}_d : Y_d \rightarrow R$ ,  $\mathbf{g}_d(\mathbf{r}_d) \leq 0$  findet sich, wie in Kapitel 5.3.1 beschrieben, in der Zielfunktion als Teil des Barriereterms wieder. Dabei bezeichnet  $\mathbf{e}_d(\cdot)$  ein Schema zur numerischen Lösung der Newton-Lorentz Gleichungen. In Kapitel 5.2.3 beschäftigen wir uns mit der Diskretisierung der Newton-Lorentz Gleichungen und haben eine Abwandlung des *Leapfrog* Schemas kennengelernt, das sich in der Plasma Physik und besonders im Zusammenhang mit Teilchenbeschleunigern und sogenannten *particle-in-cell-methods* als sehr bewährt erwiesen hat (siehe hierzu [106, 108]). Man erhält durch diese Setzung ein endlich dimensionales Optimierungsproblem. Zu diesem diskreten Problem stellt man Optimalitätsbedingungen auf und löst das Problem numerisch mit endlichdimensionalen Optimierungsalgorithmen.

Wichtig hierbei zu erwähnen ist, dass die Diskretisierung der Zustände  $\mathbf{y}$  und Steuerung  $u$ , die Diskretisierung der adjungierten Variablen bestimmt. So stellt sich bei diesem Ansatz häufig die Frage inwieweit sich die diskrete adjungierte Gleichung wieder als ein bekanntes Diskretisierungsschema der kontinuierlichen adjungierten

Gleichung interpretieren und auffassen lassen. Ist das Diskretisierungsschema für Zustand und Adjungierte exakt dasselbe, so nennt man dieses Schema selbstadjungiert. Die Diskussion beider umschriebener Ansätze findet sich in [57] und in [56, Kapitel 3] ausführlicher dargestellt wieder. Die von uns verwendete Strategie ist *first discretize, then optimize*.

### 5.3.3. Die Formulierung des diskreten Optimierungsproblems.

Der nun folgende Abschnitt widmet sich der konkreten Formulierung des Optimalsteuerproblems ( $P_d$ ), das in Kapitel 5.3.2 eingeführt wurde. Die in diesem Kapitel formulierte diskrete Version des Optimalsteuerproblems ( $P_b$ ) wird von dem im Kapitel 5.3.4 vorgestellten Algorithmus gelöst.

Die Diskretisierung des Gebiets  $\Omega$  mit Hexaedern wurde in Kapitel 5.2.2 behandelt. Wir wählen für das Gebiet  $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ , das wie oben erwähnt ein Quader ist, folgende Hexaederform

$$\tilde{\Omega} := [-r^a, r^a] \times [-r^b, r^b] \times [-r^c, r^c],$$

mit  $r^a, r^b, r^c > 0$ , so dass die Punkte  $(-r^a, -r^b, -r^c)^\top$ ,  $(r^a, r^b, r^c)^\top$  in  $\Omega$  liegen und die Forderung

$$|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 > R_\varphi, \quad \forall \mathbf{x} \in \tilde{\Omega}, \mathbf{y} \in \Gamma.$$

erfüllt wird. Dies stellt sicher, dass

$$\text{supp}(\varphi(\cdot - \mathbf{x})) = \overline{\{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3 \mid \varphi(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \neq 0\}} \subseteq \overline{B_{R_\varphi}(\mathbf{x})} \subset \Omega \quad \forall \mathbf{x} \in \tilde{\Omega}$$

ist. Wir verwenden somit als eine konkrete Realisierung der Zustandsbeschränkung

$$\mathbf{g}(\mathbf{r}^{j,i}) := (r_x^{j,i} - r^a, -r_x^{j,i} - r^a, r_y^{j,i} - r^b, -r_y^{j,i} - r^b, r_z^{j,i} - r^c, -r_z^{j,i} - r^c)^\top \in \mathbb{R}^6, \\ \forall j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p, \quad (5.42)$$

sodass für  $\mathbf{r}^{j,i} \in \tilde{\Omega}$ ,  $\mathbf{g}(\mathbf{r}^{j,i}) \leq 0$  gilt.

Als Terme  $\mathcal{J}_1(\mathbf{r}^i(t))$ ,  $\mathcal{J}_2(\mathbf{r}^i(T))$  der Zielfunktion (5.1) wählen wir im Folgendem

$$\mathcal{J}_1(\mathbf{r}^i(t)) = \frac{1}{2} |\mathbf{r}^i(t) - \mathbf{r}_d^i(t)|_2^2 \quad \text{und} \\ \mathcal{J}_2(\mathbf{r}^i(T)) = \frac{1}{2} |\mathbf{r}^i(T) - \mathbf{r}_e^i|_2^2.$$

Wir geben hierbei gewünschte Partikelbahnen  $\mathbf{r}_d^i(t) \in \mathbb{R}^3$  zum  $i$ -ten Partikel über den gesamten Zeithorizont  $t \in [0, T]$  vor. Darüber hinaus setzen wir eine Endzeitbedingung um den Wunsch nachzukommen die Position der Partikel am Zeitpunkt  $t = T$  in den Punkt  $\mathbf{r}_e^i \in \mathbb{R}^3$ ,  $i = 1, \dots, n_p$  zu steuern.

Die diskrete Zielfunktion und das diskrete Optimalsteuerproblem, welches von uns gelöst wird und auf ( $P_d$ ) basiert, hat somit aus den Kapiteln 5.2-5.3.1 resultierend,

folgende Gestalt

$$\begin{aligned}
\min \quad & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \tilde{w}_i \Delta t |\mathbf{r}^{j,i} - \mathbf{r}_d^{j,i}|_2^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i |\mathbf{r}^{N,i} - \mathbf{r}_e^i|_2^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{u}^{b\top} \mathcal{M} \mathbf{u}^b \\
& - \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \tilde{w}_i \Delta t \ln(-\mathbf{g}_k(\mathbf{r}^{j,i})) \\
\text{s.t.} \quad & \tilde{\mathbf{p}}_d^{j+\frac{1}{2},i} = \tilde{\mathbf{p}}_d^{j-\frac{1}{2},i} + \tilde{\mathbf{f}}_1^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}_d^{j-\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), \quad j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p, \\
& \mathbf{r}^{j+1,i} = \mathbf{r}^{j,i} + \Delta t p_c \tilde{\mathbf{f}}_2^d(\mathbf{r}^{j,i}, \tilde{\mathbf{p}}_d^{j+\frac{1}{2},i}, \boldsymbol{\eta}), \quad j = 0, \dots, N-1, i = 1, \dots, n_p. \\
& \mathcal{A} \boldsymbol{\eta} = \mathcal{B} \mathbf{u}^b \\
& \tilde{\mathbf{p}}_d^{-\frac{1}{2},i} = \frac{\mathbf{p}_0^i}{m^q}, \quad \mathbf{r}^{0,i} = \mathbf{r}_0^i, \quad i = 1, \dots, n_p
\end{aligned} \tag{P_b^d}$$

Dabei sind  $\tilde{w}_i, \tilde{v}_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, n_p$  Gewichte für die einzelnen Zielfunktionssterme und die Matrix  $\mathcal{M}$  ist die in (5.13) definierte Randmassenmatrix. Die Diskretisierung der Nebenbedingungen ist in Kapitel 5.2 beschrieben. Hierbei folgt die Diskretisierung der reduzierten Form  $\mathbf{e}$  aus (5.7), (5.37) und (5.11). Wir setzen hierbei  $\mathcal{B} \frac{h}{2} \mathbf{u}^b =: \mathbf{v}^b$ , wobei die Matrix  $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_b}$  gegeben ist durch

$$\mathcal{B}_{i,j} := \begin{cases} 1, & \mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j^b, \\ 0, & \mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j^b. \end{cases} \tag{5.43}$$

Damit lässt sich das diskrete auf die Randsteuerung  $\mathbf{u}^b$  reduzierte Problem angeben als

$$\begin{aligned}
\min \quad & f_{n_b}(\mathbf{u}^b) := \tilde{\mathcal{J}}_{n_b}(\mathbf{r}(\mathbf{u}^b), \mathbf{u}^b) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \tilde{w}_i \Delta t |\mathbf{r}^{j,i}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - \mathbf{r}_d^{j,i}|_2^2 \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i |\mathbf{r}^{N,i}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - \mathbf{r}_e^i|_2^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{u}^{b\top} \mathcal{M} \mathbf{u}^b \\
& - \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \tilde{w}_i \Delta t \ln(-\mathbf{g}_k(\mathbf{r}^{j,i}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b))) \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_b}
\end{aligned} \tag{P_b^{d,r}}$$

An dieser Stelle möchten wir noch einige Bemerkungen zu den einzelnen Komponenten von  $(P_b^d)$  bzw.  $(P_b^{d,r})$  machen:

Die mit der Finiten-Elemente Methode diskretisierte schwache Formulierung der Poisson Gleichung (5.10) findet sich in der Gleichung  $\mathcal{A} \boldsymbol{\eta} = \mathcal{B} \mathbf{u}^b$  wieder, deren Lösung mit dem standardmäßigen konjugierten Gradientenverfahren (siehe hierfür z.B. [82, Kapitel 5] und [46, Kapitel 8.4]) bestimmt wird. Die Steifigkeitsmatrix  $\mathcal{A}$ , bestehend aus den Gradienten der trilinearen Ansatzfunktionen, ist positiv definit. Die Berechnung der Lösung des Systems (5.37) findet in den Schritten (3), (6c) und (6f) von Algorithmus 1 statt. Diese wird zur Neuberechnung der Zielfunktion in Algorithmus 1 (3), (4) und (6f) benutzt.

Eine Diskussion von Inneren-Punkten-Verfahren im endlich dimensionalen Fall findet sich in großer Ausführlichkeit in dem Buch [82, Kapitel 14, 19] von Nocedal und Wright und von primal-dualen Inneren-Punkte-Verfahren in [111] wieder. Das

Update des Homotopie Parameters  $\mu^H$  erfolgt durch die in [82, Kapitel 19.3] vorgeschlagene Strategie, auf die wir in Kapitel 5.3.4 eingehen werden.

In unserer Umsetzung soll die Zulässigkeit,  $\mathbf{r}(t) \in \tilde{\Omega}$ , sichergestellt werden, sodass das Barriere Verfahren in unseren Augen die Methode der Wahl ist. Eine Implementation einer primal-dualen Strategie erscheint sinnvoll. Dies wird jedoch in dieser Arbeit kein Bestandteil sein. So enthält der Artikel [8] eine konkrete Realisierung eines primal-dualen BFGS-Innere-Punkte-Verfahren. Man beachte hierbei die größer werdende Dimension der Systeme und den erhöhten Aufwand diese zu lösen. Somit belassen wir es in unserer Implementierung bei den von Fiacco und McCormick in [36, Kapitel 3] vorgestellten primalem Barriere Ansatz.

Um einen genauen Überblick, sowohl über die skalaren und vektoriellen Größen als auch die auftretenden Matrizen und deren Bedeutungen, zu erhalten, fassen wir alle Komponenten von unserem Optimierungsproblem ( $P_b^d$ ) in Tabelle 5.1 zusammen.

Größen	Bedeutung
<u>Zustände</u>	
$\mathbf{r}^{j,i} \in \mathbb{R}^3$	Position des $i$ -ten Partikels zum Zeitpunkt $t_j$
$\tilde{\mathbf{p}}^{j-\frac{1}{2},i} \in \mathbb{R}^3$	Impuls des $i$ -ten Partikels zum Zeitpunkt $t_{j-\frac{1}{2}}$
$\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{n_s}$	Skalarpotential. Lösung der Poisson Gleichung
<u>Steuerung</u>	
$\mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_b}$	Randsteuerung
<u>Matrizen</u>	
$\mathcal{M} \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b}$	Randmassenmatrix (5.13) der Poisson Gleichung
$\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_s}$	Steifigkeitsmatrix (5.12) der Poisson Gleichung
$\mathcal{B} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_b}$	Rechtecksmatrix aus (5.43)
<u>Vorgegebene Vektoren</u>	
$\mathbf{r}_d^{j,i} \in \mathbb{R}^3$	Vorgegebene Trajektorie, $i$ -tes Partikel zu $t_j$
$\mathbf{r}_e^{j,i} \in \mathbb{R}^3$	Vorgegebene Endposition, $i$ -tes Partikel zu $t_N$
$\mathbf{g}(\mathbf{r}^{j,i}) \in \mathbb{R}^6$	Realisierung (5.42) der Zustandsbeschränkung
<u>Konstanten &amp; Parameter</u>	
$n_p \in \mathbb{Z}^+$	Anzahl der Partikel
$N \in \mathbb{R}^+$	Endzeitpunkt $t_N$
$\Delta t \in \mathbb{R}^+$	Zeitschritt
$p_c \in \mathbb{R}^+$	Enddimensionalisierungsfaktor
$\tilde{v}_i, \tilde{w}_i \geq 0 \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, n_p$	Gewichtungsfaktoren
$\alpha > 0 \in \mathbb{R}^+$	Tychonov-Parameter
$\mu^h \in \mathbb{R}_0^+$	Homotopie-Parameter

TABELLE 5.1. Überblick über verwendete Größen und deren Bedeutung

### 5.3.4. Das globalisierte BFGS-Innere-Punkte Verfahren.

Wir stellen im Folgenden den von uns implementierten Algorithmus zur Lösung des diskreten Optimierungsproblems ( $P_b^d$ ) bzw. ( $P_b^{d,r}$ ) vor. Die einzelnen Aspekte, die Algorithmus 1 umfasst, finden sich in den jeweiligen Kapiteln entsprechend ausführlich dargestellt wieder.

**Algorithmus 1** Der Optimierungsalgorithmus

INITIALISIERUNG DES VERFAHRENS:

- (1a) Laden des ADiMat *runtime environment*.
- (1b) Laden der physikalischen Konstanten:  $c, \epsilon, \mu, q, m_0^q$  und Eingabe der Toleranzen  $\text{tol}_1 \geq 0$  und  $\text{tol}_2 \geq 0$
- (1c) Initialisierung der Optimierungsparameter: Tikhonov Parameter  $\alpha > 0$  und Laden der *desired trajectory*.
- (1d) Initialisierung des Gebiets  $\Omega$ , Generierung des Hexaedergitters, der Randmassenmatrix  $\mathcal{M} \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b}$  und der Steifigkeitsmatrix  $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{n_s \times n_s}$ .
- (1e) Initiierung der Randsteuerung  $\mathbf{u}_0^b \in \mathbb{R}^{n_b}$ .
- (1f) Setze  $i = 0$ .

BFGS INNERE PUNKTE VERFAHREN:

- (2) Initialisierung der inversen BFGS-Update Matrix  $H_0$

$$H_0 = I \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b},$$

des Homotopie Parameter  $\mu_0^H \geq 0$ , der Parameter  $c_1, c_2 \geq 0$  für die Winkelbedingung und des Gebiets  $\tilde{\Omega}$ .

- (3) Berechnung des Zustandes  $R_0 \in \mathbb{R}^{3n_p \times N}$  geben in (5.54) nach (5.41), und Bestimmung der Zielfunktion  $f_{n_b}(\mathbf{u}_0^b)$  nach (5.53).
- (4) Bestimmung des Gradienten der reduzierten Zielfunktion  $\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_0^b)$  nach (5.55).
- (5) *if*  $\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_0^b) = 0$  *dann* STOP, *else* gehe zu (6a) *end if*.
- (6) *while*  $|f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b) - f_{n_b}(\mathbf{u}_{i-1}^b)|_2 > \text{tol}_1 \wedge |\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)|_2 > \text{tol}_2$  ( $i \geq 1$ )

(6a) Berechnung der Quasi Newton Suchrichtung  $\mathbf{q}_i = -H_i \nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)$ .

(6b) *if*  $\mathbf{q}_i$  der Ungleichung

$$-\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)^\top \mathbf{q}_i \geq \min\{c_1, c_2 |\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)|_2\} |\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)|_2 |\mathbf{q}_i|_2$$

genügt (Modifizierte Winkelbedingung), *dann* setze  $\mathbf{s}_i = \mathbf{q}_i$ , *else* setze  $\mathbf{s}_i = -\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)$  *end if*.

- (6c) Bestimme die Schrittweite  $\tau_i > 0$  mit der Regel von Armijo mit Parameter  $\beta, \gamma \in (0, 1)$ ,  $m = 0$ ,  $\sigma^0 > 0$

$$\text{while } f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b) - f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b + \sigma^m \mathbf{s}_i) < -\gamma \sigma^m \nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)^\top \mathbf{s}_i$$

$$\text{Setze } \sigma^{m+1} = \beta \sigma^m, m = m + 1$$

*end while*

und setze  $\tau_i = \sigma^m$ .

- (6d) Setze  $\mathbf{u}_{i+1}^b = \mathbf{u}_i^b + \tau_i \mathbf{s}_i$ .
- (6e) Update des Homotopie Parameters  $\mu_{i+1}^H$  nach (5.44).
- (6f) Berechnung des Zustandes  $R_{i+1}$  nach (5.41), und Bestimmung der Zielfunktion  $f_{n_b}(\mathbf{u}_{i+1}^b)$  nach (5.53).
- (6g) Bestimmung des Gradienten der reduzierten Zielfunktion  $\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_{i+1}^b)$  nach (5.55).
- (6h) *if*  $\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_{i+1}^b) = 0$  *dann* STOP *end if*.
- (6i) Inverser BFGS UPDATE:  $\mathbf{d}_i = \mathbf{u}_{i+1}^b - \mathbf{u}_i^b$ ,  $\mathbf{w}_i = \nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_{i+1}^b) - \nabla f_{n_b}(\mathbf{u}_i^b)$  und

$$H_{i+1} = H_i + \frac{(\mathbf{d}_i - H_i \mathbf{w}_i) \mathbf{d}_i^\top + \mathbf{d}_i (\mathbf{d}_i - H_i \mathbf{w}_i)^\top}{\mathbf{d}_i^\top \mathbf{w}_i} - \frac{(\mathbf{d}_i - H_i \mathbf{w}_i)^\top \mathbf{w}_i \mathbf{d}_i \mathbf{d}_i^\top}{(\mathbf{d}_i^\top \mathbf{w}_i)^2}$$

(6j) Setze  $i = i + 1$ .

- (7) *end while*.

Das Update des Homotopie Parameters in Algorithmus 1 (6f) und die Strategie, die  $\mu_i^H \rightarrow 0, i \rightarrow \infty$ , konvergieren lässt, erfolgt durch

$$\begin{aligned}\mu_{i+1}^H &= \kappa_i \frac{(\tilde{\mathbf{g}}^i)^\top \mathbf{z}^i}{m}, \quad \text{mit} \\ \kappa_i &= 0.1 \min \left( 0.05 \frac{1 - \xi_i}{\xi_i}, 2 \right)^3, \\ \xi_i &= \frac{\min_{j=1, \dots, m} [\tilde{\mathbf{g}}^i]_j [\mathbf{z}^i]_j}{\frac{(\tilde{\mathbf{g}}^i)^\top \mathbf{z}^i}{m}},\end{aligned}\tag{5.44}$$

wie in [82, Kapitel 19.3] beschrieben. Man bezeichnet die  $j$ -te Komponente eines Vektors  $\mathbf{v}$  mit  $[v]_j$ ,  $m = 6$ , und in unserem Fall ist  $\tilde{\mathbf{g}}^i = (-\mathbf{g}(\mathbf{r}))^i$  und  $\mathbf{z}^i = \mu_i^H (\frac{1}{r^a}, \frac{1}{r^a}, \frac{1}{r^b}, \frac{1}{r^b}, \frac{1}{r^c}, \frac{1}{r^c})^\top$ . Hierbei wird der Parameter  $\mu_{i+1}^H$  aggressiv reduziert, falls  $\xi_i \approx 1$  ist. Für Parameterwerte  $\mu_i^H$ , die sehr schnell nahe zur Null gezwungen werden, kann das Verfahren instabil werden bzw. sich der Iterationsverlauf verlangsamen. Näheres findet der Leser in [82, Kapitel 19].

Man kann auch eine konservative Strategie für den Homotopie Parameter verwenden, indem man

$$\mu_{i+1}^H = \kappa_i \mu_i^H, \quad \mu_i^H \rightarrow 0, i \rightarrow \infty,$$

mit  $\kappa_i \in (0, 1)$  setzt.

In Kapitel 5.6 werden hierzu drei Testbeispiele präsentiert. Im folgenden Abschnitt betrachten wir zunächst jedoch eine Möglichkeit zur Realisierung der adjungierten Gleichung und der Gradientengleichung mit Hilfe von automatischem Differenzieren. Danach wird in Kapitel 5.4.7 auf die Berechnung des Gradienten der reduzierten Zielfunktion, der in Algorithmus 1 (4) und (6g) benötigt wird, ausführlich eingegangen.

## 5.4. Automatisches (Algorithmisches) Differenzieren.

Zunächst werden wir einen kurzen Überblick geben, was man unter Automatischem Differenzieren versteht. Dabei werden wir den Grundgedanken der hinter dem exakten Differenzieren steht wiedergeben und einen Blick auf die unterschiedlichen Techniken und Methodiken von (AD) werfen. Man unterscheidet im Wesentlichen zwei Modi beim Automatischem Differenzieren, nämlich den Vorwärts- und den Rückwärts-Modus. Im Folgenden nutzen wir die englischen Fachtermini *forward mode* und *reverse mode*. Bei der Umsetzung eines AD-Codes benutzt man entweder so genannte *Quelltransformation (source transformation)* oder die *Methode der Operatorenüberladung (operator overloading)*. Empfehlenswerte Literatur zum Automatischem Differenzieren ist das Buch [45] von Griewank & Walther und die darin enthaltenen Referenzen. Darüber hinaus gibt die Habilitationsschrift [99] von Thomas Slawig einen guten Einblick in AD.

### 5.4.1. Einführung.

Das Automatische Differenzieren, auch Algorithmisches Differenzieren genannt, stellt eine Programmtransformation dar, die die Semantik eines Programmes wie MATLAB ändert, basierend auf der Kettenregel der Differentialrechnung. Der Grundgedanke, der hinter dem Automatischem Differenzieren steht, ist der folgende:

- Sei ein Programm  $A$  gegeben, das eine Funktion  $F$  berechnet.
- Dann generiert AD ein "differenziertes" Programm  $A'$ , das sowohl für jeden Inputwert den Funktionswert berechnet als auch die dazugehörige Jacobi Matrix  $J$  ausgibt.

Es gilt zu beachten, dass die berechneten Ableitungen exakt (bis auf Maschinengenauigkeit) und keine numerischen Approximationen sind. AD ist somit für die Differenzierung eines diskreten Optimalsteuerproblems sehr geeignet und eine sinnvolle Alternative im Vergleich zu Differenzieren per Hand. Hierbei wird die Funktion  $F$  als Hintereinanderausführung von elementaren Operationen

$$\mathbf{y} = F = F_k \circ \dots \circ F_1, \quad k \in \mathbb{N} \quad (5.45)$$

aufgefasst, wobei die Ableitungen der elementaren Operationen bekannt sind. Durch die Kettenregel ergibt sich die Ableitung von  $F$  als

$$J(\mathbf{x}) := F'(\mathbf{x}) = F'_k(F_{k-1}(\dots F_1(\mathbf{x}))) \dots F'_2(F_1(\mathbf{x})) \cdot F'_1(\mathbf{x}), \quad (5.46)$$

mit  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  und  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ . Der Grundgedanke, der hinter allem steht, ist, dass die elementaren Ableitungsregeln der Differentialrechnung in einer numerischen Umgebung implementiert werden können.

Es gibt prinzipiell zwei unterschiedliche Methoden, die Berechnung der Jacobi Matrix  $J$  durchzuführen:

- Das Überladen der Operatoren, d.h. zusätzlich Ableitungsinformationen übergeben und Neu-Definition der elementaren Operationen (*Operatorenüberladen*).
- Die zusätzliche Generierung von neuem Quellcode (*Quelltransformation*).

#### 5.4.2. Operatorenüberladen.

Die Technik ist ein Merkmal objektorientierter Programmiersprachen, bei der mathematische Operatoren und Funktionen *überladen* werden, d.h., dass man ihnen für verschiedene Datentypen verschiedene Bedeutungen zuordnet. Hierzu definiert man Datentypen der Form

$$X := (\mathbf{x}, \mathbf{x}'),$$

bestehend aus einer Variablen und deren Ableitung. In und für die zweite Komponente implementiert man die Differentiationsregeln. Somit erfolgt die Funktionswertberechnung  $\mathbf{y} = F(\mathbf{x})$  und deren Ableitung  $\mathbf{y}' = F'(\mathbf{x})$  gleichzeitig durch Ausführen des ursprünglichen in der Struktur unveränderten Programms. Es wird zu Beginn des Verfahrens  $\mathbf{x}' = S$  als Initialisierungsmatrix gesetzt, in Kontext des Automatischen Differenzierens auch *Seed Matrix*  $S$  genannt. Nach Durchführung der Differenzierung der einzelnen Operationen erhält man am Ende den Datentyp  $Y = (\mathbf{y}, \mathbf{y}')$ , in dessen erster Komponente der Funktionswert berechnet wurde und in dessen zweiter Komponente die partielle Ableitung  $\mathbf{y}' = JS$  zu finden ist, wobei  $J$  die Jacobi Matrix von  $F$  darstellt. Eine Einführung in AD unter dem Gesichtspunkt der objekt-orientierten Programmierung und eine konkrete Umsetzung des Ansatzes der *Operatorenüberladung* in MATLAB ist in Neidinger [76] gegeben.

#### 5.4.3. Quelltransformation.

Der *Quelltransformations*-Ansatz analysiert zunächst den vorhandenen Code und die zu ableitenden Programmteile. Der wesentliche Unterschied zum *Operatorenüberladen* ist, dass neuer, zusätzlicher Quellcode generiert wird. Bei diesem Ansatz können eben jene Variablen identifiziert werden, für die *derivative objects* benötigt werden, und die einzelnen Terme, in denen diese auftreten, deren Ableitungen ebenso berechnet werden müssen. Es wird also hierbei explizit neuer Code erstellt, der sowohl die ursprüngliche Funktion als auch deren jeweils gewünschten partiellen Ableitungen enthält. Der Vorteil der *Quelltransformation* gegenüber der *Operatorenüberladung* liegt in ihrer Effizienz, sie erfordert jedoch einen wesentlich höheren implementatorischen Aufwand, vergleichbar mit dem Implementieren symbolischer

Differentiationstools. Eine ausführliche Beschreibung der verschiedenen Arten der *Quelltransformation* findet sich in [45, Kapitel 6.2] wieder.

Wir führen unter Berücksichtigung der Hintereinanderausführung (5.45) von  $F$  folgende Notation ein

**Vorschrift 5.4.1.** *Es sei gegeben*

$$\begin{aligned} (x_{-(n-1)}, \dots, x_0) &:= \mathbf{x}, & \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n \\ x_i &:= F_i(x_{-(n-1)}, \dots, x_{i-1}), & i &= 1, \dots, k \\ y &:= F(\mathbf{x}) = x_k. \end{aligned}$$

Dann bestimmt sich die Ableitung der einzelnen Komponenten nach der Kettenregel zu

$$x'_i = \sum_{j=-(n-1)}^{i-1} \frac{\partial F_i(x_{-(n-1)}, \dots, x_{i-1})}{\partial x_j} x'_j, \quad i = 1, \dots, k.$$

Hierbei gilt  $x'_j = 0$ , falls  $F_i$  nicht von  $x_j$  abhängt. Somit muss die Summe nur über die Indizes  $j$  genommen werden, deren Variable  $x_j$  ein direkter Vorgänger von  $x_i$  ist. Dann lässt sich die Relation

$$j \prec i \Leftrightarrow x_i \text{ hängt direkt von } x_j \text{ ab,}$$

definieren und die Summenformel reduziert sich zu

$$x'_i = \sum_{j \prec i} \frac{\partial F_i((x_j)_{j \prec i})}{\partial x_j} x'_j, \quad i = 1, \dots, k. \quad (5.47)$$

Damit gilt  $F'(\mathbf{x}) = x'_k$ . Die *Quelltransformation* stellt dann eine Methode dar, die Berechnung der Jacobi Matrix  $x'_k$  mittels (5.47) durchzuführen.

#### 5.4.4. Die verschiedenen AD Modi: Vorwärts - vs. Rückwärts Modus.

Die Berechnung und Auswertung von (5.46) kann prinzipiell in beiden Richtungen passieren, d.h. entweder vorwärts von  $i = 1, \dots, k$  (*Vorwärtsmodus*) oder rückwärts von  $i = k, \dots, 1$  (*Rückwärtsmodus*). Dies wollen wir an einem Beispiel illustrieren.

Betrachten wir hierzu die elementare Modellfunktion  $F$ , deren Ableitung bestimmt werden soll, gegeben durch

$$F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{mit } F(\mathbf{x}) = (x_1 + x_2)x_1x_3. \quad (5.48)$$

#### Vorwärtsmodus

Setzen wir die zu der im vorherigen Abschnitt modifizierte Vorschrift

**Vorschrift 5.4.2.** *Es sei gegeben (in Pseudocode)*

$$\begin{aligned} x_0 &:= \mathbf{x} & \mathbf{x} &\in \mathbb{R}^n \\ \text{for } i &= 1 : k \\ & \quad x_i = F_i(x_{i-1}) \\ \text{end for} \\ y &:= F(\mathbf{x}) = x_k, \end{aligned}$$

so erhält man für die Jacobi Matrix der Hintereinanderausführung (5.45)

$$F'(\mathbf{x}) = \prod_{l=1}^k F'_l(x_{l-1}) = F'_k(x_{k-1})x'_{k-1}.$$

Wir definieren hierbei die Zwischenwerte

$$x'_j := F'_j(x_{j-1}) \cdots F'_1(x_0), \quad j \in \{1, \dots, k\} \quad (5.49)$$

Hierbei berechnet sich das Produkt von vorne  $F'_1(x_0)$  nach hinten  $F'_k(x_{k-1})$ . Dieser Modus wird **Vorwärtsmodus (forward mode)** genannt.

Die Ausgabevariable  $y$ , deren Ableitung bestimmt werden soll, nennt man beim Automatischen Differenzieren *abhängige* Variable. Die Variablen bzgl. die man differenziert, in dieser verwendeten Notation  $\mathbf{x}$ , werden *unabhängige* Variablen genannt. Als Initialisierungsmatrix im *forward mode*, sogenannte **Seed Matrix**  $S$ , setzt man

$$x' := x'_0 = \frac{dx_0}{dx} = S.$$

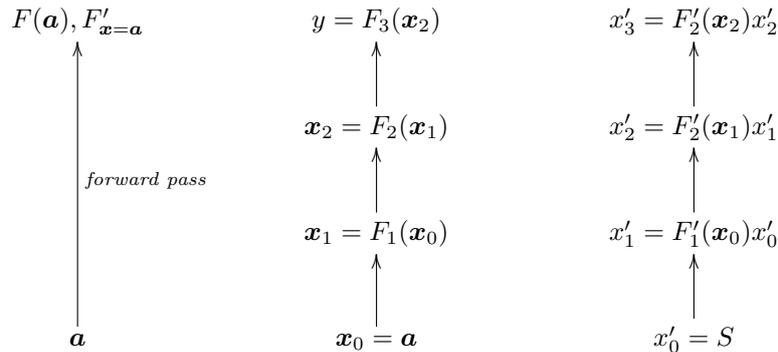
Man erhält mit dieser Notation i.A. die Richtungsableitung in Richtung  $S$

$$y' = x'_k = F'(\mathbf{x})S. \quad (5.50)$$

Die Wahl der *seed matrix*  $S$  (für den Fall  $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, F'(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ) ist von entscheidender Bedeutung:

- $S = \mathbf{e}_j, j \in 1, \dots, n$ : partielle Ableitung,  $j$ -te Spalte der Jacobi Matrix,
- $S = \mathbf{v}$ : Richtungsableitung in Richtung  $\mathbf{v}$ ,
- $S = (\mathbf{e}_j)_{j=1}^n$ : volle Jacobi-Matrix.

Wir verdeutlichen dies nun am Beispiel (5.48). Als Auswertungsstelle verwenden wir den Vektor  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$  mit Komponenten  $a_1, a_2, a_3$ . Der *forward mode* hat folgenden Ablauf:



Der **forward pass** hat dabei folgende Gestalt

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_0 &= \mathbf{a}, & x'_0 &= S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{x}_1 &= F_1(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_0)_1 & (\mathbf{x}_0)_1 \\ (\mathbf{x}_0)_1 & (\mathbf{x}_0)_2 \\ (\mathbf{x}_0)_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1 \\ a_1 a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} & F'_1(\mathbf{x}_0) &= \begin{pmatrix} 2(\mathbf{x}_0)_1 & 0 & 0 \\ (\mathbf{x}_0)_2 & (\mathbf{x}_0)_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{x}_2 &= F_2(\mathbf{x}_1) = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_1)_1 & (\mathbf{x}_1)_3 \\ (\mathbf{x}_1)_2 & (\mathbf{x}_1)_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1 a_3 \\ a_1 a_2 a_3 \end{pmatrix} & F'_2(\mathbf{x}_1) &= \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_1)_3 & 0 & (\mathbf{x}_1)_1 \\ 0 & (\mathbf{x}_1)_3 & (\mathbf{x}_1)_2 \end{pmatrix} \\ y &= F_3(\mathbf{x}_2) = ((\mathbf{x}_2)_1 + (\mathbf{x}_2)_2) = ((a_1 + a_2)a_1 a_3), & F'_3(\mathbf{x}_2) &= (1, 1). \end{aligned}$$

Wir erhalten für die Ableitung von  $F$  an der Stelle  $\mathbf{a}$

$$F'(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=\mathbf{a}} = (x'_3)^\top = \begin{pmatrix} 2a_1a_3 + a_3a_2 \\ a_1a_3 \\ a_1^2 + a_1a_2 \end{pmatrix}.$$

**Bemerkung 5.4.3.** Man beachte, dass in diesem Fall mit  $F'(\mathbf{x})^\top \in \mathbb{R}^{1 \times n}$  mit  $m = 1$  alle Produktterme  $F'_l(x_{l-1})x'_{l-1}$  mit  $l = 1, \dots, 2$  Matrizen sind. Im Fall, dass man die Produktterme von hinten nach vorne berechnet (Rückwärtsmodus), sind alle Komponenten des Produktes Vektoren. Dies führt uns zum reverse mode.

### Rückwärtsmodus

Man definiert sich hierbei unter Verwendung von (5.49) und Vorschrift 5.4.2 als Zwischenwerte:

$$\bar{x}_j^\top := \frac{dy}{d\mathbf{x}_j} = \prod_{i=j+1}^k F'_i(x_{i-1}).$$

Damit gilt  $\bar{x}_j^\top = \bar{x}_{j+1}^\top F'_{j+1}(x_j)$  und die Rekursionsformel

$$\bar{x}_{j-1} = F'_j(x_{j-1})^\top \bar{x}_j, \quad j = k, \dots, 1.$$

Die *seed*-Matrix ist im *reverse mode* gegeben durch

$$\bar{y} := \bar{x}_k = \left( \frac{d\mathbf{x}_k}{dx_k} \right)^\top = S,$$

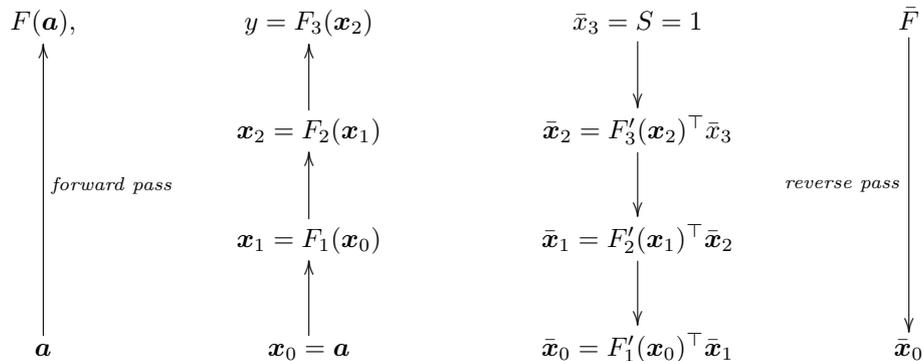
und die  $\bar{x}_j$  werden die adjungierten Variablen genannt. Die gesuchte Richtungsableitung ist somit gegeben durch

$$y' = \bar{x}_0^\top = S^\top F'_k(x_{k-1}) \cdots F'_1(x_0) = S^\top F'(\mathbf{x}). \quad (5.51)$$

Die Wahl der *seed matrix*  $S$  (für den Fall  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, F'(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ) ergibt in diesem Fall:

- $S = \mathbf{e}_j, j \in \{1, \dots, m\}$ :  $j$ -te Zeile der Jacobi Matrix,
- $S = (\mathbf{e}_j)_{j=1}^m$ : volle Jacobi-Matrix.

Die Ableitung der elementaren Beispielfunktion  $F$  in (5.48) lässt sich im *reverse mode* wie folgt berechnen.



Im **forward pass** finden die Auswertung

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{a},$$

$$\mathbf{x}_1 = F_1(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_0)_1(\mathbf{x}_0)_1 \\ (\mathbf{x}_0)_1(\mathbf{x}_0)_2 \\ (\mathbf{x}_0)_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1 \\ a_1 a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad F'_1(\mathbf{x}_0) = \begin{pmatrix} 2(\mathbf{x}_0)_1 & 0 & 0 \\ (\mathbf{x}_0)_2 & (\mathbf{x}_0)_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{x}_2 = F_2(\mathbf{x}_1) = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_1)_1(\mathbf{x}_1)_3 \\ (\mathbf{x}_1)_2(\mathbf{x}_1)_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 a_1 a_3 \\ a_1 a_2 a_3 \end{pmatrix} \quad F'_2(\mathbf{x}_1) = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_1)_3 & 0 & (\mathbf{x}_1)_1 \\ 0 & (\mathbf{x}_1)_3 & (\mathbf{x}_1)_2 \end{pmatrix}$$

$$y = F_3(\mathbf{x}_2) = ((\mathbf{x}_2)_1 + (\mathbf{x}_2)_2) = ((a_1 + a_2)a_1 a_3), F'_3(\mathbf{x}_2) = (1, 1).$$

statt. Im **reverse pass** berechnet man

$$\bar{F} = \bar{x}_3 = S = 1,$$

$$\bar{\mathbf{x}}_0 = F'_1(\mathbf{x}_0)^\top \bar{\mathbf{x}}_1 = \begin{pmatrix} 2a_1 a_3 + a_3 a_2 \\ a_1 a_3 \\ a_1^2 + a_1 a_2 \end{pmatrix}.$$

Damit ergibt sich die Ableitung zu

$$F'(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}=\mathbf{a}} = \bar{\mathbf{x}}_0.$$

Im AD Kontext werden die Variablen  $\bar{F}, \bar{x}_3, \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{x}}_0$  adjungierte Variablen genannt. Die *Seed*-Matrix  $S$  entspricht dem Skalar 1. Die adjungierten Variablen sind nun in unserem Beispiel Vektoren und keine Matrizen. Man nennt die im *reverse mode* differenzierte Funktion *adjungiertes Modell*. Die adjungierte Variable  $\bar{\mathbf{x}}_0$  stellt die zu bestimmende Jacobi Matrix dar.

Damit lässt sich folgende Direktive in der Verwendung beider Modi angeben. Ist die Dimension der Inputvariable  $n < m$ , so ist der *Vorwärtsmodus* die Methode der Wahl. Falls  $m < n$ , dann ist der *Rückwärtsmodus* das effektivere Verfahren, die Jacobi Matrix zu berechnen. Somit bietet sich der *Rückwärtsmodus* im Falle einer Funktion  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  an. Der Nachteil dieses Modus ist der sehr erhöhte Speicherbedarf. Neben dem Rückwärtsaufruf der einzelnen  $F'_i$  ist eine Vorwärtsauswertung der Funktionswerte nötig, d.h. eine Speicherung der Werte  $x_i$  wird notwendig.

Für Optimalsteuerprobleme ist der *Rückwärtsmodus* unter Berücksichtigung eines reduzierten Zielfunktional  $\mathcal{J} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , geeignet. Im Kontext der optimalen Steuerung von Differentialgleichungen findet sich darüber hinaus die gleiche Struktur wieder, nämlich die Lösung der Zustandsgleichung vorwärts und die Lösung der adjungierten Gleichung rückwärts in der Zeit.

Der *reverse mode* benötigt aufgrund des *forward pass* zusätzlichen Speicherbedarf ist jedoch sehr effizient im Hinblick auf die Rechenzeit verglichen mit dem *forward mode*, falls die Dimension der Eingabevariablen deutlich die Dimension der berechneten Funktionswerte, d.h. der abzuleitenden Funktion, übersteigt. Im konkreten Beispiel hat die *seed matrix*  $S$  des *forward mode* die Dimension  $3 \times 3$  im *reverse mode* ist dies nur ein Skalar. Die Nulleinträge der Matrix  $S$  im *forward mode* bei großer Dimension der Eingabevariablen (im Vergleich zur Ausgabe) führen deshalb zu einer großen numerischen Ineffizienz. Vor allem die Durchführung von elementaren Operationen ist in diesem Zusammenhang sehr kostenintensiv.

Die Kosten der Berechnung des *forward mode* sind für  $n$  unabhängige Ausgangsvariablen in der Größenordnung von  $(n + 1)$ -Mal der Kosten der einfachen Funktionswertberechnung von  $f$  gegeben, da bei jedem elementaren Schritt  $n$  Einträge zusätzlich zu der Wertberechnung entstehen. Im Gegensatz hierzu lassen sich die

Berechnungskosten des *reverse mode* durch  $k$ -Mal die Kosten der Funktionswertberechnung von  $f$ , mit einer Konstanten  $k > 0$  unabhängig von  $n$ , charakterisieren. Weitere Informationen finden sich in [45, Kapitel 3.1/4.5], [44] und [99].

#### 5.4.5. Verwendetes AD-Tool ADiMat.

Die von uns verwendete AD-Software ADiMat ist ein Hybrid-Ansatz, d.h. sie macht sich sowohl die Quelltransformation als auch das Operatorenüberladen zunutze und ist ein speziell für MATLAB entwickeltes Programm. Im AD-Tool sind sowohl der Vorwärts- als auch der Rückwärtsmodus verfügbar. Hierbei macht sich ADiMat vor allem die *cell array class* von MATLAB zunutze, in der die Richtungsableitungen hinterlegt werden. Die Daten können dabei von unterschiedlicher Form und Typ sein. Der Abruf der Daten erfolgt wie bei Matrizen Index basiert.

Das Programm ADiMat wird in [15] vorgestellt, worin auch dessen numerische Effizienz untersucht wird. Im Wesentlichen gibt es zwei Typen von Funktionen, die in ADiMat die Jacobi Matrix  $J$  berechnen. Über das sogenannte *high level user interface* sind folgende Aufrufe möglich:

- `admDiffVFor(@f,S, arg1,...,argN,opts)`: Funktion, die den Vorwärtsmodus benutzt. Als Ausgabe erhält man das Matrizenprodukt aus Jacobi Matrix und Saatmatrix  $J \cdot S$ , hierzu wird als Input die zu differenzierende Funktion  $f$ , die *Seed*-Matrix  $S$  und die Auswertungsstellen `arg1,...` benötigt. Die Übergabe der Funktion  $f$  erfolgt mittels *function handle*.
- `admRevFor(@f,S, arg1,...,argN,opts)`: Funktion, die den *reverse mode* umsetzt. Als Ausgabe erhält man das Matrizenprodukt aus Saatmatrix und Jacobi Matrix  $S \cdot J$ . Die Eingabeparameter sind die Gleichen wie beim *forward mode*.
- Zusätzlich lassen sich die einzelnen Ableitungsschritte hin zur Jacobi Matrix  $J$  mit der Funktion `admTransform` manuell berechnen. Diese Funktionalität stellt sich im späteren Verlauf als sehr nützlich heraus.

Der Aufruf und die Initialisierung des ADiMat *runtime environment* erfolgt im Algorithmus 1 in Schritt (1a).

#### 5.4.6. Umsetzung in ADiMat.

Wir werden nun den in ADiMat implementierenden *reverse mode* genauer untersuchen und vor allem zeigen wie man einzelne partielle Ableitungen, die per Hand einfach zu berechnen sind, in den von ADiMat generierten Quellcode einsetzen kann. Wir studieren folgende Funktion. Sei  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  und  $f, g, h : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$  mit

$$f(\mathbf{x}) := g(\mathbf{x}) + h(\mathbf{x}), \quad (5.52)$$

mit  $h(\mathbf{x}) = x^2$ . Wir verwenden folgenden Funktionsaufruf

```
function f= testfu(x)

u= g(x);
f= u +x.^2;
```

Die Testfunktion in diesem Beispiel ist aus Gründen der Übersichtlichkeit so einfach wie möglich gehalten. Aufgrund dieser Strukturierung bietet uns die Quellcodegenerierung von ADiMat in wenigen Schritten die Möglichkeit, von Hand abgeleitete partielle Ableitungen in den Code einzubauen. Man erhält von ADiMat den folgenden MATLAB Code  $A'$  (in den wesentlichen Auszügen wiedergegeben)

```

% Parameters:
% - dependents=f
% - independents=x
% - inputEncoding=ISO-8859-1
% - output-mode: plain
% - output-file: outputs/a_testfu.m
% - output-file-prefix:
% - output-directory: outputs
%
% Functions in this file: a_testfu, rec_testfu,
% ret_testfu, a_g, rec_g,
% ret_g
%

function [a_x nr_f] = a_testfu(x, a_f)
    ...
    a_x = adimat_adjsum(a_x, tmpadjc1);
end

function f = rec_testfu(l x)
    ...
end

function a_x = ret_testfu(a_f)
    ...
end

function [a_x nr_u] = a_g(x, a_u)
    ...
end

function u = rec_g( x)
    % Berechnung des Funktionswerts u
    % Ablegen von u und x im stack
    adimat_push(u, x);
end

function a_x = ret_g(a_u)
    % Aufrufen der im stack abgelegten Daten x und u
    [x u] = adimat_pop;
    % Initialisierung der Strukturen der partiellen Ableitungen
    a_x = a_zeros1( x);
    if nargin < 1
        a_u = a_zeros1(u);
    end
    % Berechnung von Richtungsableitung
    a_x
end

```

Es gibt folgende wesentlichen Bestandteile im oben dargestellten Code  $A'$ :

- Berechnung des Funktionswertes und der Jacobi Matrix, bzw. Komponenten der Jacobi Matrix von  $f$  im Punkt  $x$  in `a_testfu(x, a_f)`

- Berechnung des Funktionswertes von  $f$  in  $x$  in `rec_testfu(x)`
- Bereitstellung der Jacobi Matrix in `ret_testfu(a_f)`
- Berechnung der in der Funktion  $f$  aufgerufenen Unterfunktionen und deren Ableitungen in `a_g(x, a_u)`, `rec_g(x)` und `ret_g(a_u)`
- Es gilt zu beachten: Die berechneten Ableitungen von der Unterfunktion `ret_g(a_u)` werden in der Hauptfunktion `a_testfu(x, a_f)` abgerufen

Der letzte oben angesprochene Punkt ermöglicht es, einen von Hand hergeleitete partielle Ableitungen in die Quelltransformation einzufügen. Man kann also die Struktur des AD Codes  $A'$  verwenden und in den Funktionen `rec_g(x)` und `ret_g(a_u)` eigene Ableitungen einbinden. Dies ergibt für die Funktion (5.52) folgenden MATLAB Code.

```
% Parameters:
% - dependents=f
% - independents=x
% - inputEncoding=ISO-8859-1
% - output-mode: plain
% - output-file: outputs/a_testfu.m
% - output-file-prefix:
% - output-directory: outputs
%
% Functions in this file: a_testfu, rec_testfu,
% ret_testfu, a_g, rec_g,
% ret_g
%

function [a_x nr_f] = a_testfu(x, a_f)

    u = rec_g(x);

    tmpca1 = x .^ 2;
    f = u + tmpca1;
    nr_f = f;
    [a_u a_tmpca1 a_x] = a_zeros(u, tmpca1, x);
    if nargin < 2
        a_f = a_zeros1(f);
    end
    a_u = adimat_adjsum(a_u, adimat_adjred(u, a_f));
    a_tmpca1 = adimat_adjsum(a_tmpca1, adimat_adjred(tmpca1, a_f));
    a_x = adimat_adjsum(a_x, adimat_adjred(x, 2 .* x.^1 .* a_tmpca1));

    [tmpadjc1] = ret_g(a_u);

    a_x = adimat_adjsum(a_x, tmpadjc1);
end

function f = rec_testfu(x)
    ...
end

function a_x = ret_testfu(a_f)
    ...
end
```

```

function [a_x nr_u] = a_g(x, a_u)
    ...
end

function u = rec_g(x)
    u = 2 * x;
    uJacobi = 2*eye(3);
    adimat_push(u, x, uJacobi);
end

function a_x = ret_g(a_u)
    [uJacobi x u] = adimat_pop;
    a_x = a_zeros1(x);
    if nargin < 1
        a_u = a_zeros1(u);
    end
    a_x{1} = a_u{1}*uJacobi;
    a_x{2} = a_u{2}*uJacobi;
    a_x{3} = a_u{3}*uJacobi;
end

```

Die Hauptfunktion des generierten *MATLAB files* `a_testfu(x,a_f)` mit *seed matrix* `S=a_f` ruft sowohl

$$u = \text{rec\_g}(x)$$

auf (Abruf des Funktionswertes von  $g$  an der Stelle  $x$ ) als auch

$$[\text{tmpadjc1}] = \text{ret\_g}(a_u)$$

auf (Abruf der Ableitung von  $g$  mit *seed matrix* `S=a_u`). Dabei ist die Funktion `a_testfu(x,a_f)` wie folgt strukturiert:

- Bestimmung des Funktionswertes `nr_f`
- Bestimmung der Ableitung von  $x^2$
- Aufrufen der Ableitungsinformationen von  $u$  mittels `ret_g(a_u)`
- Addition beider Jacobi Matrizen mit Hilfe von `adimat_adjsum`

Die von uns in dem ADiMat Code integrierten Ableitungen sind in den letzten beiden Funktionen wiederzufinden:

- `function u = rec_g(x)`: Es lassen sich in dieser Funktion nun beliebige Funktionen realisieren und implementieren (hier als Beispiel:  $g(\mathbf{x}) = 2x$ ). Wir berechnen hierbei ebenso die Jacobi Matrix `uJacobi` von  $g$ . Des Weiteren nutzen wir die vom ADiMat *runtime environment* mitgelieferte Funktion `adimat_push`, die die einzelnen Werte auf einen Stapel legt (Zu beachten: Die Reihenfolge der auf den *stack* gelegten Werte).
- `function a_x =ret_g(a_u)`: Zunächst ruft die Funktion `adimat_pop` die Werte in umgekehrter Reihenfolge vom *stack* ab. Die partielle Ableitung `a_x` wird initialisiert. Man speichert dann im *cell array object* und mittels Aufruf der einzelnen Zellen durch `{·}`, die jeweiligen partiellen Ableitungen.

In der Habilitationsschrift [99, Kapitel 3.3.2] findet sich eine Betrachtung von Unterprogrammen wieder, deren Ableitungen bekannt sind. Als Vergleich zu der in ADiMat generierten Datei `a_testfu(x,a_f)` im *reverse mode* soll der Vollständigkeit halber der vom *forward mode* genierte Code angegeben werden.

```

% Parameters:
% - dependents=f
% - independents=x
% - inputEncoding=ISO-8859-1
% - output-mode: plain
% - output-file: outputs/d_testfu.m
% - output-file-prefix:
% - output-directory: outputs
%
% Functions in this file: d_testfu, d_g
%

function [d_f f] = d_testfu(d_x, x)
    [d_u u] = d_g(d_x, x);
    d_tmpca1 = adimat_opdiff_epow_right(d_x, x, 2);
    tmpca1 = x .^ 2;
    d_f = adimat_opdiff_sum(d_u, d_tmpca1);
    f = u + tmpca1;
end

function [d_u u] = d_g(d_x, x)
    d_u = adimat_opdiff_mult_left(2, d_x, x);
    u = 2 * x;
end

```

Man sieht auf dem ersten Blick, dass `blued_testfu(d_x,x)` einen wesentlich kürzeren Quellcode besitzt als `bluea_testfu(x,a_f)`. Hierbei ist die *seed matrix* im ersten Inputargument mit `S=d_x` gegeben. Das zweite Argument `x` ist die Auswertungsstelle. Die Kompaktheit des im *forward mode* differenzierten Programms legt dessen Überlegenheit gegenüber dem *reverse mode* nahe, falls die Dimension  $n$  der Eingabevariable sich nicht wesentlich von der Dimension (bezeichnet mit  $m$ ) von  $f(\mathbf{x})$  unterscheidet. Falls jedoch  $n \gg m$  ist, empfiehlt es sich nach Kapitel 5.4.4 den *revers mode* zu verwenden.

Zum Abschluss der Betrachtungen zu dem AD-*tool* ADiMat soll noch in aller Kürze aufgezeigt werden, wie der von ADiMat differenzierte Code  $A'$  in MATLAB ausgeführt werden kann. Die durch den *forward mode* erzeugte Datei `d_testfu(d_x,x)` kann durch folgende Befehle aufgerufen werden (mit Hilfe des ADiMat *runtime environments*)

```

x = [1 2 3]; % Auswertungsstellen
adimat_derivclass('vector_directderivs'); % derivative class
d_x = createSeededGradientsFor(eye(3),[1 1 1]); % Initialisierung
[d_f f] = d_testfu(d_x,x); % Ausfuehren des Codes
f; % Funktionswert
J = admJacFor(d_f); % Jacobi Matrix

```

Im *reverse mode* ergibt sich für `a_testfu(x,a_f)` folgender Aufruf

```

x = [1 2 3]; % Auswertungsstellen
adimat_derivclass('opt_derivclass'); % derivative class
a_f = createSeededGradientsRev(eye(3),[1 1 1]); % Initialisierung
[a_x f] = a_testfu(x,a_f); % Ausfuehren des Codes

```

```
f; % Funktionswert
J = admJacRev(a_x); % Jacobi Matrix
```

**Bemerkung 5.4.4.** Die Generierung des neuen ADiMat Quellcode  $A'$  erfolgt in MATLAB durch das Senden des zu differenzierenden Programms an einen code transformation server. Dieser generiert den differenzierten Code  $A'$  und speichert diesen in einen anzugebenden Pfad unter der Funktion  $A'=\mathbf{a}_A$  ab (im Falle, dass der reverse mode verwendet wird). Mittels dem installierten runtime environment lässt sich das Programm  $A'$  ausführen. Der große Vorteil der Quellcodegenerierung besteht darin, dass nachdem  $A'$  generiert wurde, der generierte Code einfach aufgerufen werden kann.

**Bemerkung 5.4.5.** In ADiMat lassen sich dünnbesetzte Matrizen (sparsity patterns) mit der Option `opts.JPattern` effizienter lösen. Außerdem bietet ADiMat sowohl ein high level user interface zur Berechnung von Hesse Matrizen, Taylor Koeffizienten von Funktionen als auch Finite Differenzen Methoden zur Bestimmung von Ableitungen.

#### 5.4.7. AD für das Optimalsteuerproblem.

In diesem Abschnitt werden wir auf die Umsetzung des Optimierungsalgorithmus eingehen und aufzeigen, wie sich der Gradient der Zielfunktion in Algorithmus 1 (4) und (6g) berechnet. Der Gradient wird in unserem Algorithmus sowohl im BFGS Update (Algorithmus 1 (6i)) als auch im Falle des modifizierten Winkeltests (Algorithmus 1 (6b)) benötigt. Blicken wir zuerst auf das Zielfunktional, das wir in seiner diskreten Variante auf die Randsteuerung  $\mathbf{u}^b$  reduzieren.

Das Zielfunktional hat nach  $(P_b^{d,r})$  und nach Einführung eines Tensors der dritten Stufe  $\mathcal{R}$  die Gestalt

$$\begin{aligned}
f_{n_b}(\mathbf{u}^b) &= \tilde{\mathcal{J}}_{n_b}(\mathcal{R}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b), \mathbf{u}^b) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \tilde{w}_i \Delta t |\mathbf{r}^{j,i}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - \mathbf{r}_d^{j,i}|_2^2 \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i |\mathbf{r}^{N,i}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - \mathbf{r}_e^i|_2^2 + \frac{\alpha}{2} \mathbf{u}^{b\top} \mathbf{M} \mathbf{u}^b \\
&\quad - \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \tilde{w}_i \Delta t \ln(-\mathbf{g}_k(\mathbf{r}^{j,i}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))),
\end{aligned} \tag{5.53}$$

wobei  $n_p$  die Anzahl der Partikel darstellt und die Zielfunktion sowohl aus einer *tracking-type* Formulierung über das gesamte Zeitintervall als auch aus einer Endzeitbedingung für die Position der Partikel besteht. Wir schreiben  $\mathcal{R}$ , dessen Komponenten  $\mathcal{R}_{ijn}$  (Komponente zum  $i$ -ten Partikel, zum  $j$ -ten Zeitpunkt und zur  $n$ -ten Ortskomponenten von  $\mathbf{r}$ ) sind, in der Matrixschreibweise (5.54). Die Parameter  $\tilde{w}_i, \tilde{v}_i \geq 0, i = 1, \dots, n_p$ , stellen Gewichtungsfaktoren dar. Wir summieren einen Kontrollkostenterm mittels adäquat gewähltem Tychonov Parameter  $\alpha > 0$  hinzu. Dabei bestehen die jeweiligen Positionen der  $i$ -ten Partikel zum  $j$ -ten Zeitpunkt aus  $\mathbf{r}^{j,i} = (r_x^{j,i}, r_y^{j,i}, r_z^{j,i})^\top \in \mathbb{R}^3$ ,  $\mathbf{r}_d^{j,i} = ((r_d^{j,i})_x, (r_d^{j,i})_y, (r_d^{j,i})_z)^\top \in \mathbb{R}^3$  und  $\mathbf{r}_e^{j,i} = ((r_e^{j,i})_x, (r_e^{j,i})_y, (r_e^{j,i})_z)^\top \in \mathbb{R}^3$ , versehen mit Koordinaten  $\mathbf{x} = (x, y, z)^\top \in \mathbf{X}$ .

Die Lösungsvektor des Poisson Problems bezeichnen wir mit  $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^{n_s}$  gegeben durch  $\boldsymbol{\eta} = \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b$ . Den oben eingeführten Tensor dritter Stufe fassen wir im Folgenden

als

$$\mathcal{R} := \begin{pmatrix} r_x^{10} & \cdots & r_x^{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ r_x^{n_p 0} & \cdots & r_x^{n_p N} \\ r_y^{10} & \cdots & r_y^{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ r_z^{10} & \cdots & r_z^{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ r_z^{n_p 0} & \cdots & r_z^{n_p N} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{3n_p \times (N+1)} \quad (5.54)$$

auf. Es gilt nun die Form des Gradienten der reduzierten Formulierung  $f_{n_b}(\mathbf{u}^b)$  zu beschreiben. Hierbei geben wir an, an welcher Stelle das automatische Differenzieren (in Kapitel 5.4.1-5.4.6 beschrieben) uns bei der Findung der Ableitung weiterhilft und wie hierbei die Saatmatrix  $S$  (Kapitel 5.4.4) zu wählen ist. Abschließend werden wir einen Algorithmus zur Bestimmung des Gradienten, der für Algorithmus 1 benötigt wird, angeben. Zunächst bestimmt man die Richtungsableitung von  $f_{n_b}$  in Richtung  $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{n_b}$  und erhält

$$\begin{aligned} f'_{n_b}(\mathbf{u}^b)\mathbf{h} &= \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \Delta t \tilde{w}_i \left( (r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_x) r_x^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \right. \\ &\quad + (r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_y) r_y^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \\ &\quad \left. + (r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_z) r_z^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \right) \\ &+ \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i \left( (r_x^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_x) r_x^{iN'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \right. \\ &\quad + (r_y^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_y) r_y^{iN'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \\ &\quad \left. + (r_z^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_z) r_z^{iN'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h} \right) + \alpha \mathbf{u}^{b\top} \mathcal{M}\mathbf{h} \\ &+ \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \Delta t \tilde{w}_i \left( \frac{(g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_x r_x^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h}}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} \right. \\ &\quad + \frac{(g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_y r_y^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h}}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} \\ &\quad \left. + \frac{(g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_z r_z^{ij'}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{h}}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} \right) \end{aligned}$$

wobei  $r_x^{ij'}$  die Ableitung von  $\boldsymbol{\eta} \mapsto r_x^{ij}(\boldsymbol{\eta})$  darstellt, sodass  $r_x^{ij'} \in \mathbb{R}^{1 \times n_s}$ . Somit ergibt sich der Gradient der reduzierten Zielfunktion  $f_{n_b}(\mathbf{u}^b)$  zu

$$\begin{aligned}
\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}^b) = & \mathcal{B}^\top \mathcal{A}^{-\top} \left( \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \Delta t \tilde{w}_i \left( \nabla r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_x) \right. \right. \\
& + \nabla r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_y) \\
& \left. \left. + \nabla r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_z) \right) \right. \\
& + \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i \left( \nabla r_x^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_x^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_e^i)_x) \right. \\
& + \nabla r_y^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_y^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_e^i)_y) \\
& \left. \left. + \nabla r_z^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) (r_z^{iN}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b) - (r_e^i)_z) \right) \right. \\
& + \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \Delta t \tilde{w}_i \left( \frac{\nabla r_x^{ij} (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b)))_x}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b))} \right. \\
& \left. + \frac{\nabla r_y^{ij} (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b)))_y}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b))} + \frac{\nabla r_z^{ij} (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b)))_z}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1} \mathcal{B} \mathbf{u}^b))} \right) \left. \right) + \alpha \mathcal{M}^\top \mathbf{u}^b.
\end{aligned} \tag{5.55}$$

Wir berechnen den Gradienten von  $f_{n_b}(\mathbf{u}^b)$  durch die Durchführung der Schritte, die in Algorithmus 2 ausgeführt sind. Dabei leitet AD die in der Zielfunktion  $f_{n_b}(\mathbf{u}^b)$  stehende Position  $\mathbf{r}^{ij}$  der Partikel ab und generiert somit

$$\nabla r_x^{ij}(\boldsymbol{\eta}), \nabla r_y^{ij}(\boldsymbol{\eta}), \nabla r_z^{ij}(\boldsymbol{\eta}) \in \mathbb{R}^{n_s}, \quad i = 1, \dots, n_p, \quad j = 0, \dots, N,$$

wobei die linearen Terme von (5.40) per Hand im Stil von Kapitel 5.4.6 in den von ADiMat generierten Code eingefügt werden.

Bei der Berechnung der einzelnen Gradienten in Algorithmus 2 Schritt (3) muss ein besonderes Augenmerk auf die Bereitstellung der *seed matrix*, die von ADiMat benötigt wird, gelegt werden. Die mit ADiMat generierte Jacobi Matrix hat die Gestalt

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial r_x^{10}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial r_x^{10}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial r_x^{10}}{\partial \eta_{n_s}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial r_x^{1N}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial r_x^{1N}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial r_x^{1N}}{\partial \eta_{n_s}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial r_x^{n_p N}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial r_x^{n_p N}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial r_x^{n_p N}}{\partial \eta_{n_s}} \\ \frac{\partial r_y^{10}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial r_y^{10}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial r_y^{10}}{\partial \eta_{n_s}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial r_z^{n_p N}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial r_z^{n_p N}}{\partial \eta_2} & \cdots & \frac{\partial r_z^{n_p N}}{\partial \eta_{n_s}} \end{pmatrix},$$

mit Dimension  $\mathbb{R}^{3n_p(N+1) \times n_s}$ . Die Wahl der *seed matrix* ist daher von entscheidender Bedeutung. So initialisieren wir die *seed matrix*  $S$  durch

$$\begin{aligned}
S = & (a_{10}^S, \quad a_{21}^S, \quad \cdots, \quad a_{n_p N}^S, \quad b_{10}^S, \quad \cdots, \quad b_{n_p N}^S, \quad c_{10}^S, \quad \cdots, \quad c_{n_p N}^S) \\
& \in \mathbb{R}^{1 \times 3n_p(N+1)}
\end{aligned} \tag{5.56}$$

---

**Algorithmus 2** Bestimmung des Gradienten der reduzierten Zielfunktion
 

---

- (1) Bestimmung der Lösung der Poisson Gleichung:

$$\mathcal{A}\boldsymbol{\eta} = \mathcal{B}\mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_s}$$

mit konjugiertem Gradientenverfahren (siehe Kapitel 5.2.2).

- (2) Berechnen der Einträge von  $\mathcal{R}$ : Auswertung der Integrale. Verwendung des kompakten Support der ausgeschmierten Delta-Distribution führt mittels Boris Schema zur Bestimmung des Impulses und der Position der Partikel. Die Ausführung folgt dem Kapitel 5.2.3.
- (3) Setzen der *seed matrix*  $S$ , die durch (5.56) gegeben ist. Bestimmen der Gradienten

$$\nabla r_x^{ij}(\boldsymbol{\eta}), \nabla r_y^{ij}(\boldsymbol{\eta}), \nabla r_z^{ij}(\boldsymbol{\eta}) \in \mathbb{R}^{n_s}, \quad i = 1, \dots, n_p, \quad j = 0, \dots, N$$

mit dem *reverse mode* von ADiMat, wobei die Ableitung der linearen Bestandteile des Systems per Hand, wie in Kapitel 5.4.6 beschrieben, durchgeführt wird.

- (4) Bestimme

$$\begin{aligned} \mathbf{w} = & \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \Delta t \tilde{w}_i \left( \nabla r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_x) \right. \\ & + \nabla r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_y) \\ & \left. + \nabla r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_d^{ij})_z) \right) \\ & + \sum_{i=1}^{n_p} \tilde{v}_i \left( \nabla r_x^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_x^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_x) \right. \\ & + \nabla r_y^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_y^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_y) \\ & \left. + \nabla r_z^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (r_z^{iN}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) - (r_e^i)_z) \right) \\ & + \mu^H \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=0}^N \sum_{k=1}^m \Delta t \tilde{w}_i \left( \frac{\nabla r_x^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_x}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} \right. \\ & \left. + \frac{\nabla r_y^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_y}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} + \frac{\nabla r_z^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b) (g'_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b)))_z}{g_k(\mathbf{r}^{ij}(\mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\mathbf{u}^b))} \right) \end{aligned}$$

- (5) Berechnen der Adjungierten
- $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{n_s}$

$$\mathcal{A}^\top \mathbf{p} = \mathbf{w} \in \mathbb{R}^{n_s}$$

mittels konjugiertem Gradientenverfahren.

- (6) Bestimme

$$\nabla f_{n_b}(\mathbf{u}^b) = \mathcal{B}^\top \mathbf{p} + \alpha \mathcal{M}^\top \mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_b},$$

mit symmetrischer Randmassenmatrix  $\mathcal{M}$  und Tikhonov Parameter  $\alpha > 0$ .

wobei die einzelnen Komponenten sich schreiben lassen als

$$\begin{aligned} a_{ij}^S &= \Delta t \tilde{w}_i \left( (r_x^{ij} - (r_d^{ij})_x) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_x}{g_k(\mathbf{r}^{ij})} \right) & \text{für } i = 1, \dots, n_p, \quad j = 0, \dots, N-1 \\ b_{ij}^S &= \Delta t \tilde{w}_i \left( (r_y^{ij} - (r_d^{ij})_y) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_y}{g_k(\mathbf{r}^{ij})} \right) & \text{für } i = 1, \dots, n_p, \quad j = 0, \dots, N-1 \\ c_{ij}^S &= \Delta t \tilde{w}_i \left( (r_z^{ij} - (r_d^{ij})_z) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_z}{g_k(\mathbf{r}^{ij})} \right) & \text{für } i = 1, \dots, n_p, \quad j = 0, \dots, N-1, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} a_{iN}^S &= \tilde{w}_i \Delta t \left( (r_x^{iN} - (r_d^i)_x) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_x}{g_k(\mathbf{r}^{iN})} \right) + \tilde{v}_i (r_x^{iN} - (r_e^i)_x) \quad \forall i = 1, \dots, n_p \\ b_{iN}^S &= \tilde{w}_i \Delta t \left( (r_y^{iN} - (r_d^i)_y) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_y}{g_k(\mathbf{r}^{iN})} \right) + \tilde{v}_i (r_y^{iN} - (r_e^i)_y) \quad \forall i = 1, \dots, n_p \\ c_{iN}^S &= \tilde{w}_i \Delta t \left( (r_z^{iN} - (r_d^i)_z) + \mu^H \sum_{k=1}^m \frac{\nabla(g_k)_z}{g_k(\mathbf{r}^{iN})} \right) + \tilde{v}_i (r_z^{iN} - (r_e^i)_z) \quad \forall i = 1, \dots, n_p. \end{aligned}$$

Damit berechnet sich die  $k$ -te Komponente,  $k \in \{1, \dots, 3n_p(N+1)\}$  der Jacobi Matrix  $J$  in Richtung der Saatmatrix  $S \in \mathbb{R}^{1 \times 3n_p(N+1)}$  als

$$\begin{aligned} (SJ)_k &= a_{10} \frac{\partial r_x^{10}}{\partial \eta_k} + a_{20} \frac{\partial r_x^{20}}{\partial \eta_k} + \dots + a_{n_p N} \frac{\partial r_x^{n_p N}}{\partial \eta_k} \\ &+ b_{10} \frac{\partial r_y^{10}}{\partial \eta_k} + b_{20} \frac{\partial r_y^{20}}{\partial \eta_k} + \dots + b_{n_p N} \frac{\partial r_y^{n_p N}}{\partial \eta_k} \\ &+ c_{10} \frac{\partial r_z^{10}}{\partial \eta_k} + c_{20} \frac{\partial r_z^{20}}{\partial \eta_k} + \dots + c_{n_p N} \frac{\partial r_z^{n_p N}}{\partial \eta_k}. \end{aligned}$$

Man berechnet in Schritt (4) zur Bestimmung des Gradienten, den Vektor  $\mathbf{w}$  in MATLAB in der AD typischen Notation wie folgt

$$\mathbf{w} = (SJ)^\top.$$

Die *seed matrix*  $S$  beinhaltet in unserer Implementation sowohl die Konstanten, die in der Zielfunktion vorhanden sind, als auch die Werte, die durch das Nachdifferenzieren der einzelnen Terme entstehen. Bei Verwendung verschiedener Zielfunktionale müssen Schritt (3) und (4) (Algorithmus 2) angepasst werden. In unserem Algorithmus werden die Schritte (3) und (4) von dem von ADiMat generierten Code vollständig übernommen, sodass wir durch Bereitstellung der *seed matrix*  $S$  den Vektor  $\mathbf{w}$  durch AD geliefert bekommen.

Der in Algorithmus 2 verwendete *reverse mode* hat den Vorteil, dass zur Berechnung des Produkts  $S \cdot J \in \mathbb{R}^{1 \times n_s}$  in jeder einzelnen von ADiMat berechneten elementaren Operation mit Vektoren gerechnet und multipliziert wird (und nicht mit Matrizen). Dies ist mit der Dimension der Outputvariablen des Zielfunktionswertes, begründet (und der Vorgehensweise des *reverse mode* siehe hierzu Kapitel 5.4.4), die eindimensional ist. Die große Dimension der Steuervektors  $\mathbf{u}^b \in \mathbb{R}^{n_b}$  im Vergleich zu der Dimension der Zielfunktion führt deshalb dazu, dass der *forward mode* keine Alternative darstellt.

### 5.5. Initialisierung der numerischen Beispiele.

Das von uns implementierte primale BFGS-Innere-Punkte-Verfahren (angegeben in Algorithmus 1) soll nun an drei Beispielen studiert werden. Hierbei variieren wir sowohl die Anfangssteuerung  $\mathbf{u}_0$  als auch die gewünschte Bahntrajektorie bzw. den gewünschten Endzustand des Partikels. Wir betrachten ein Partikel. Somit wird  $n_p = 1$  gesetzt.

Das Gebiet  $\Omega$  ist ein regelmäßiges Hexaeder, der im Ursprung  $(0,0,0)^\top$  zentriert ist, mit einer Kantenlänge von  $9 \cdot 10^{-1}$  m. Als inneres Gebiet  $\tilde{\Omega}$ , indem die Partikelbahnen liegen, wird ebenfalls ein Würfel mit Kantenlänge  $6 \cdot 10^{-2}$  m gewählt. Die jeweils gesetzte Endzeit beträgt  $T = 2 \cdot 10^{-10}$  s, wobei als gleichmäßige Zeitschrittweite  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-12}$  s gewählt wurde. Wir verwenden als bewegtes Partikel

im Gebiet  $\tilde{\Omega}$  ein Elektron, für das in Tabelle 5.2 dessen Werte sich ablesen lassen. Die Initiierung dieser Werte findet in Algorithmus 1 (1b) statt.

Physik. Konstanten & Werte	Symbol	Wert (in SI Einheiten)
Lichtgeschwindigkeit (im Vakuum)	$c$	$2.9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Permittivität (im Vakuum)	$\epsilon$	$8.8541 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
Permeabilität (im Vakuum)	$\mu$	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$
Ruhemasse Elektron	$m_0^q$	$9.1093 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Elektrische Ladung Elektron	$q$	$1.6021 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

TABELLE 5.2. Physikalische Konstanten.

Die Anzahl der unbekanntenen Steuervariablen  $\mathbf{u}$  beträgt  $n_b = 7504$ , was der Anzahl der Randpunkte unseres Gebietes  $\Omega$  entspricht. Die Gitterpunktanzahl ergibt sich zu  $n_s = 17576$  und ist so gewählt, dass die BFGS-Matrix  $H \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b}$  ohne Ausnutzung von *limited memory modifications* (so z.B. das L-BFGS Update von Jorge Nocedal [81]) auf einem Computer mit 4GB RAM Arbeitsspeicher aufgestellt werden kann. Aufgrund der Wahl der Randdaten  $\mathbf{u}$  als Steuervariablen, erhält man eine signifikante Reduktion der Anzahl der Optimierungsvariablen. Diese Variablen sind unabhängig von der Zeit mit einem auf dem Rand  $\Gamma$  begrenzten Träger.

Wir lösen  $(P_b^d)$  in seiner auf  $\mathbf{u}$  reduzierten Formulierung  $(P_b^{d,r})$ . Die Parameter  $c_1, c_2$  im globalisierten BFGS Verfahren (Algorithmus 1 (6)) für den modifizierten Winkeltest setzen wir auf  $c_1 = 9 \cdot 10^{-3}$  und  $c_2 = 1 \cdot 10^6$ . Als Schrittweituensuche wurde die Armijo-Regel implementiert.

Bei der Berechnung des Gradienten der reduzierten Zielfunktion (Algorithmus 2) wurde ein Hybrid-Ansatz verwendet. Hierbei wurde darauf geachtet, die nichtlinearen Bestandteile mit ADiMat ableiten zu lassen. Die linearen Komponenten sowohl der Steuerungs- und Barriereterm in der Zielfunktion als auch die jeweiligen Terme in der reduzierten Formulierung des Zustandssystems wurden per Hand abgeleitet.

Dies betrifft insbesondere die Terme des Zustandssystems, in denen die Hexaedern bestimmt werden, in denen sich das Partikel zu dem momentanen Zeitpunkt  $t$  befindet. Außerdem von ADiMat ausgenommen ist der interative Löser der Poisson Gleichung (Algorithmus 2 (1)). Der so entstehende Gradient der reduzierten Zielfunktion wurde mittels zentralen Finiten-Differenzen-Ansatzes verifiziert.

Die adjungierte Gleichung ergibt sich somit aus Algorithmus 2 (5). Die so entstehende diskrete Gleichung (unter Verwendung des Ansatzes: *first discretize then optimize*) ist für eine weitere Untersuchung ein interessantes Objekt, einerseits mit der Fragestellung, ob sie sich als diskretes Schema der adjungierten Zustandsgleichungen (4.108), (4.109) des KKT-Systems aus Theorem 4.6.34 interpretieren lässt. Andererseits steht eine genauere Untersuchung der Konsistenz und der Stabilität des adjungierten Boris Schema aus, was im Rahmen dieser Arbeit nicht bewerkstelligt wird.

## 5.6. Numerische Resultate.

Die von uns im Folgenden vorgestellten numerischen Resultate wurden mit den *Open Source Programmen* Blender und ParaView visualisiert. Im Besonderen ist die Software Blender [53], ausgestattet mit einer Python Schnittstelle, ein nützliches Tool zur Erstellung von Videos der optimierten Partikelbahnen, welche sich in Abhängigkeit der berechneten Magnetfelder ergeben. Wir verwenden hingegen

ParaView [101] zur Darstellung des äußeren Magnetfelds, das sich aufgrund der Optimierungsvariable - der Randsteuerung - einstellt.

### 5.6.1. Testbeispiel 1: Vorgegebener Endzustand.

Um einer vorgegebenen Position  $\mathbf{r}_e$  eines Partikels zum Endzeitpunkt  $T$  möglichst nahe zukommen, verwenden wir in unserem Zielfunktional untenstehende Terme

$$\mathcal{J}_1(\mathbf{r}) \equiv 0, \quad \mathcal{J}_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}|\mathbf{r} - \mathbf{r}_e|_2^2.$$

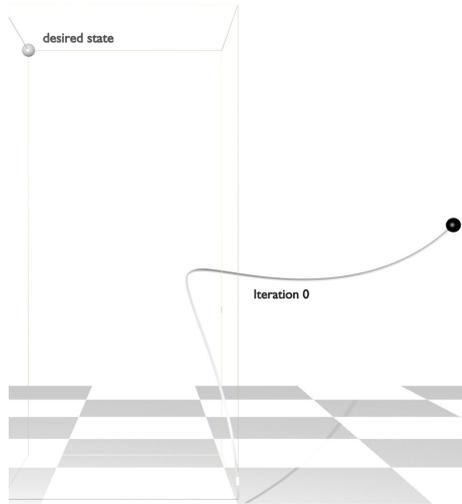


ABBILDUNG 5.5. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 0.

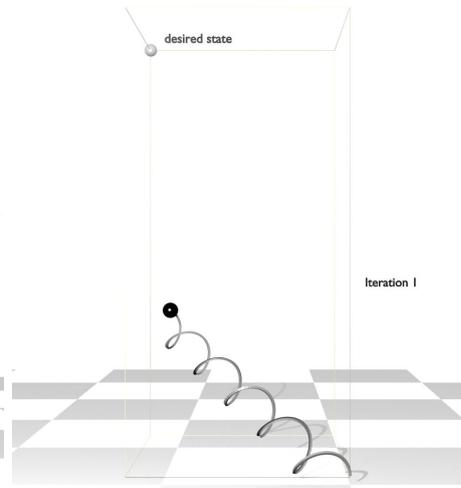


ABBILDUNG 5.6. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 1.

Als Tikhonov Parameter setzen wir  $\alpha = 1 \cdot 10^{-9}$  und als weitere Gewichtungparameter in der Zielfunktion  $\tilde{\nu} = 1 \cdot 10^{-2}$ . Der Homotopie Parameter hat zu Beginn des BFGS-Innere-Punkte Verfahrens den Wert  $\mu_0^H = 1 \cdot 10^2$ . Der von uns implementierte Algorithmus 1 bricht nach 47 Optimierungsiterationen und nach Unterschreiten der Toleranz  $tol_2$  von  $1 \cdot 10^{-8}$  in der Norm des Gradienten ab.

Die Abbildungen 5.5-5.10 geben den Verlauf der Partikelbahn, nach der jeweils angegebenen Optimierungsiteration, wieder. In den Bildern ist das Elektron mit einem schwarzen Punkt markiert, die angestrebte Endposition  $\mathbf{r}_e$  ist als grauer Punkt dargestellt. Da die Steuerung unseres Optimierungsproblems die Randdaten der Poisson Gleichung sind, mittels deren Lösung  $\eta$  (skalares, magnetisches Potential) sich das äußere Magnetfeld  $\mathbf{b} = \nabla\eta$  bestimmen lässt, hat die Änderung der Randsteuerung keinen Einfluss auf die Geschwindigkeit des Partikels.

Wie in der Gleichung für die Lorentzkraft (3.14) ersichtlich wird, steht das Magnetfeld  $\mathbf{b}$  senkrecht auf der Geschwindigkeit  $\boldsymbol{\beta}$ , sodass die einzige Möglichkeit des Partikels den Zielzustand  $\mathbf{r}_e$  zu erreichen darin besteht, sich auf spiralförmigen Bahnen dem *desired state* zu nähern. Dieses Verhalten der Partikelbahnen ist in den Abbildungen 5.5-5.10 deutlich zu erkennen. In Optimierungsiteration 47 beträgt der Abstand zwischen der Elektronenposition und dem gewünschten Zustand in der euklidischen Norm

$$|\mathbf{r}^N - \mathbf{r}_e|_2 = 3.5 \cdot 10^{-8} \text{ m, relativer Fehler von : } 5.8 \cdot 10^{-6}.$$

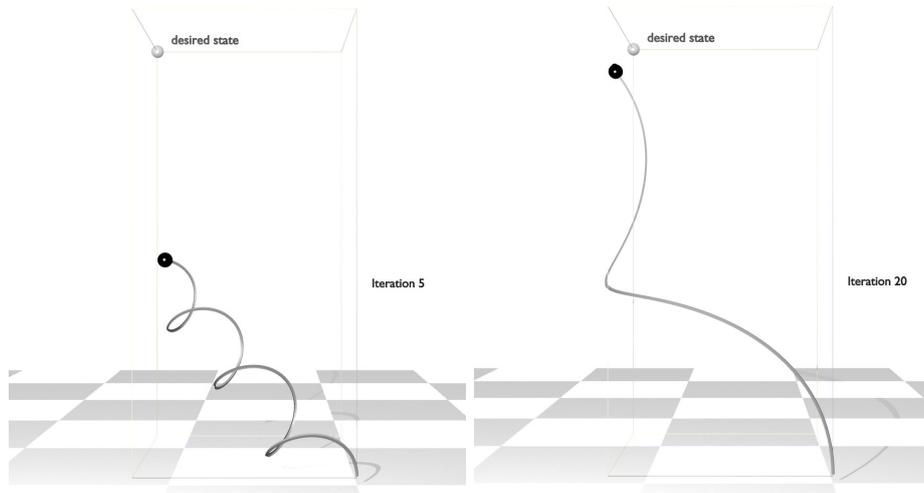


ABBILDUNG 5.7. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 5.

ABBILDUNG 5.8. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 20.

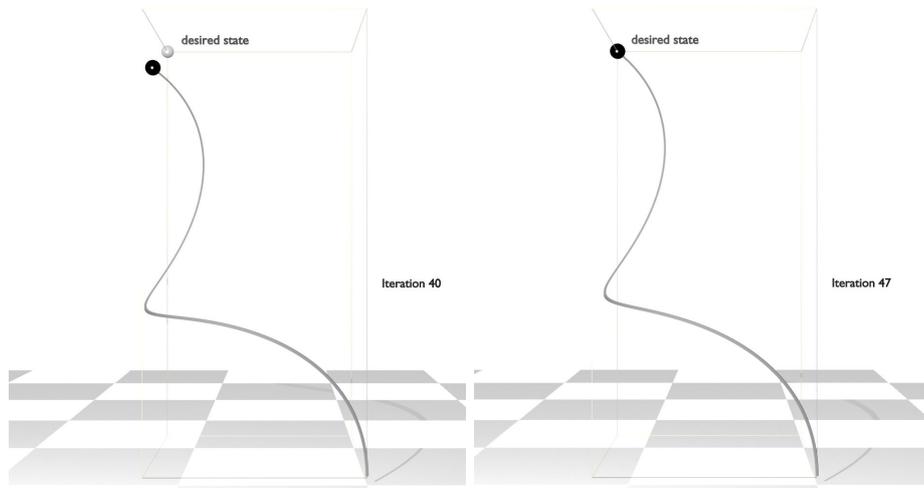


ABBILDUNG 5.9. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 40.

ABBILDUNG 5.10. Testbeispiel 1: Partikelbahn zur Optimierungsiteration 47.

Im Vergleich hierzu beträgt der Abstand vor der ersten Optimierungsiteration  $|\mathbf{r}^N - \mathbf{r}_e|_2 = 6.2 \cdot 10^{-3}$  m. Darüber hinaus stellen die Abbildungen 5.11 und 5.12 das optimale (nach 47 Iterationen), externe Magnetfeld der Übersichtlichkeit halber nur auf dem Rand von  $\Omega$  dar, das durch die Steuerung  $u$  generiert wird. Die Normalenkomponente des Magnetfeldes ist stetig nach Kapitel 3.2. Hierzu sei nochmals angemerkt, dass in Kapitel 4.8 gezeigt wurde, dass sich das Magnetfeld zwar divergenzfrei fortsetzen lässt jedoch nicht rotationsfrei. So lassen sich die Magnetfeldlinien auf dem Rand  $\Gamma$ , die in den Abbildungen 5.11 und 5.12 zu sehen sind, von

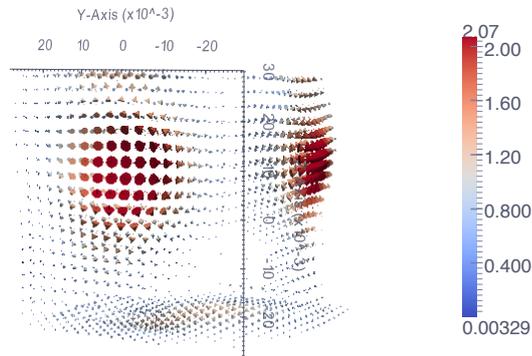


ABBILDUNG 5.11. Testbeispiel 1: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld.

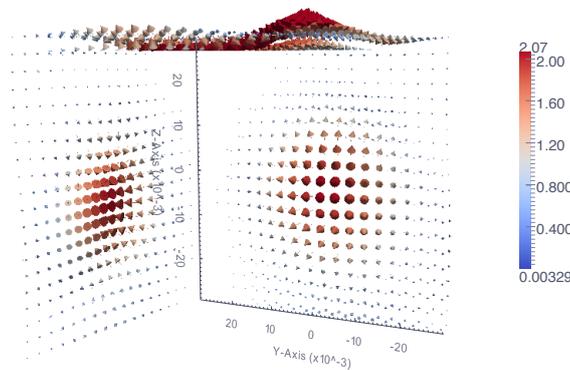


ABBILDUNG 5.12. Testbeispiel 1: Rückansicht auf das externe Magnetfeld.

unserem Standpunkt aus als Magnetfeld eines Oberflächenstroms (mit einer dazugehörigen Flächenstromdichte  $\mathbf{K}$ , siehe Kapitel 4.8, Bemerkung 4.8.5) interpretieren. Die Tangentialkomponente des Magnetfeldes ist auf dem Rand nicht stetig und ergibt sich bei dem Übergang zwischen zweier unterschiedlicher Media zu  $\mathbf{K} \times \mathbf{n}$  mit äußerer Normale  $\mathbf{n}$  (siehe hierfür Kapitel 3.2). Damit ist die Steuervariable physikalisch betrachtet ein Flächenstrom auf dem Rand des Rechengebiets, wobei das Feld in Abbildungen 5.11 und 5.12 der Flächenstromdichte  $\mathbf{K}$  entspricht.

Iteration	F-Wert	Gradient	Schritt	Iteration	F-Wert	Gradient	Schritt
0	0.3835	-	-	35	0.0060	1.7E-5	BFGS
1	0.1509	0.0024	Grad	40	1.6E-5	1.7E-5	Grad
5	0.0748	6.0E-4	BFGS	42	9.9E-8	6.0E-6	BFGS
10	0.0091	2.6E-4	BFGS	44	4.0E-8	2.7E-7	BFGS
20	0.0086	2.3E-4	Grad	46	2.5E-9	1.4E-8	BFGS
25	0.0064	6.0E-5	BFGS	47	6.1E-10	5.4E-9	BFGS
30	0.0061	3.9E-5	BFGS				

TABELLE 5.3. Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 1.

Außerdem präsentieren wir in Tabelle 5.3 den Konvergenzverlauf des globalisierten BFGS-Innere-Punkte-Verfahrens. Aufgetragen sind sowohl die Iterationsanzahl des Verfahrens als auch der Verlauf des Zielfunktionswertes (F-Wert). In der dritten Spalte geben wir in der euklidischen Norm den Gradient an. Des Weiteren wird die vom Verfahren jeweils gewählte Abstiegsrichtung angegeben. Hierbei steht "Grad" für den negativen Gradienten als Richtung und "BFGS" für die Quasi-Newton Suchrichtung. Der Barriereterm in der Zielfunktion trägt dazu bei, dass das Elektron im inneren des Gebietes  $\tilde{\Omega}$  gehalten wird, aufgrund der übermäßigen Erhöhung und Gewichtung der Werte - mittels der log-Funktion - in den Randbereichen.

### 5.6.2. Testbeispiel 2: Vorgegebene Trajektorie und Endzustand.

In einem zweiten Beispiel setzen wir die Zielfunktionsterme auf

$$\mathcal{J}_1(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2}|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_d(t)|_2^2, \quad \mathcal{J}_2(\mathbf{r}(T)) = \frac{1}{2}|\mathbf{r}(T) - \mathbf{r}_e|_2^2.$$

Dies ist der Versuch sowohl eine vorgegebene Bahntrajektorie als auch eine gewünschte Endposition eines Partikels zu erreichen. Dies stellt sich jedoch in der Praxis als sehr diffizil heraus.

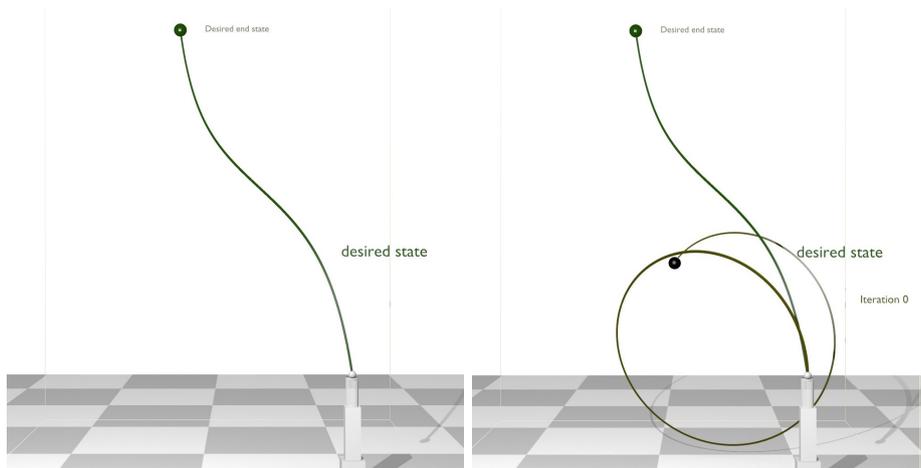


ABBILDUNG 5.13. Testbeispiel 2: Initialisierung der vorgegebenen Trajektorie.

ABBILDUNG 5.14. Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 0.

Der Tikhonov Parameter verbleibt auf dem Wert  $\alpha = 1 \cdot 10^{-9}$ . Hingegen werden die Gewichtungsfaktoren auf  $\tilde{w} = 1 \cdot 10^8$  und  $\tilde{v} = 1 \cdot 10^{-2}$  gesetzt und der Homotopie Parameter auf  $\mu_0^H = 5 \cdot 10^2$ . Die Abbildung 5.13 zeigt den vorgegebenen *desired state* sowohl  $\mathbf{r}_d$  als auch  $\mathbf{r}_e$ . Die vorgegebene Bahntrajektorie  $\mathbf{r}_d(t)$  ist in den ersten beiden Komponenten durch eine passend skalierte arctan-Funktion gegeben und die dritte Komponente wird durch eine lineare Funktion beschrieben

$$\mathbf{r}_d(t) = \begin{pmatrix} -1.25 \cdot 10^{-3} - 1 \cdot 10^{-3} \arctan\left(\frac{2}{1.6 \cdot 10^{-3}}(2.5 \cdot 10^7 t - 2.5 \cdot 10^{-3})\right) \\ -1.25 \cdot 10^{-3} - 1 \cdot 10^{-3} \arctan\left(\frac{2}{1.5 \cdot 10^{-3}}(2.5 \cdot 10^7 t - 2.5 \cdot 10^{-3})\right) \\ 2.5 \cdot 10^7 t \end{pmatrix}.$$

It.	F-Wert	Gradient	Schritt	It.	F-Wert	Gradient	Schritt
0	2.55E-01		Init	42	1.44E-02	9.80E-06	BFGS
1	6.91E-02	1.19E-03	Grad	43	1.44E-02	1.19E-05	BFGS
2	6.02E-02	9.40E-04	BFGS	44	1.43E-02	2.27E-05	BFGS
3	6.01E-02	5.21E-04	BFGS	45	1.38E-02	6.13E-05	BFGS
4	5.98E-02	6.04E-04	BFGS	46	5.63E-03	7.16E-05	BFGS
5	5.97E-02	5.47E-04	BFGS	47	3.89E-03	2.58E-04	BFGS
6	5.96E-02	6.01E-04	BFGS	48	1.92E-03	2.45E-04	BFGS
7	5.88E-02	4.70E-04	BFGS	49	1.17E-04	1.21E-04	BFGS
8	5.84E-02	5.84E-04	BFGS	50	7.55E-05	6.67E-05	Grad
9	5.64E-02	3.21E-04	BFGS	51	6.69E-05	2.84E-05	BFGS
10	5.51E-02	5.14E-04	Grad	52	6.35E-06	3.67E-05	BFGS
11	5.47E-02	2.34E-04	BFGS	53	5.11E-06	1.54E-05	Grad
12	5.21E-02	4.08E-04	BFGS	54	4.23E-06	1.48E-05	BFGS
13	5.19E-02	1.37E-04	BFGS	55	3.18E-06	1.43E-05	BFGS
14	5.18E-02	1.50E-04	BFGS	56	3.13E-06	5.06E-06	BFGS
15	5.18E-02	1.32E-04	BFGS	57	3.13E-06	5.52E-06	BFGS
16	5.18E-02	1.37E-04	BFGS	58	3.12E-06	5.12E-06	BFGS
17	5.17E-02	1.35E-04	BFGS	59	3.05E-06	5.72E-06	BFGS
18	5.17E-02	1.51E-04	BFGS	60	2.91E-06	5.07E-06	Grad
19	5.15E-02	1.31E-04	BFGS	61	2.03E-06	1.14E-05	BFGS
20	5.08E-02	1.59E-04	Grad	62	9.82E-07	5.50E-06	BFGS
21	4.25E-02	1.38E-04	BFGS	63	5.95E-07	5.44E-06	BFGS
22	4.07E-02	7.71E-04	BFGS	64	5.25E-07	2.51E-06	BFGS
23	3.90E-02	1.91E-04	BFGS	65	5.21E-07	5.61E-07	BFGS
24	3.31E-02	7.58E-04	BFGS	66	5.21E-07	1.26E-07	BFGS
25	3.00E-02	1.55E-04	BFGS	67	5.21E-07	3.94E-08	BFGS
26	2.58E-02	6.04E-04	BFGS	68	5.21E-07	2.92E-08	BFGS
27	2.20E-02	1.40E-04	BFGS	69	5.21E-07	2.86E-08	BFGS
28	2.01E-02	4.01E-04	BFGS	70	5.21E-07	2.91E-08	Grad
29	1.65E-02	2.01E-04	BFGS	71	5.21E-07	1.34E-07	BFGS
30	1.53E-02	1.43E-04	Grad	72	5.20E-07	1.41E-07	BFGS
31	1.47E-02	1.80E-04	BFGS	73	5.14E-07	3.17E-07	BFGS
32	1.45E-02	8.87E-05	BFGS	74	2.82E-07	9.02E-07	BFGS
33	1.44E-02	2.98E-05	BFGS	75	2.58E-07	1.22E-06	BFGS
34	1.44E-02	7.57E-06	BFGS	76	8.09E-08	2.660E-06	BFGS
35	1.44E-02	4.45E-06	BFGS	77	1.61E-08	7.98E-07	BFGS
36	1.44E-02	4.24E-06	BFGS	78	1.54E-08	5.76E-07	BFGS
37	1.44E-02	4.21E-06	BFGS	79	1.25E-08	4.41E-07	BFGS
38	1.44E-02	4.26E-06	BFGS	80	1.21E-08	1.66E-07	Grad
39	1.44E-02	4.32E-06	BFGS	81	1.21E-08	2.31E-08	BFGS
40	1.44E-02	4.31E-06	Grad	82	1.21E-08	8.64E-09	BFGS
41	1.44E-02	4.53E-06	BFGS				

TABELLE 5.4. Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 2.

Man beachte, dass obige Darstellung von  $\mathbf{r}_d(t)$  durch das Zeitintervall (da  $t \in [0\text{ s}, 2 \cdot 10^{-10}\text{ s}]$ ) bedingt wird. Der Endzeitzustand  $\mathbf{r}_e$  ist gegeben durch

$$\mathbf{r}_e = \begin{pmatrix} -2.51 \cdot 10^{-3} \\ -2.52 \cdot 10^{-3} \\ 5.00 \cdot 10^{-3} \end{pmatrix}.$$

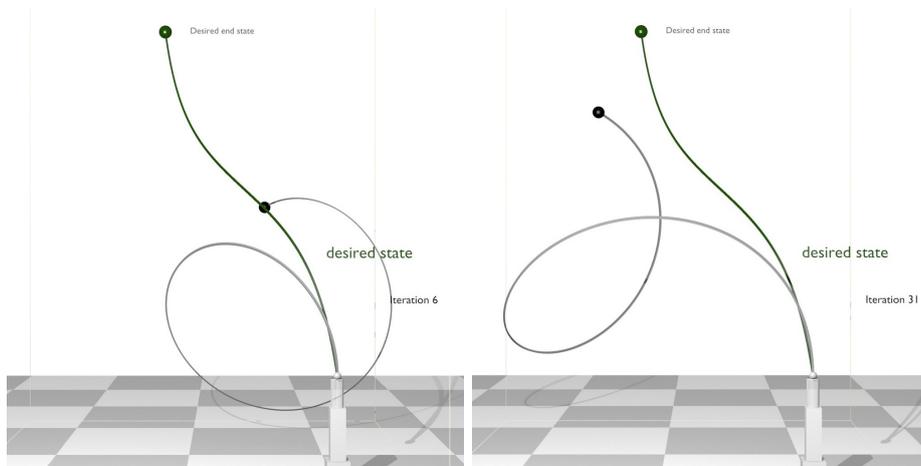


ABBILDUNG 5.15. Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 6.

ABBILDUNG 5.16. Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 31.

Die Abbildungen 5.14-5.18 geben den Iterationsverlauf des Optimierungsalgorithmus von der 0ten Iteration bis zur 81ten Iteration wieder. Die spiralförmigen Bahnen sind wie in Kapitel 5.6.1 zu interpretieren.

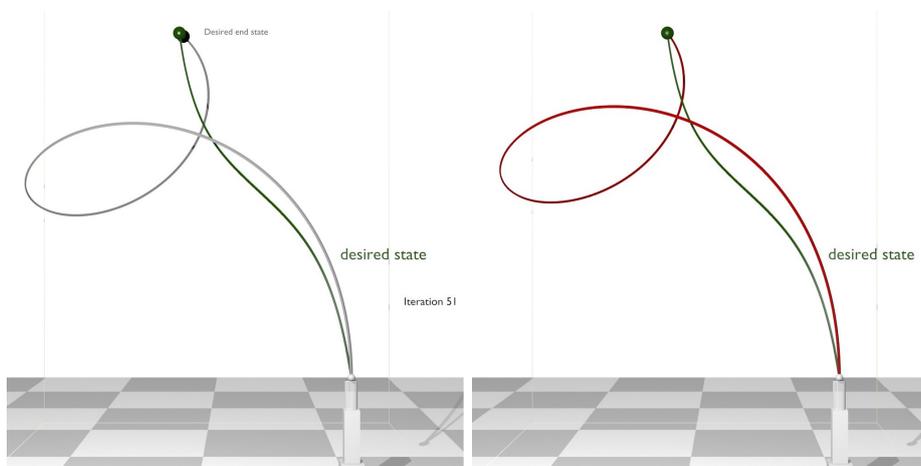


ABBILDUNG 5.17. Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 51.

ABBILDUNG 5.18. Testbeispiel 2: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 81.

Der Vollständigkeit halber wird in Tabelle 5.4 die Konvergenzhistorie aufgezeigt, in der offensichtlich wird, dass man mit dem Optimierungsalgorithmus 1 eine deutliche Reduzierung des Zielfunktionswerts erzielt unter häufiger Zuhilfenahme der berechneten Quasi-Newton Suchrichtung.

Dieses gewählte Beispiel zeigt sehr deutlich auf, dass man zwar den Endzeitzustand  $\mathbf{r}_e(T)$  mit einer Genauigkeit von  $2.6 \cdot 10^{-9}$  m (in der euklidischen Norm gemessen) erreicht, der vorgegebene Zustand  $\mathbf{r}_d(t)$  wird dabei nicht in einem ausreichenden

Maße von der berechneten Partikelbahn abgedeckt:

$$\max_{j \in \{0, \dots, N\}} |\mathbf{r}^j - \mathbf{r}_d^j|_2 = 1.32 \cdot 10^{-3} \text{ m.}$$

Die numerisch berechnete Trajektorie dreht sich um die Bahn  $\mathbf{r}_d(t)$  in einer Spiral um  $\mathbf{r}_e$  zu erreichen. Dieses Beispiel verdeutlicht, dass sowohl das Lösen dieses Problems sehr stark von dem vorgegebenen Anfangsimpuls  $\mathbf{p}_0$  und Anfangsrandsteuerung  $\mathbf{u}_0$  abhängt als auch von der damit verbundenen Erreichbarkeit der vorgegebenen Trajektorie. Der globalisierte BFGS-Innere-Punkte Algorithmus erzielt zuerst ab Iteration 46 (siehe Tabelle 5.4) wesentliche Verbesserungen im Zielfunktionswert.

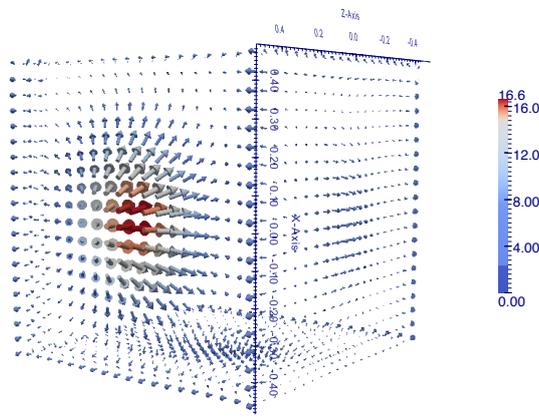


ABBILDUNG 5.19. Testbeispiel 2: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld.

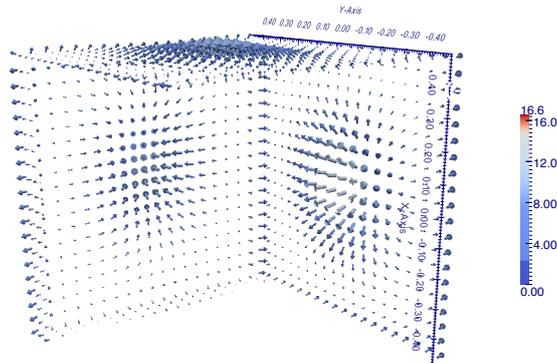


ABBILDUNG 5.20. Testbeispiel 2: Rückansicht auf das externe Magnetfeld.

Die Trajektorie des Elektrons in Abbildung 5.18 in der linken Hälfte nähert sich dem Rand des inneren Gebiets  $\tilde{\Omega}$  an. Durch eine Erhöhung der Magnetfeldstärke, welche in Abbildung 5.19 in diesem Teilgebiet deutlich wird, wird das Partikel vom Rand abgelenkt. Die Magnetfeldstärken, die in den restlichen Bereichen in den Abbildungen 5.19 und 5.20 dargestellt sind, sind auffallend geringer. Die Magnetfeldlinien auf dem Rand deuten wieder auf einen Oberflächenstrom hin (siehe hierzu die Beschreibung in Kapitel 4.8 und Kapitel 5.6.1). Die Anfangskonfiguration des Magnetfelds ist in Abbildung 5.21 und Abbildung 5.22 gegeben. Der Unterschied zu den Abbildungen 5.19 und 5.20 ist ersichtlich. Die Korrelation zwischen Trajektorie

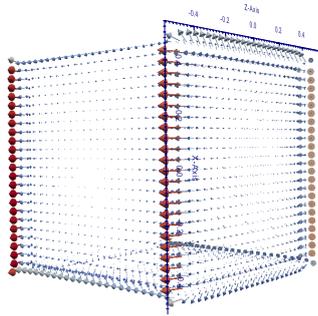


ABBILDUNG 5.21. Anfangskonfiguration: Frontalansicht auf das externe Magnetfeld.

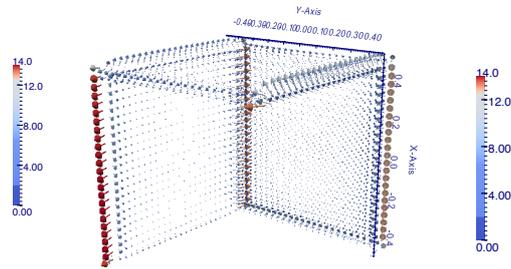


ABBILDUNG 5.22. Anfangskonfiguration: Rückansicht auf das externe Magnetfeld.

des Partikels und Magnetfeld, die Lorentzkraft, nimmt deutlichen Einfluss auf den Verlauf der Trajektorie.

### 5.6.3. Testbeispiel 3: Vorgegebene erreichbare Trajektorie.

Um die Verfahrensweise von Algorithmus 1 an einem weiteren Beispiel zu demonstrieren, wählen wir

$$\mathcal{J}_1(\mathbf{r}(t)) = \frac{1}{2} |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_d(t)|_2^2, \quad \mathcal{J}_2(\mathbf{r}(T)) \equiv 0.$$

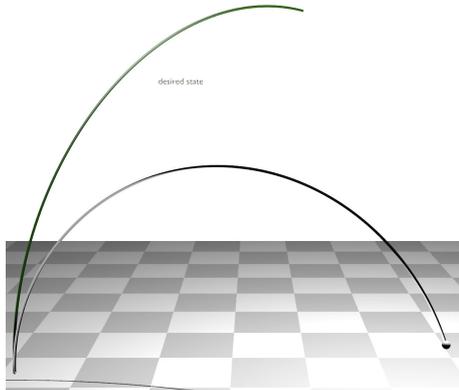


ABBILDUNG 5.23. Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 0.

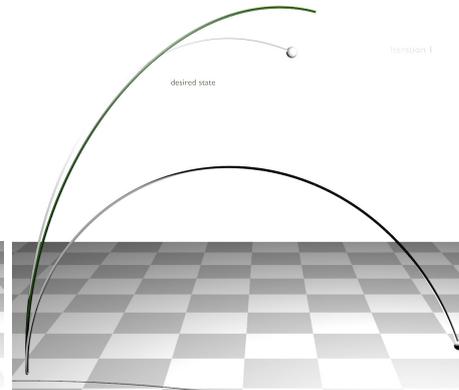


ABBILDUNG 5.24. Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 1.

Als wesentlicher Unterschied zur Initialisierung von Testbeispiel 2 in Kapitel 5.6.2, wird der vorgegebene Zustand  $\mathbf{r}_d(t)$  durch eine quadratische Funktion in den Komponenten erzeugt. Der Zustand  $\mathbf{r}_d$  hat die Form

$$\mathbf{r}_d(t) = \begin{pmatrix} -8.5 \cdot 10^6 t - 5.5 \cdot 10^{16} t^2 \\ -8.5 \cdot 10^6 t - 5.5 \cdot 10^{16} t^2 \\ 6.4 \cdot 10^7 t - 2 \cdot 10^{17} t^2 \end{pmatrix}.$$

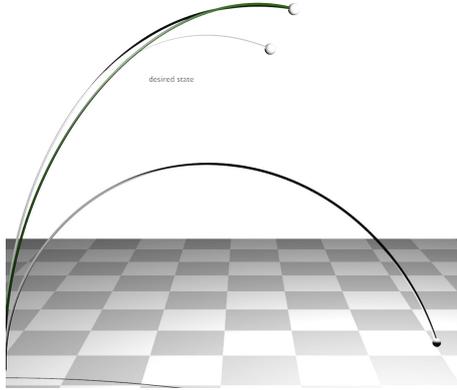


ABBILDUNG 5.25. Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 21.

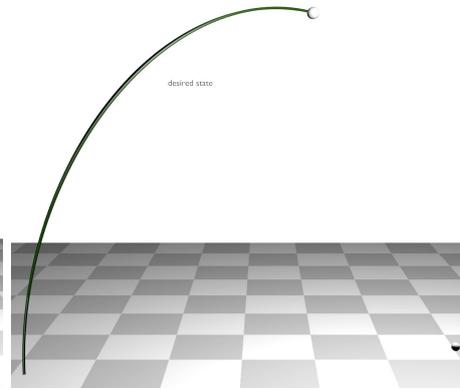


ABBILDUNG 5.26. Testbeispiel 3: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 51.

It.	IA.	F-Wert	Gradient	Schritt	It.	IA.	F-Wert	Gradient	Schritt
0	–	0.41	–	–	26	14	3,06E-06	2,97E-07	Grad
1	7	1,49E-02	6,35E-03	Grad	27	11	3,06E-06	2,78E-07	Grad
2	15	1,10E-02	1,89E-03	BFGS	28	10	3,06E-06	2,96E-07	BFGS
3	11	1,03E-02	1,63E-03	BFGS	29	11	3,05E-06	5,61E-07	Grad
4	13	7,81E-03	1,62E-03	Grad	30	7	2,64E-06	1,03E-06	BFGS
5	12	1,94E-03	1,40E-03	BFGS	31	13	2,17E-06	1,71E-05	BFGS
6	13	1,13E-03	7,16E-04	BFGS	32	14	1,21E-06	1,09E-05	BFGS
7	14	7,51E-05	5,49E-04	BFGS	33	11	3,42E-07	6,65E-06	BFGS
8	14	1,47E-05	1,22E-04	BFGS	34	17	2,33E-07	5,99E-06	BFGS
9	13	1,30E-05	2,70E-05	BFGS	35	14	1,58E-07	4,92E-06	BFGS
10	14	5,57E-06	3,88E-05	Grad	36	13	1,37E-07	2,13E-06	BFGS
11	13	4,73E-06	8,59E-06	BFGS	37	13	1,15E-07	2,78E-06	BFGS
12	14	3,65E-06	1,23E-05	BFGS	38	13	1,07E-07	1,59E-06	BFGS
13	13	3,40E-06	2,76E-06	BFGS	39	14	8,12E-08	3,45E-06	BFGS
14	13	3,32E-06	3,92E-06	BFGS	40	13	6,98E-08	6,76E-07	BFGS
15	14	3,13E-06	5,69E-06	BFGS	41	14	5,35E-08	2,37E-06	BFGS
16	13	3,11E-06	1,26E-06	BFGS	42	13	3,98E-08	4,93E-07	BFGS
17	13	3,10E-06	1,84E-06	BFGS	43	13	3,04E-08	1,44E-06	BFGS
18	14	3,07E-06	2,59E-06	BFGS	44	8	2,34E-08	1,42E-06	BFGS
19	13	3,07E-06	6,51E-07	BFGS	45	8	2,33E-08	1,65E-07	Grad
20	14	3,06E-06	8,53E-07	Grad	46	14	2,33E-08	1,98E-08	BFGS
21	13	3,06E-06	3,38E-07	Grad	47	14	2,33E-08	6,11E-09	BFGS
22	13	3,06E-06	3,67E-07	BFGS	48	13	2,33E-08	4,65E-09	BFGS
23	14	3,06E-06	4,67E-07	Grad	49	13	2,33E-08	4,65E-09	BFGS
24	13	3,06E-06	2,82E-07	BFGS	50	13	2,33E-08	4,67E-09	BFGS
25	13	3,06E-06	3,01E-07	BFGS	51	11	2,33E-08	4,61E-09	BFGS

TABELLE 5.5. Konvergenzverlauf des Optimierungsalgorithmus von Beispiel 3.

Die Optimierungsparameter sind wie folgt gewählt

$$\text{Gewichtungsfaktor : } \tilde{w} = 1 \cdot 10^8,$$

$$\text{Homotopie Parameter : } \mu_0^H = 1 \cdot 10^3,$$

$$\text{Tikhonov Parameter : } \alpha = 5 \cdot 10^{-9}.$$

Die gewünschte Bahntrajektorie wird von dem implementierten Algorithmus nach 51 Iteration mit der von uns vorgegebenen Genauigkeit erreicht bzw. aufgrund der Tatsache, dass kein nennenswerter Fortschritt bei der Zielfunktion passiert und somit die Toleranzschranke  $\text{tol}_1$  unterschritten wird. Die Abbildungen 5.23-5.26 zeigen die verschiedenen Bahntrajektorien in grauer Farbe. Der vorgegebene Zustand wird in diesen Abbildungen durchgehenden mit grüner Farbe gekennzeichnet. Nach 51 Iterationen beträgt die Abweichung zwischen der numerisch berechneten Bahntrajektorie und dem vorgegebenen Zustand  $\mathbf{r}_d$

$$\max_{j \in \{0, \dots, N\}} |\mathbf{r}^j - \mathbf{r}_d|_2 = 1.18 \cdot 10^{-6} \text{ m.}$$

Dieser Wert kennzeichnet die größte Differenz in der euklidischen Norm über den gerechneten Zeithorizont. (Zum Vergleich erhält man vor der ersten Optimierungsiteration:  $\max_{j \in \{0, \dots, N\}} |\mathbf{r}^j - \mathbf{r}_d|_2 = 1.23 \cdot 10^{-3} \text{ m.}$ ) Um einen besseren Überblick über den Fortschritt der Iterationen zu erhalten verbleiben die berechneten Trajektorien in den fortlaufenden Bildern. In Tabelle 5.5 sind neben der Iterationsanzahl (It.), dem Funktionswert (F-Wert), dem Gradienten, der gewählten Suchrichtung auch die jeweilige Armijo-Iterationsanzahl (IA.) aufgelistet. Eine erhebliche Reduzierung des Zielfunktionswertes wird aus der Tabelle 5.5 deutlich und die ebenso sehr häufige Durchführung der BFGS Abstiegsrichtung. Auch ist zu erkennen, dass die globale Version des BFGS Algorithmus in den ersten 15 Iterationen den Abstand zur vorgegebenen Trajektorie enorm verringert und eine gute Approximation liefert. Nach 50 ausgeführten Optimierungsiterationen gibt es keine größere Veränderung der berechneten Trajektorie des Partikels. Es sei des Weiteren angemerkt, dass eine Berechnung von  $\mathbf{w}$ , der *seeded Jacobian matrix*, in Schritt (3) und (4) von Algorithmus 2 in jeder Iteration zwischen 20-30 s in Anspruch nimmt (bei einer Jacobi Matrix von Dimension  $\mathbb{R}^{1206 \times 17576}$ , ohne Ausnutzung von Dünnbesetztheitsstrukturen) und unter Verwendung folgender Hardware:

<b>Modellname:</b>	iMac, OS X Yosemite, Version 10.10.1
<b>Prozessor:</b>	2,5 GHz Intel Core i5
<b>Speicher:</b>	4GB 1333 MHz DDR3
<b>Grafikkarte:</b>	AMD Radeon HD 6750M 512 MB

Die in den Kapiteln 5.6.1-5.6.3 vorgestellten Ergebnisse betrafen ein Partikel, genauer ein Elektron, aus einem Bündel von Partikel. Die Implementation des Algorithmus ist jedoch auf eine beliebige Anzahl  $n_p$  an Partikel ausgelegt. Dies wollen wir abschließend für den Fall  $n_p = 2$  kurz demonstrieren.

#### 5.6.4. Ergebnisse für zwei Partikel.

Im Folgenden wurde von uns der Optimierungsalgorithmus 1 mit  $n_p = 2$  gestartet. Die Initialisierung und Anfangsdaten entsprechen ansonsten dem Setting aus Kapitel 5.6.1.

Hierbei werden die beiden Partikel zum Zeitpunkt  $t = 0$  um  $1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$  versetzt in das Magnetfeld eingebracht. Die Partikelbahnen sind in hellgrau, die Partikel in schwarz und der vorgegebene Endzustand in grün in den Abbildungen 5.27-5.30 dargestellt. Die Abbildungen 5.27-5.30 zeigen den Iterationsverlauf der Optimierung von der 0ten bis zur 50ten Iteration. Dabei drehen sich teilweise die Trajektorien der beiden Partikel um die jeweilige Nachbartrajektorie. Der Unterschied zwischen dem vorgegebenen Zustand und den berechneten Lösungen in Abbildung 5.30 verringert sich in den nachfolgenden Iterationen nicht mehr wesentlich. Man beachte, dass die Randdaten  $u$  als Steuerung dienen. Das durch  $u$  induziert externe Magnetfeld wird

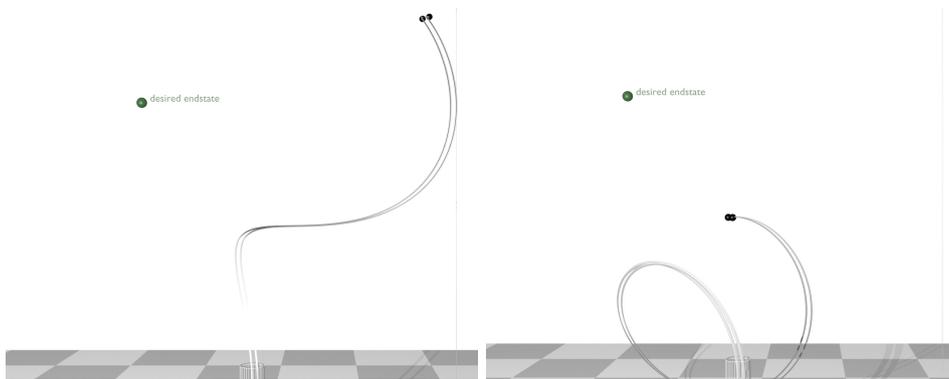


ABBILDUNG 5.27. Zwei Partikel: Vorgegebene Endposition und Iteration 0.

ABBILDUNG 5.28. Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 10.

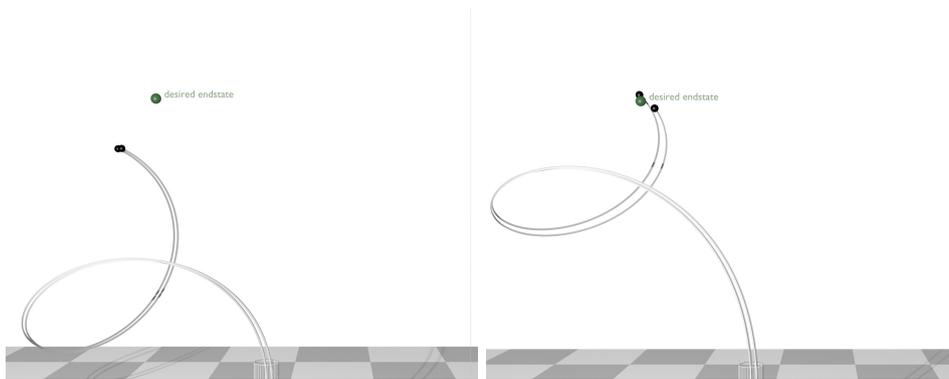


ABBILDUNG 5.29. Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 40.

ABBILDUNG 5.30. Zwei Partikel: Partikelbahn nach Optimierungsiteration 50.

deshalb i.A. nicht in der Lage sein die beiden Partikel im vorgegebenen Punkt exakt zusammenzuführen.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Am Ende der Arbeit wollen wir die von uns gewonnenen Erkenntnisse und Ergebnisse zusammenfassen. Des Weiteren zeigen wir Anknüpfungspunkte und mögliche, interessante, weiterführende Forschungsmöglichkeiten auf, die sich im Laufe der Bearbeitung der Maxwell-Newton-Lorentz Gleichungen im Kontext der optimalen Steuerung ergeben haben.

### 6.1. Zusammenfassung der wichtigsten Resultate.

In der Dissertation wurden die hyperbolischen Maxwell Gleichungen in Kopplung mit den relativistischen Newton-Lorentz Bewegungsgleichungen studiert. In Form des sogenannten Abraham Modells und unter Hinzufügung der Poisson Gleichung mit Dirichlet Randdaten und Zustandsbeschränkungen an die Position des Partikels wurde das so entstandene Optimalsteuerproblem ( $\tilde{P}$ ) diskutiert.

Folgt man der chronologischen Reihenfolge der Arbeit, so befasst sich Kapitel 3 mit den physikalischen Grundgleichungen, den Maxwell und relativistischen Newton-Lorentz Gleichungen und deren Kopplung. In Kapitel 4 tritt, nach Einführung der einzelnen Komponenten des Zustandssystems und der Aufstellung des Optimalsteuerproblems in Kapitel 4.2, die Lösbarkeit der unterschiedlichen Gleichungen in Kapitel 4.3 in den Vordergrund. Die Existenz einer (milden) Lösung der Maxwell Gleichung (4.16) wird mittels Halbgruppentheorie bewiesen, wobei mit dem *Theorem von Stone* die Existenz einer Lösung der adjungierten Maxwell Gleichung bewiesen werden kann (Theorem 4.3.26). Die (sehr schwache) Lösbarkeit der Poisson Gleichung (4.27) wird mit standardmäßigen Techniken in Theorem 4.3.29 gezeigt. Mit Einführung des Zustandssystems Operators  $e$  wird das Optimalsteuerproblem in (P) exakt formuliert (Kapitel 4.4.1) und in Theorem 4.4.5 die eindeutige Lösbarkeit des reduzierten Zustandssystems bewiesen. Hierbei gehen als Steuerung des Optimalsteuerproblems die Randdaten der Poisson Gleichung ein.

In Kapitel 4.5 findet sich der Beweis der Existenz globaler, optimaler Lösungen von (P) wieder, woraufhin in Kapitel 4.6 zunächst die Fréchet-Differenzierbarkeit der reduzierten Form  $e$  gezeigt wird und darauf aufbauend die adjungierten Gleichungen für die adjungierten Partikelpositionen und Impulse hergeleitet werden (Theorem 4.6.32). Schlussendlich bestimmen wir in Theorem 4.6.34 die KKT-Bedingungen zu (P).

Im weiteren Verlauf der Arbeit steht in Kapitel 5 das numerische Lösen von (P) an erster Stelle. Als Lösung der Maxwell Gleichungen wurden die sogenannten Liénard-Wiechert Felder verwendet und als Diskretisierungsschema für die ODE wurde das aus der Teilchenphysik stammende Boris Schema implementiert. Die zu lösende Poisson Gleichung wird mittels CG-Verfahren behandelt. Durch die zusätzliche Implementierung eines Innere-Punkte Verfahrens wird die Zustandsbeschränkung an die Partikelposition mitberücksichtigt und somit der Verbleib des Partikels im Inneren von  $\tilde{\Omega}$  sichergestellt. Mit Verwendung des Ansatzes *first discretize, then optimize* und der reduzierten Formulierung des Zielfunktionals wurde der Optimierungsalgorithmus 1 entwickelt. Mit diesem globalisierten BFGS-Innere-Punkte Verfahren wird die diskrete Version von (P) gelöst, wobei die numerischen Resultate, in Kapitel 5.5 und 5.6 vorgestellt, sowohl eine sehr deutliche Annäherung an die vorgegebene Zustände zeigen als auch physikalisch sinnvolle Resultate liefern. Als ein wesentlicher Baustein in der Implementierung ist das *Automatische Differenzieren*

(Kapitel 5.4) zu nennen, das im Kontext der Optimalensteuerung sich als sinnvolle Hilfe erweist. Vor allem der *reverse mode* von (AD) spielt hier seine Stärken aus.

## 6.2. Ausblick.

Als weiterführende Arbeit bietet sich für das unendlichdimensionale Optimierungsproblem (P) die Bestimmung von Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung (SSC) an. Eine, aufgrund der Komplexität der KKT-Bedingungen, fordernde Aufgabe. Auch erscheint es sinnvoll, ausgehend von den erhaltenen numerischen Ergebnissen, den Aspekt der Zeitoptimalität mit in die Problemstellung aufzunehmen. Man würde somit nicht nur unter dem Gesichtspunkt - eine vorgegebene Trajektorie möglichst genau zu erreichen - optimieren, sondern dies auch mit einem möglichst minimalen Zeitaufwand erreichen wollen.

Bei der numerischen Umsetzung erscheint der Ansatz einer Modellreduktion mittels *proper orthogonal decomposition* (POD) als sinnvoll. Darüber hinaus wäre eine Anbindung der Maxwell Gleichungen mit Hilfe eines DG-Maxwell Löser von Dr. S. Schnepf (Institut für Geophysik, ETH Zürich) ein nächster Schritt. Die optimale Steuerung von Bündeln, bestehend aus hunderten oder auch tausende von Partikeln, kann hierbei als Zielstellung genannt werden.

## A Anmerkungen zur Halbgruppentheorie

Wir geben nun weitere fundamentale Definitionen und Theoreme der Halbgruppentheorie an, entnommen aus [85] und [88, Kapitel 12].

Betrachten wir folgendes inhomogenes Cauchy Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t}(t) &= \mathcal{A}w(t) + f(t), \quad t > 0 \\ w(0) &= w_0 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

mit Inhomogenität  $f : ]0, T[ \rightarrow X$ . Hierbei sei  $X$  ein Banachraum und  $\mathcal{A}$  ein linearer Operator von  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset X \rightarrow X$  und Anfangsdaten  $w_0 \in X$ . Wir nennen eine Funktion  $w : [0, T[ \rightarrow X$  eine klassische Lösung von (A.1) auf  $[0, T[$ , falls  $w \in C([0, T[; X) \cap C^1(]0, T[; X)$ ,  $w(t) \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ ,  $0 < t < T$  und (A.1) erfüllt ist. Wir führen die Bezeichnung  $\mathcal{D}(\mathcal{A})$  für die Domäne des Operators ein, und die wir wie folgt definieren

**Definition A.0.1.** Wir nennen die Parameterfamilie  $\mathcal{G}(t)$ ,  $0 \leq t < \infty$  eine **Halbgruppe** beschränkter linearer Operatoren von  $X$  nach  $X$  falls

- (i)  $\mathcal{G}(0) = I$  (Identitätsoperator auf  $X$ )
- (ii)  $\mathcal{G}(t+s) = \mathcal{G}(t)\mathcal{G}(s)$  für jedes  $t, s \geq 0$

Wir nennen  $\mathcal{G}(t)$  gleichmäßig stetig, falls

$$\lim_{t \downarrow 0} \|\mathcal{G}(t) - I\|_X = 0.$$

Der lineare Operator  $\mathcal{A}$  ist gegeben durch

$$\mathcal{D}(\mathcal{A}) := \left\{ x \in X : \text{Der Grenzwert } \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathcal{G}(t)x - x}{t} \text{ existiert in } X \right\}$$

und

$$\mathcal{A}x := \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathcal{G}(t)x - x}{t} \quad \text{für } x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$$

heißt **infinitesimaler Generator** der Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)$ , und  $\mathcal{D}(\mathcal{A})$  bezeichnet die **Domäne** von  $\mathcal{A}$ .

Eine **stark stetige Halbgruppe** oder  $C_0$  **Halbgruppe** ist eine Familie,  $\mathcal{G} = \{\mathcal{G}(t) : t \in \mathbb{R}_+\}$  von beschränkten linearen Operatoren von  $X$  nach  $X$  falls

$$\lim_{t \downarrow 0} \mathcal{G}(t)x = x \quad \text{für jedes } x \in X \text{ bzgl. der Norm auf } X.$$

**Bemerkung A.0.2.**

- (i) Ein linearer Operator  $\mathcal{A}$  ist der infinitesimale Generator einer gleichmäßig stetigen Halbgruppe genau dann, wenn  $\mathcal{A}$  beschränkt ist.
- (ii) Sei  $\mathcal{G}(t)$  eine gleichmäßig stetige Halbgruppe linear, beschränkter Operatoren. Dann existiert ein eindeutiger linear, beschränkter Operator  $\mathcal{A}$  mit  $\mathcal{G}(t) = e^{At} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathcal{A})^n}{n!}$ .

**Theorem A.0.3.** Sei  $\mathcal{G}(t)$  eine  $C_0$ -Halbgruppe. Dann existieren Konstanten  $\omega \geq 0$  und  $M \geq 1$  sodass folgende Abschätzung in der Operatornorm gilt

$$\|\mathcal{G}(t)\|_{\mathcal{L}(X, X)} \leq Me^{\omega t} \quad \text{für } 0 \leq t < \infty. \quad (\text{A.2})$$

**Bemerkung A.0.4.** Falls  $M = 1$  und  $\omega = 0$  gilt, dann nennt man  $\mathcal{G}(t)$  eine  $C_0$ -Halbgruppe von **Kontraktionen**.

**Theorem A.0.5.** Sei  $\mathcal{G}(t)$  eine  $C_0$ -Halbgruppe und  $\mathcal{A}$  deren infinitesimaler Generator. Dann haben folgende Behauptungen ihre Gültigkeit

(i) Für jedes beliebige  $x \in X$  gilt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \int_t^{t+h} \mathcal{G}(s)x \, ds = \mathcal{G}(t)x.$$

(ii) Sei  $x \in X$  gegeben, dann gilt

$$\int_0^t \mathcal{G}(s)x \, ds \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \text{ und } \mathcal{A} \left( \int_0^t \mathcal{G}(s)x \, ds \right) = \mathcal{G}(t)x - x.$$

(iii) Sei  $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$  gegeben, dann gilt

$$\mathcal{G}(t)x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \quad \frac{d}{dt} \mathcal{G}(t)x = \mathcal{A}\mathcal{G}(t)x = \mathcal{G}(t)\mathcal{A}x.$$

(iv) Sei  $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$ , dann gilt

$$\mathcal{G}(t)x - \mathcal{G}(s)x = \int_t^s \mathcal{G}(\tau)\mathcal{A}x \, d\tau = \int_t^s \mathcal{A}\mathcal{G}(\tau)x \, d\tau.$$

**Korollar A.0.6.** Sei  $\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator einer  $C_0$ -Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)$ , dann ist die Domäne von  $\mathcal{A}$  dicht in  $X$  und  $\mathcal{A}$  ein abgeschlossener, linearer Operator.

**Definition A.0.7.** Wir nennen die Parameterfamilie  $\mathcal{G}(t)$ ,  $-\infty < t < \infty$ , von beschränkten linearen Operatoren in einem Banachraum  $X$  ein  $C_0$ -Gruppe, falls folgende Bedingungen erfüllt sind

- (i)  $\mathcal{G}(0) = I$  (Identitätsoperator auf  $X$ )
- (ii)  $\mathcal{G}(t+s) = \mathcal{G}(t)\mathcal{G}(s)$  für  $-\infty < t, s < \infty$
- (iii)  $\lim_{t \rightarrow 0} \mathcal{G}(t)x = x$   $x \in X$  in der  $X$ -Norm.

Der infinitesimale Generator  $\mathcal{A}$  einer  $C_0$ -Gruppe  $\mathcal{G}(t)$  ist definiert durch

$$\mathcal{A}x := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\mathcal{G}(t)x - x}{t} \quad \text{für } x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \text{ falls der Grenzwert existiert.} \quad (\text{A.3})$$

Dann ist die Domäne von  $\mathcal{A}$  gegeben als Menge aller Elemente  $x \in X$  für die der Grenzwert (A.3) existiert.

**Bemerkung A.0.8.** Betrachten wir die  $C_0$ -Gruppe von beschränkten Operatoren  $\mathcal{G}(t)$  in  $X$ , so ist

$$\mathcal{A} \text{ der infinitesimale Generator der } C_0\text{-Halbgruppe } \mathcal{G}(t) \text{ mit } t \geq 0$$

und

$$-\mathcal{A} \text{ der infinitesimale Generator der } C_0\text{-Halbgruppe } \mathcal{G}(-t) \text{ mit } t \geq 0.$$

Umgekehrt gilt, falls  $\mathcal{A}$  bzw.  $-\mathcal{A}$  die infinitesimalen Generatoren der  $C_0$  Halbgruppen  $\mathcal{G}(t), t \geq 0$  und  $\mathcal{G}(-t), t \geq 0$  sind, dann ist  $\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator der  $C_0$  Gruppe  $\mathcal{G}(t), -\infty < t < \infty$ .

**Definition A.0.9.** Ein linearer Operator  $\mathcal{A}$  heißt dissipativ, falls für jedes  $x \in \mathcal{D}(\mathcal{A})$  ein  $x^*$  in der dualen Menge  $F(x) := \{x^* : x^* \in X^*, \langle x, x^* \rangle_{X, X^*} = \|x\|_X^2 = \|x^*\|_{X^*}^2\}$  existiert, sodass  $\text{Re}\langle \mathcal{A}x, x^* \rangle \leq 0$ .

**Lemma A.0.10.** Der lineare Operator  $\mathcal{A}$  ist genau dann dissipativ wenn

$$\|(\lambda I - \mathcal{A})x\| \geq \lambda \|x\| \quad \forall x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}), \lambda > 0$$

gilt.

Im Folgenden definieren wir die duale Halbgruppe. Sei  $\mathcal{G}(t), t \geq 0$  eine  $C_0$  Halbgruppe auf  $X$ .

**Definition A.0.11.** Wir nennen  $\mathcal{A}^*$  den **adjungierten Operator** zu dem (unbeschränkten) Operator  $\mathcal{A}$ , der wiederum ein linearer Operator von  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \subset X^*$  nach  $X^*$  ist und wie folgt definiert ist. Sei

$$\langle x^*, \mathcal{A}x \rangle = \langle y^*, x \rangle \quad \forall x \in \mathcal{D}(\mathcal{A}). \quad (\text{A.4})$$

Nach Korollar A.0.6 ist die Domäne von  $\mathcal{A}$  dicht in  $X$  und somit existiert höchstens ein  $y^* \in X^*$ , das (A.4) erfüllt. Dann ist die Abbildung

$$\mathcal{A}^* : X^* \supset \mathcal{D}(\mathcal{A}^*) \ni x^* \rightarrow y^* \in X^*$$

der adjungierte Operator zu  $\mathcal{A}$ .

**Korollar A.0.12.** Sei  $\mathcal{A}$  ein dichter, abgeschlossener und linearer Operator. Falls  $\mathcal{A}$  und  $\mathcal{A}^*$  dissipativ sind, dann ist  $\mathcal{A}$  der infinitesimale Generator einer  $C_0$ -Halbgruppe von Kontraktionen auf  $X$ .

**Definition A.0.13.** Sei  $\mathcal{G}(t), t \geq 0$  eine  $C_0$ -Halbgruppe. Dann nennen wir die Parameterfamilie  $\mathcal{G}^* = \{\mathcal{G}^*(t) : t \in \mathbb{R}_+\}$  die durch  $\mathcal{A}^*$  generierte adjungierte Halbgruppe von  $\mathcal{G}(t)$ .

Die Halbgruppeneigenschaft von  $\mathcal{G}(t)^*, t \geq 0$  ist durch die Definition eines adjungierten Operators sichergestellt. Im Allgemeinen muss jedoch  $\mathcal{G}(t)^*, t \geq 0$  keine  $C_0$ -Halbgruppe mehr sein.

**Bemerkung A.0.14.** Es gilt: Falls  $\mathcal{A}$  ein dichter, abgeschlossener Operator in  $X$  ist, dann ist die Domäne  $\mathcal{D}(\mathcal{A}^*)$  dicht in  $X^*$ .

Dies führt uns zu folgenden wesentlichen Resultat, welches die benötigte Eigenschaft der adjungierten Halbgruppe für reflexive Banachräume sicherstellt.

**Korollar A.0.15.** Sei  $X$  ein reflexiver Banachraum und  $\mathcal{G}(t)$  eine  $C_0$ -Halbgruppe auf  $X$  mit infinitesimalen Generator  $\mathcal{A}$ . Die adjungierte Halbgruppe  $\mathcal{G}(t)^*$  von  $\mathcal{G}(t)$  ist eine  $C_0$ -**Halbgruppe** auf  $X^*$ , deren infinitesimaler Generator  $\mathcal{A}^*$  ist.

Für Hilberträume können wir nun das zentrale Resultat angeben, das wir für die Existenz des Generators  $\mathcal{A}$  und dessen adjungierten Generators  $\mathcal{A}^*$  benötigen, den **Satz von Stone**, der in Theorem 4.3.3 wiedergegeben wird. Hierzu benötigen wir die Definition

**Definition A.0.16.** Sei  $H$  ein Hilbertraum. Wir nennen  $\mathcal{A}$  **selbst-adjungiert** falls  $\mathcal{A} = \mathcal{A}^*$ . Einen beschränkten Operator  $\mathcal{B}$  in  $H$  bezeichnen wir als **unitär**, falls  $\mathcal{B}^* = \mathcal{B}^{-1}$ .

Man findet folgende Existenzaussage für das inhomogene Cauchy Anfangswertproblem in [85] von Pazy, Seite 103ff.

**Korollar A.0.17.** Sei die rechte Seite  $f \in L^1(0, T; X)$  gegeben, dann gibt es zu jedem  $w_0 \in X$  höchstens eine Lösung des Anfangswertproblems (A.1). Falls eine Lösung existiert, dann lässt sie sich wie folgt schreiben

$$w(t) = \mathcal{G}(t)w_0 + \int_{s=0}^t \mathcal{G}(t-s)f(s) ds.$$



## B Anmerkungen zu Funktionen von beschränkter Variation

Die Anmerkungen zu BV-Funktionen sind den Büchern [38, Kapitel 2.1] und [68, Kapitel 2.6] entnommen.

**Definition B.0.1** (Raum der Funktionen mit beschränkter Variation). *Wir bezeichnen den Raum*

$$\text{BV}([0, T]; \mathbb{R}) := \{b : [0, T] \rightarrow \mathbb{R} : \|b\|_{\text{BV}} := |b(0)| + \text{var}(b, [0, T]) < \infty\}$$

*als den Raum der Funktionen mit beschränkter Variation, wobei*

$$\text{var}(b, [0, T]) := \sup_{P \in \mathcal{P}} \left\{ \sum_{i=1}^n |b(t_i) - b(t_{i-1})| : n \in \mathbb{N}, 0 = t_0 < t_1 < \dots < t_n = T \right\}$$

mit  $\mathcal{P} := \{P = \{t_0, \dots, t_n\} : P \text{ ist Partition von } [0, T]\}$  die Menge aller Partitionen. Dann sei  $\text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k) := \underbrace{\text{BV}([0, T]; \mathbb{R}) \times \dots \times \text{BV}([0, T]; \mathbb{R})}_{k\text{-mal}}$  der Produktraum.

**Lemma B.0.2** (Eigenschaften von BV-Funktionen).

Sei  $b \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R})$ . Dann gilt:

(i) Die Variation von  $b$  auf  $[t_1, t_3]$  hat die Eigenschaft

$$\text{var}(b, [t_1, t_3]) = \text{var}(b, [t_1, t_2]) + \text{var}(b, [t_2, t_3]) \quad \text{für } 0 \leq t_1 < t_2 < t_3 \leq T.$$

(ii) Es existieren  $b_+(t)$  und  $b_-(t)$  mit

$$\begin{aligned} b_+(t) &:= \lim_{\epsilon \searrow 0} b(t + \epsilon) & 0 \leq t < T, \\ b_-(t) &:= \lim_{\epsilon \searrow 0} b(t - \epsilon) & 0 < t \leq T. \end{aligned}$$

(iii) Die Regularität von  $b$  ist  $L^\infty([0, T]; \mathbb{R})$  mit höchstens abzählbar vielen Unstetigkeitsstellen.

**Definition B.0.3** (Absolut stetige Funktionen).

Wir bezeichnen  $a : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  als absolut stetige Funktion, falls es zu jedem  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  gibt mit, so dass

$$\sum_{i=0}^n |\beta_i - \alpha_i| < \delta \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=0}^n |a(\beta_i) - a(\alpha_i)| < \epsilon$$

für jede endliche Familie  $\{(\alpha_i, \beta_i) : i = 0, \dots, n\} \subset [0, T]$  von paarweise disjunkten Teilintervallen. Die Menge dieser absolut stetigen Funktionen nennt man  $\text{AC}([0, T]; \mathbb{R})$ .

**Bemerkung B.0.4** (Ergänzung: Eigenschaften von BV-Funktionen).

(i) Für jede Unstetigkeitsstelle existiert der links- und rechtsseitige Grenzwert.

(ii) Die Ableitung einer BV-Funktion existiert fast überall in  $]0, T[$  und das Integral  $\int_0^T \dot{b}(t) dt$  ist wohldefiniert.

(iii) Jede BV-Funktion  $b$  kann auf folgende Art und Weise dargestellt werden

$$b(t) = b_a(t) + b_d(t) + b_s(t).$$

Die Funktion von beschränkter Variation  $b$  lässt sich durch eine absolut stetige Funktion  $b_a(\cdot)$ , eine Sprungfunktion  $b_d(\cdot)$  mit

$$b_d(0) = 0,$$

$$b_d(t) = (b_+(0) - b(0)) + \sum_{t_i < t} (b_+(t_i) - b_-(t_i)) + (b(t) - b_-(t)) \quad t \in [0, T]$$

und eine Funktion  $b_s(\cdot)$ , die eine nicht konstante BV-Funktion ist mit Ableitung Null fast überall (singulär), angeben.

**Definition B.0.5** (Raum der normalisierten Funktionen beschränkter Variation).

Wir nennen

$$\text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}) := \{b \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}) : b(0) = 0 \wedge b(t) = b_+(t) \quad 0 < t < T\}$$

den normalisierten Funktionenraum beschränkter Variation. Es gilt

$$\text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}^k) := \underbrace{\text{NBV}([0, T]; \mathbb{R}) \times \dots \times \text{NBV}([0, T]; \mathbb{R})}_{k\text{-mal}}.$$

## C Anmerkungen zum Riemann Stieltjes Integral

Des Weiteren benötigen wir eine Verallgemeinerung des Riemann-Integrals. Als Referenz sei hierfür [38, Kapitel 2.1] genannt.

**Definition C.0.1** (Riemann-Stieltjes-Integral). *Seien  $f, g : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  und die Partition  $P$  gegeben. Sei  $\xi_i \in [t_{i-1}, t_i]$  beliebig aber fest und*

$$S_n(f, g) := \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(g(t_i) - g(t_{i-1})).$$

Wir nennen

$$S(f, g) = \int_0^T f(t) dg(t)$$

Riemann-Stieltjes-Integral (kurz: R-S-I), falls für jedes  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  existiert, sodass für jede Partition  $\mathcal{P}$  mit  $\max_{0 \leq i \leq n-1} (t_{i+1} - t_i) < \delta$  folgende Bedingung gilt

$$|S_n(f, g) - S(f, g)| < \epsilon.$$

Man bezeichnet dann  $f$  als Riemann-Stieltjes-integrierbar nach  $g$ . Im Falle vektorwertiger Funktionen  $f, g : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^k$  definieren wir das Riemann-Stieltjes-Integral durch

$$\int_0^T f(t) \cdot dg(t) = \int_0^T f(t)^T dg(t) := \sum_{i=1}^k \int_0^T f_i(t) dg_i(t).$$

**Bemerkung C.0.2** (Anmerkungen zum Riemann-Stieltjes-Integral).

- (i) Mit der Wahl  $g(t) = t$  entspricht das Riemann-Stieltjes-Integral (R-S-I) dem gewöhnlichen Riemann-Integral.
- (ii) Seien  $f \in C([0, T]; \mathbb{R})$  und  $g \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R})$  beliebig. Dann ist  $f$  nach  $g$  Riemann-Stieltjes-integrierbar.

**Lemma C.0.3** (Eigenschaften des Riemann-Stieltjes-Integral).

Es gelten folgende Aussagen (nachzulesen in [38, Kapitel 2.1]):

- (i) Falls eines der beiden R-S-I  $\int_0^T f(t) \cdot dg(t)$  oder  $\int_0^T g(t) \cdot df(t)$  existiert, dann existiert auch das jeweils Andere. Seien  $f \in C([0, T]; \mathbb{R}^k)$  und  $g \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$ , dann hat folgende Formel der partiellen Integration ihre Gültigkeit

$$\int_0^T f(t) \cdot dg(t) + \int_0^T g(t) \cdot df(t) = [f(t) \cdot g(t)]_0^T. \quad (\text{C.1})$$

- (ii) Sei  $f \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times k})$ ,  $g \in C^1([0, T]; \mathbb{R}^k)$  und auf dem Intervall  $[0, T]$  monoton wachsend. Dann gilt

$$\frac{d}{dt} \int_0^t f(\tau) dg(\tau) = f(t) \frac{d}{dt} g(t).$$

- (iii) Sei  $f \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times k})$  und  $g \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^m)$ , dann ist

$$\int_0^t f(\tau)^T dg(\tau) \quad t \in [0, T]$$

von beschränkter Variation und es gilt

$$\int_0^t f(\tau)^T dg(\tau) - \lim_{\epsilon \searrow 0} \int_0^{t-\epsilon} f(\tau)^T dg(\tau) = f(t)^T (g(t) - g_-(t)) \quad 0 < t \leq T$$

(iv) Seien  $f \in C([0, T]; \mathbb{R})$ ,  $h \in L^1([0, T]; \mathbb{R})$  und

$$g(t) = \int_a^t h(\tau) d\tau, \quad a, t \in [0, T],$$

dann ist  $g \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R})$  und

$$\int_0^T f(t) dg(t) = \int_0^T f(t)h(t) dt = \int_0^T f(t)\dot{g}(t) dt.$$

Des Weiteren seien  $h \in C([0, T]; \mathbb{R})$ ,  $b \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R})$  und

$$g(t) = \int_a^t h(\tau) db(\tau) \quad a, t \in [0, T],$$

dann folgt

$$\int_0^T f(t) dg(t) = \int_0^T f(t)h(t) db(t).$$

(v) Seien  $f \in \text{BV}([0, T]; \mathbb{R}^k)$  und  $g \in \text{AC}([0, T]; \mathbb{R}^k)$ , dann gilt

$$\int_0^T f(t) \cdot dg(t) = \int_0^T f(t) \cdot \dot{g}(t) dt.$$

(vi) Seien  $f \in C([0, T]; \mathbb{R}^{m \times k})$  und  $\mu \in \mathbb{R}^m$  monoton wachsend, dann existiert ein  $\theta \in [0, T]$  sodass

$$\int_0^T f(t)^T d\mu(t) = f(\theta)^T (\mu(T) - \mu(0)).$$

## Literatur

- [1] W. Ackermann and et al. Operation of a free-electron laser from the extreme ultraviolet to the water window. *Nature Photonics*, 1(6):336–342, June 2007.
- [2] R.A. Adams and J.J.F. Fournier. *Sobolev Spaces*. Pure and Applied Mathematics. Elsevier Science, 2003.
- [3] A. Alonso and A. Valli. Some remarks on the characterization of the space of tangential traces of  $H(\text{rot}; \omega)$  and the construction of an extension operator. *manuscripta mathematica*, 89(1):159–178, 1996.
- [4] H.W. Alt. *Lineare Funktionalanalysis: Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer-Lehrbuch Masterclass. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [5] H. Amann and J. Escher. *Analysis II*. Analysis. Birkhäuser Basel, 2008.
- [6] H. Amann and J. Escher. *Analysis III*. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008.
- [7] H. Amann and J. Escher. *Analysis I*. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2013.
- [8] P. Armand, J.C. Gilbert, and S. Jan-Jégou. A feasible bfgs interior point algorithm for solving convex minimization problems. *SIAM Journal on Optimization*, 11:200–0, 2000.
- [9] D. N. Arnold, R. S. Falk, and R. Winther. Finite element exterior calculus, homological techniques, and applications. *Acta Numerica*, 15:1–155, 5 2006.
- [10] H. Attouch, G. Buttazzo, and G. Michaille. *Variational Analysis in Sobolev and BV Spaces: Applications to PDEs and Optimization*. MOS-SIAM Series on Optimization. SIAM, 2014.
- [11] G. Bauer, D.-A. Deckert, and D. Dürr. Maxwell-Lorentz dynamics of rigid charges. *Communications in Partial Differential Equations*, 38(9):1519–1538, 2013.
- [12] M. Berggren. Approximations of very weak solutions to boundary-value problems. *Siam J. Numer. Anal.*, 42(2):860–877, 2004.
- [13] C.K. Birdsall. Particle-in-cell charged-particle simulations, plus monte carlo collisions with neutral atoms, pic-mcc. *Plasma Science, IEEE Transactions on*, 19(2):65–85, Apr 1991.
- [14] C.K. Birdsall and A.B. Langdon. *Plasma Physics via Computer Simulation*. Series in Plasma Physics. Taylor & Francis, 2004.
- [15] C.H. Bischof, H.M. Bücker, B. Lang, A. Rasch, and A. Vehreschild. Combining source transformation and operator overloading techniques to compute derivatives for MATLAB programs. In *Proceedings of the Second IEEE International Workshop on Source Code Analysis and Manipulation (SCAM 2002)*, pages 65–72, Los Alamitos, CA, USA, 2002. IEEE Computer Society.
- [16] V. Bommer and I. Yousept. Optimal control of the full time-dependent maxwell equations. *ESAIM: M2AN*, 2015.
- [17] J.P. Boris. Relativistic plasma simulation - optimization of a hybrid code. In *Proc. Fourth Conf. Numerical Simulation of Plasmas*, pages 3–67, 1970.
- [18] S.C. Brenner and R. Scott. *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Texts in Applied Mathematics. Springer, 2008.
- [19] H.P. Cartan. *Differential Calculus*. Hermann, 1983.
- [20] E. Casas. Control of an elliptic problem with pointwise state constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 24(6):1309–1318, 1986.
- [21] E. Casas. Boundary control of semilinear elliptic equations with pointwise state constraints. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 31(4):993–1006, 1993.
- [22] E. Casas and J. Raymond. Error estimates for the numerical approximation of Dirichlet boundary control for semilinear elliptic equations. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 45(5):1586–1611, 2006.
- [23] P.G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. Studies in Mathematics and its Applications. Elsevier Science, 1978.
- [24] B. Cockburn, G.E. Karniadakis, and C.W. Shu. *Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [25] B. Cockburn and C.W. Shu. The Runge Kutta Discontinuous Galerkin Method for Conservation Laws v: Multidimensional systems. *Journal of Computational Physics*, 141(2):199 – 224, 1998.
- [26] M. Dauge. *Elliptic boundary value problems on corner domains : smoothness and asymptotics of solutions*. Lecture notes in mathematics. Springer, Berlin, 1988.
- [27] R. Dautray and J.-L. Lions. *Mathematical Analysis and Numerical Methods for science and technology*, volume 5. Spinger, Berlin, 1992.
- [28] R. Dautray and J.-L. Lions. *Mathematical Analysis and Numerical Methods for science and technology*, volume 3. Spinger, Berlin, 1992.

- 
- [29] R. Dautray, J.L. Lions, and I.N. Sneddon. *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology: Volume 1 Physical Origins and Classical Methods*. Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology. Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [30] K. Deckelnick, A. Günther, and M. Hinze. Finite element approximation of Dirichlet boundary control for elliptic pdes on two- and three-dimensional curved domains. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 48(4):2798–2819, 2009.
- [31] P. Druet, O. Klein, J. Sprekels, F. Tröltzsch, and I. Yousept. Optimal control of three-dimensional state-constrained induction heating problems with nonlocal radiation effects. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 49(4):1707–1736, 2011.
- [32] J.F. Epperson. *An Introduction to Numerical Methods and Analysis*. John Wiley & Sons, 2007.
- [33] A. Ern and J.L. Guermond. *Theory and Practice of Finite Elements*. Number Bd. 159 in Applied Mathematical Sciences. Springer, 2004.
- [34] L.C. Evans. *Partial Differential Equations*. Graduate studies in mathematics. American Mathematical Society, 1997.
- [35] M. Falconi. Global solution of the electromagnetic field-particle system of equations. *Journal of Mathematical Physics*, 55(10):1–12, 2014.
- [36] A.V. Fiacco and G.P. McCormick. *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*. Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1990.
- [37] CGR. Geddes, C. Toth, J. van Tilborg, E. Esarey, C. B. Schroeder, D. Bruhwiler, C. Nieter, J. Cary, and W.P. Leemans. High-quality electron beams from a laser wakefield accelerator using plasma-channel guiding. *Nature*, 431(7008):538–541, 2004.
- [38] M. Gerdt. *Optimal control of ODEs and DAEs*. De Gruyter, Berlin, 2012.
- [39] M. Giaquinta and S. Hildebrandt. *Calculus of Variations I*. Calculus of Variations. Springer, 1996.
- [40] D. Gilbarg and N.S. Trudinger. *Elliptic Partial Differential Equations of Second Order*. Classics in Mathematics. U.S. Government Printing Office, 2001.
- [41] V. Girault and P.-A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations*. Springer, Berlin, 1986.
- [42] E. Gjonaj, T. Lau, S. Schnepp, F. Wolfheimer, and T. Weiland. Accurate modelling of charged particle beams in linear accelerators. *New Journal of Physics*, 8:1–21, August 2006.
- [43] R. Griesse and K. Kunisch. Optimal control for a stationary MHD system in velocity–current formulation. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 45(5):1822–1845, 2006.
- [44] A. Griewank. On automatic differentiation. In Masao Iri and K. Tanabe, editors, *Mathematical Programming*, pages 83–108. Kluwer Academic Publishers, 1989.
- [45] A. Griewank and A. Walther. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation, Second Edition*. SIAM e-books. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), 2008.
- [46] C. Großmann and H.G. Roos. *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*. Teubner Studienbücher Mathematik. Vieweg+Teubner Verlag, 2005.
- [47] H. Günther. *Spezielle Relativitätstheorie: Ein Neuer Einstieg in Einsteins Welt*. Lehrbuch Physik. Vieweg Verlag, Friedr. & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 2007.
- [48] W. Hager. Rates of convergence for discrete approximations to unconstrained control problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 13(4):449–472, 1976.
- [49] W. Hager. Runge-kutta methods in optimal control and the transformed adjoint system. *Numerische Mathematik*, 87(2):247–282, 2000.
- [50] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer/Verlet method. *Acta Numerica*, 12:399–450, 2003.
- [51] E. Hairer, S.P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems*. Solving Ordinary Differential Equations. Springer, 2000.
- [52] R. F. Hartl, S. P. Sethi, and R. G. Vickson. A survey of the maximum principles for optimal control problems with state constraints. *SIAM Review*, 37(2):181–218, 1995.
- [53] Roland Hess. *The Essential Blender: Guide to 3D Creation with the Open Source Suite Blender*. No Starch Press, San Francisco, CA, USA, 2007.
- [54] J.S. Hesthaven and T. Warburton. *Nodal Discontinuous Galerkin Methods: Algorithms, Analysis, and Applications*. Texts in Applied Mathematics. Springer, 2008.
- [55] M. Hintermüller and K. Kunisch. Feasible and non-interior path-following in constrained minimization with low multiplier regularity. *SIAM J. Control and Optim.*, 45:1198–1221, 2006.
- [56] M. Hinze, R. Pinnau, M. Ulbrich, and S. Ulbrich. *Optimization with PDE constraints*, volume 23 of *Mathematical Modelling: Theory and Applications*. Springer, New York, 2009.

- 
- [57] M. Hinze and F. Tröltzsch. Discrete concepts versus error analysis in pde-constrained optimization. *GAMM-Mitteilungen*, 33(2):148–162, 2010.
- [58] R.W. Hockney and J.W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. CRC Press, 1988.
- [59] P.G. Huray. *Maxwell's Equations*. Wiley, 2011.
- [60] V. Imaikin, A. Komech, and N. Mauser. Soliton-type asymptotics for the coupled Maxwell-Lorentz equations. *Annales Henri Poincaré*, 5:1117–1135, 2004.
- [61] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. Wiley, New York, 3rd edition, 1999.
- [62] A. Kirsch and F. Hettlich. *The Mathematical Theory of Time-Harmonic Maxwell's Equations: Expansion-, Integral-, and Variational Methods*. Applied Mathematical Sciences. Springer International Publishing, 2014.
- [63] A. Komech and H. Spohn. Long-time asymptotics for the coupled Maxwell-Lorentz equations. *Communications in Partial Differential Equations*, 25:559–584, 2000.
- [64] K. Kunisch and B. Vexler. Constrained Dirichlet boundary control in  $L^2$  for a class of evolution equations. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 46(5):1726–1753, 2007.
- [65] M. A. Leontovich. On approximate boundary conditions for an electromagnetic field on the surface of a good conductor. *Investigations on Radio Wave Propagation [in Russian]*, pages 5–22, 1948.
- [66] Z. Li, V. Akcelik, A. Candell, S. Chen, L. Ge, A. Kabel, L. Q. Lee, C. Ng, E. Prudencio, G. Schussman, R. Uplenchar, L. Xiao, and K. Ko. Towards simulation of electromagnetics and beam physics at the petascale. In *2007 IEEE Particle Accelerator Conference (PAC)*, pages 889–893. IEEE, 2007.
- [67] J.L. Lions, P. Kenneth, and E. Magenes. *Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications*. Number Bd. 1 in Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [68] D.G. Luenberger. *Optimization by Vector Space Methods*. Professional Series. Wiley, 1968.
- [69] S. May, R. Rannacher, and B. Vexler. Error analysis for a finite element approximation of elliptic Dirichlet boundary control problems. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 51(3):2585–2611, 2013.
- [70] C. Meyer. Optimierung im Funktionenraum. Universitätsvorlesung TU Dortmund, 2013.
- [71] C. Meyer, A. Rösch, and F. Tröltzsch. Optimal control of pdes with regularized pointwise state constraints. *Comp. Optim. Appl.*, 33:209–228, 2006.
- [72] K. Miyamoto. *Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. Springer, 2006.
- [73] P. Monk. Analysis of a Finite Element Method for Maxwell's Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 29(3):714–729, 1992.
- [74] P. Monk. *Finite Element Methods for Maxwell's Equations*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Clarendon Press, 2003.
- [75] J. Necas. *Les Methodes Directes en Theorie Des Equations Elliptiques*. Masson, 1967.
- [76] R. Neidinger. Introduction to automatic differentiation and matlab object-oriented programming. *SIAM Review*, 52(3):545–563, 2010.
- [77] P. Neittaanmaki, J. Sprekels, and D. Tiba. *Optimization of Elliptic Systems: Theory and Applications*. Springer Monographs in Mathematics. Springer, 2007.
- [78] S. Nicaise, S. Stingelin, and F. Tröltzsch. On two optimal control problems for magnetic fields. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 14:555–573, 2014.
- [79] S. Nicaise, S. Stingelin, and F. Tröltzsch. Optimal control of magnetic fields in flow measurement. *Discrete and Continuous Dynamical Systems-S*, 8:579–605, 2015.
- [80] S. Nicaise and F. Tröltzsch. A coupled Maxwell integrodifferential model for magnetization processes. *Mathematische Nachrichten*, 287(4):432–452, 2014.
- [81] J. Nocedal. Updating quasi-newton matrices with limited storage. *Math. Comp.*, 35:773–782, 1980.
- [82] J. Nocedal and S. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research and Financial Engineering. Springer, 2006.
- [83] G. Of, T. X. Phan, and O. Steinbach. Boundary element methods for Dirichlet boundary control problems. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 33(18):2187–2205, 2010.
- [84] L. Patacchini and I.H. Hutchinson. Explicit time-reversible orbit integration in particle in cell codes with static homogeneous magnetic field. *Journal of Computational Physics*, 228(7):2604 – 2615, 2009.
- [85] A. Pazy. *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, volume 44. Springer, New York, 1st edition, 1983.
- [86] G. Pöplau, U. van Rienen, J. Staats, and T. Weiland. Fast algorithms for the tracking of electron beams. In *Proceedings of EPAC 2000, Vienna, Austria*, pages 1387–1389, 2000.
- [87] M. Quandt. *High order particle transport for PIC simulations of plasma flows*. PhD thesis, Universität Stuttgart, Holzgartenstr. 16, 70174 Stuttgart, 2010.

- 
- [88] M. Renardy and R.C. Rogers. *An Introduction to Partial Differential Equations*. Texts in Applied Mathematics. Springer New York, 2006.
- [89] A.A. Rodriguez and A. Valli. *Eddy Current Approximation of Maxwell Equations: Theory, Algorithms and Applications*. MS&A. Springer Milan, 2010.
- [90] J. Rossbach and P. Schmüser. Basic course on accelerator optics. In S. Turner, editor, *CAS - CERN Accelerator School: 5th General accelerator physics course*, volume I, 1992.
- [91] W. Rudin. *Functional Analysis*. International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill, 1991.
- [92] F. Scheck. *Theoretische Physik 1*. Advanced Texts in Physics. Springer, 2002.
- [93] A. Schiela. Barrier methods for optimal control problems with state constraints. *Siam J. Optim.*, 20(2):1002–1031, 2009.
- [94] A. Schiela. An interior point method in function space for the efficient solution of state constrained optimal control problems. *Mathematical Programming*, 138:83–114, 2013.
- [95] A. Schiela and A. Günther. Interior point methods in function space for state constraints – inexact Newton and adaptivity. *ZIB Report 09–01*, 2009.
- [96] J. Schöberl. A posteriori error estimates for Maxwell equations. *Math. Comp.*, 77(262):633–649, 2008.
- [97] B. Schweizer. *Partielle Differentialgleichungen: Eine anwendungsorientierte Einführung*. Springer-Lehrbuch Masterclass. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [98] T.B.A. Senior. Impedance boundary conditions for imperfectly conducting surfaces. *Applied Scientific Research, Section B*, 8(1):418–436, 1960.
- [99] T. Slawig. *Algorithmisches Differenzieren in Simulation und Steuerung von Differentialgleichungen*. Habilitation, TU Berlin, 2005.
- [100] H. Spohn. *Dynamics of charged particles and their radiation field*. Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [101] A.H. Squillacote. *The ParaView Guide*. Kitware, 2007.
- [102] B.A. Szabo and I. Babuška. *Finite Element Analysis*. A Wiley-Interscience publication. Wiley, 1991.
- [103] R. Temam. *Navier-Stokes equations: theory and numerical analysis*. North-Holland, Amsterdam, 1977.
- [104] F. Tröltzsch. *Optimale Steuerung Partieller Differentialgleichungen: Theorie, Verfahren und Anwendungen*. Vieweg Studium. Vieweg+Teubner Verlag / GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009.
- [105] F. Tröltzsch and I. Yousept. PDE-constrained optimization of time-dependent 3D electromagnetic induction heating by alternating voltages. *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 46:709–729, 7 2012.
- [106] D. Tskhakaya, K. Matyash, R. Schneider, and F. Taccogna. The particle-in-cell method. *Contributions to Plasma Physics*, 47(8-9):563–594, 2007.
- [107] J.-L. Vay. Simulation of beams or plasmas crossing at relativistic velocity). *Physics of Plasmas (1994-present)*, 15(5):–, 2008.
- [108] J.P. Verboncoeur. Particle simulation of plasmas: review and advances. *PLASMA PHYSICS AND CONTROLLED FUSION*, 47:A231–A260, 2005.
- [109] S.D. Webb. Symplectic integration of magnetic systems. *Journal of Computational Physics*, 270(0):570 – 576, 2014.
- [110] K. Wille. *The Physics of Particle Accelerators*. Oxford University Press, 2000.
- [111] S.J. Wright. *Primal-Dual Interior-Point Methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- [112] I. Yousept. Optimal control of a nonlinear coupled electromagnetic induction heating system with pointwise state constraints. *Ann. Acad. Rom. Sci. Ser. Math. Appl.*, 2(1):45–77, 2010.
- [113] I. Yousept. Finite element analysis of an optimal control problem in the coefficients of time-harmonic eddy current equations. *J. Optim. Theory Appl.*, 154:879–903, 2012.
- [114] I. Yousept. Optimal control of Maxwell’s equations with regularized state constraints. *Computational Optimization and Applications*, 52:559–581, 2012.
- [115] I. Yousept. Optimal control of quasilinear  $H(\text{curl})$ -elliptic partial differential equations in magnetostatic field problems. *SIAM Journal on Control and Optimization*, 51(5):3624–3651, 2013.
- [116] I. Yousept. Optimal bilinear control of eddy current equations with grad-div regularization and divergence penalization. *Journal of Numerical Mathematics*, 2015.
- [117] J. Zowe and S. Kurcyusz. Regularity and stability for the mathematical programming problem in Banach spaces. *Applied Mathematics and Optimization*, 5(1):49–62, 1979.