D-MATH	Numerische Methoden	FS 2017
Dr. Vasile Gradinaru
Luc Grosheintz

Serie 3

Abgabedatum: Di. 13.3 / Mi. 14.3, in den Übungsgruppen, oder im HG J 68.
Koordinatoren: Luc Grosheintz, HG J 46, `luc.grosheintz@sam.math.ethz.ch`
Webpage: `http://metaphor.ethz.ch/x/2017/fs/401-1662-10L`

1. *Trajektorie bei Streuung (Prüfungsaufgabe FS 13)*

Die Trajektorie eines Teilchens bei Streuung an einem Potential $U(x, y)$ wird beschrieben durch:

$$\ddot{\underline{r}} = -\nabla U$$

wobei $\underline{r} = (x, y)^{\mathrm{T}}$ die Teilchenkoordinaten sind und U das Lennard-Jones Potential:

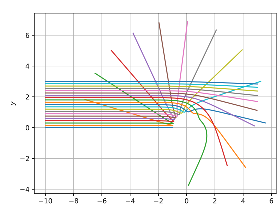
$$U(x, y) = 4\left(\left(\frac{1}{r}\right)^{12} - \left(\frac{1}{r}\right)^{6}\right)$$

ist und $r^2 = x^2 + y^2$.

a) Plotten Sie die Teilchen-Trajektorien, die sich mit dem Störmer-Verlet Verfahren ergeben.

b) Verwenden Sie folgende Anfangsbedingungen und Parameter:

- $\underline{r}(t = 0) = (-10, b)^{\mathrm{T}}$, wobei $b = 0.15, 0.3, 0.45, \ldots, 3$,
- $\dot{\underline{r}}(t = 0) = (1, 0)^{\mathrm{T}}$,
- Zeitschritt $\Delta t = 0.02$,
- Endzeit $T_{\text{ende}} = 15$.



Hinweis: Benutzen Sie das Template `lennard_jones.py`

2. *Plancksches Strahlungsgesetz (Aufgabe aus der Vorlesung)*

Verstehen Sie den Code `BoltzmanConst.py`

Bitte wenden!

3. Kernaufgabe: Anfangsamplitude eines Pendels zu gegebener Periode

Modellierung der Physik

Die Bewegungsgleichung eines mathematischen Pendels (Reibung vernachlässigt) der Länge l ist eine nicht-lineare gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung und das zugehörige Anfangswertproblem ist

$$\ddot{\phi} = -\frac{g}{l}\sin(\phi)\,, \qquad \phi(0) = \phi_0 \in \,]0, \frac{\pi}{2}]\,, \qquad \dot{\phi}(0) = 0\,,$$

wobei $\phi(t)$ der Winkel des Pendels in Bezug zur vertikalen Richtung und g die Gravitationskonstante ist. Für grosse Amplituden ist die Periode T eine Funktion des Anfangswertes. Man kann eine Formel für $T(\phi_0)$ wie folgt herleiten. Wir betrachten die gesamte Energie des Pendels, welche in der Zeitentwicklung erhalten bleiben muss

$$\underbrace{mgl(1-\cos\phi_0)}_{E_0=E(0)} = \underbrace{\frac{1}{2}ml^2\dot{\phi}^2 + mgl(1-\cos\phi)}_{E(t)}\,.$$

Auflösen dieser Gleichung nach $\dot{\phi}$ ergibt

$$\dot{\phi} = \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t} = \pm\sqrt{\frac{2g}{l}\left(\cos\phi - \cos\phi_0\right)}$$

und per Integration nach t bekommt man die Periode

$$T(\phi_0) = 4\sqrt{\frac{l}{2g}}\int_0^{\phi_0}\frac{1}{\sqrt{\cos\phi - \cos\phi_0}}\mathrm{d}\phi\,.$$

Dieses Integral ist singulär bei $\phi = \phi_0$ und numerisch schwierig zu berechnen. Deshalb wendet man erst die Substitution $\cos\phi = 1 - 2\sin^2\left(\frac{\phi}{2}\right)$ und dann die Variabeltransformation $\sin\theta = \frac{\sin\left(\frac{\phi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\phi_0}{2}\right)}$ an und bekommt

$$T(\phi_0) = 4\sqrt{\frac{l}{g}}\underbrace{\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{1}{\sqrt{1-k^2\sin^2\theta}}\mathrm{d}\theta}_{:=K(k)}\,. \tag{1}$$

wobei $k := \sin\left(\frac{\phi_0}{2}\right)$ und $|\phi_0| < \pi$. Das bestimmte Integral $K(k)$ ist gerade die Definition einer wohlbekannten speziellen Funktion: das *vollständige elliptische Integral erster Art.*

Mathematisches Modell

Wir betrachten in dieser Aufgabe das nicht-lineare Anfangswertproblem.

Bestimmen Sie den Anfangswinkel ϕ_0, so dass $T = 1.8$ s die Periode der Lösung ist.

Die Parameter sind $l = 0.6$ m und $g = 9.81$ ms^{-2}. Aufgrund der Symmetrie passiert das Pendel in jedem Fall bei $t = \frac{T}{4}$ und $t = \frac{3T}{4}$ seinen tiefsten Punkt. Daher können wir das

Siehe nächstes Blatt!

Problem folgendermassen formulieren:

Bestimmen Sie $\phi_0 > 0$, so dass für die Lösung $t \mapsto \phi(t)$ $\phi(0.45) = 0$ gilt.

Aufgabenstellung

a) Schreiben Sie die Differentialgleichung 2. Ordnung als eine System von Differentialgleichungen 1. Ordnung.

b) Schreiben Sie eine `Python` Funktion `simulate_pendulum` die den Integrator `ode45` benutzt, um die Pendelgleichung mit den Parametern l und g zu lösen. Schreiben Sie ein Interface `solve_for_final_angle` welches sich für die Nullstellensuche in d) eignet.

c) Lösen Sie das Anfangswertproblem auf $[0, \texttt{t\_end}]$ für die beiden gegebenen Anfangswerte $\phi_0 = 0.8\frac{\pi}{2}$ und $\phi_0 = 0.99\frac{\pi}{2}$. Plotten Sie in beiden Fällen den zeitlichen Verlauf von ϕ und $\dot{\phi}$. Verifizieren Sie, dass die Periode der Lösung für den ersten Startwert kleiner und für den zweiten Startwert grösser als $T = 1.8$ s ist.

d) Die Funktion F sei nun mithilfe der Lösung $\phi(t)$ definiert als

$$F(\phi_0) := \phi(0.45)\,.$$

Verwenden Sie die `Python` Funktion `fsolve` aus dem Modul `scipy.optimize` um die Nullstelle von $F(\phi_0)$ zu bestimmmen[a]. Plotten Sie die Lösung und verifizieren Sie, dass die numerische Lösung tatsächlich die Periode $T = 1.8$ s hat.

e) Anstelle einer numerischen Approximation der Lösung $\phi(t)$ der Differentialgleichung kann auch die Formel (1) in der Definition der Funktion F verwendet werden

$$F(\phi_0) := \frac{1}{4}T(\phi_0) - 0.45\,.$$

Bestimmen Sie wiederum die Nullstelle von F. Das elliptische Integral $K(k)$ soll mittels einer zusammengesetzten Simpson Quadraturregel auf 10 Intervallen approximiert werden.

f) Eine wesentlich effizientere Methode zur Berechnung der Funktion $K(k)$ verwendet das arithmetisch-geometrische Mittel $\operatorname{agm}(x, y)$ zweier Zahlen. Es berechnet sich iterativ wie folgt: $x_0 := x$, $y_0 := y$ und

$$x_{n+1} := \frac{x_n + y_n}{2}$$
$$y_{n+1} := \sqrt{x_n y_n}\,.$$

Im Limit $n \to \infty$ gilt $x_n = y_n = \operatorname{agm}(x, y)$. Das elliptische Integral lässt sich nun schreiben als

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \xi}} \mathrm{d}\xi = K(k) = \frac{\pi}{2} \frac{1}{\operatorname{agm}(1-k, 1+k)}\,.$$

Verwenden Sie diese Iteration zur Approximation von $T(\phi_0)$ und bestimmen Sie die Nullstelle von F. Aufgrund der guten Konvergenz sind nur sehr wenige Iterationen notwendig. Für diese Berechnung hier reichen 5, da stets $0 < k < 1$.

Bitte wenden!

Hinweis: Verwenden Sie das Template `pendulum.py` und `ode45.py`.

[a] F ist stetig und steigend auf $[0.8\pi/2, 0.99\pi/2]$ (grössere Anfangswerte sind längere Perioden) daher hat F auf diesem Intervall eine eindeutige Nullstelle.