Dr. Vasile Gradinaru
Luc Grosheintz

Serie 7

Abgabedatum: 11.4/12.4, in den Übungsgruppen
Koordinatoren: Luc Grosheintz, HG G 46, `luc.grosheintz@sam.math.ethz.ch`
Webpage: `http://metaphor.ethz.ch/x/2017/fs/401-1662-10L`

1. *Nichtlineares System*

Das nichtlineare Gleichunssystem

$$e^{xy} + x^2 + y - \frac{6}{5} = 0 \tag{1}$$

$$x^2 + y^2 + x - \frac{11}{20} = 0 \tag{2}$$

ist zu lösen.

a) Implementieren Sie hierzu ein Newton-Verfahren in `Python` und lösen Sie damit obiges System mit den Startwerten $x = \frac{3}{5}$ und $y = \frac{1}{2}$ bis auf eine Toleranz von 10^{-14}.

b) Untersuchen Sie die beobachtete Konvergenzordnung für folgende Startwerte:

1. $x = \frac{3}{5}$ und $y = \frac{1}{2}$
2. $x = \frac{2}{5}$ und $y = \frac{1}{4}$
3. $x = -\frac{23}{5}$ und $y = \frac{41}{5}$.

Vergleichen Sie die beobachtete Konvergenzordnung mit der theoretischen.

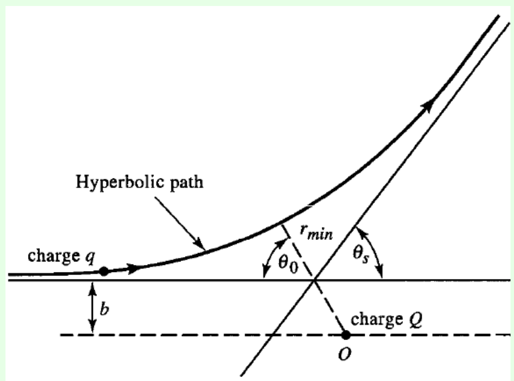
2. Kernaufgabe: Streuung an einem Potential

Modellierung der Physik

Wir betrachten die elastische Streuung zweier Teilchen q und Q, deren Wechselwirkung durch das Lennard-Jones Potential beschrieben wird:

$$U(r) = 4\varepsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right) \tag{3}$$

Dabei ist ε die Potentialtiefe und $\sigma = 1$.



Wie in der Abbildung[a] gezeigt sei Q im Ursprung fixiert und q fliege aus dem Unendlichen im Abstand b parallel zur x-Achse in Richtung von Q. Wir suchen den minimalen Abstand $r_{\min}(b)$ zwischen q und Q. Die Energie E und der Drehimpuls L des Teilchens q sind Erhaltungsgrössen und an diesem Punkt gegeben als:

$$E \equiv E(r_{\min}) = \frac{L^2}{2r_{\min}^2} + U(r_{\min}) \tag{4}$$

$$L \equiv b\sqrt{2E} \tag{5}$$

Wir wählen für die Energie $E = 0.2$.

[a] Aus Fowles and Cassiday, Analytical Mechanics (Thomson Brooks/Cole)

Aufgabenstellung

a) Wiederholen Sie folgende Teilaufgaben für 20 verschiedene Werte von ε im Intervall $[0.01, 2]$. Testen Sie die Berechnungen aber zunächst für ein fixes $\varepsilon \approx 0.8$.

b) Berechnen Sie $r_{\min}(b)$ aus der Gleichung für die Energieerhaltung. Benutzen Sie dafür `fsolve` um die Nullstelle mit *maximalem* r zu finden. Wählen Sie für b 500 Werte im Intervall $[0, 3]$ und plotten Sie $r_{\min}(b)$ gegen b.

c) Der Streuungswinkel θ_s ist gegeben als das Integral:

$$\theta_s(b) = \pi - 2\int_{r_{\min}(b)}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r \tag{6}$$

Siehe nächstes Blatt!

von:

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r} = \frac{b}{r^2}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{b^2}{r^2}-\frac{U(r)}{E}}}. \tag{7}$$

Verwenden Sie die Funktion `quad` aus `scipy.integrate` um das Integral wie folgt zu berechnen:

```
    theta = pi - 2*quad(dthetadr, r0, np.inf)[0]
```

Wählen Sie für b 500 Werte im Intervall $[0, 3]$ und plotten Sie $\theta_s(b)$ gegen b.

Wie wir oben gesehen haben, gibt es für gewisse Wertebereiche der Parameter b und ε Schwierigkeiten mit der Nullstellensuche. Im Rest dieser Aufgabe wollen wir einen robusteren Algorithmus konstruieren um die maximale Nullstelle zuverlässig zu finden.

Aufgabenstellung

d) Betrachten Sie die Funktion f (aus Aufgabe a), deren maximale Nullstelle wir suchen, für Parameterwerte im problematischen Bereich. Wählen Sie beispielsweise $b = 2.6$ und $\varepsilon = 1.0$ und $E(r_{\mathrm{min}}) = 0.2$ und plotten Sie die Funktion $f(r)$.

Modellierung der Physik

Die Funktion $f(r)$ hat mindestens 1 und maximal 3 positive Nullstellen, wir benötigen die Grösste. Da das Newton Verfahren nur lokal konvergiert und bei gegebenem Startwert nicht apriori klar ist, welche Nullstelle gefunden wird, benötigen wir ein Verfahren mit mehr Kontrolle.
Wir wollen hier das Bisektionsverfahren benutzen, um *alle* reellen positiven Nullstellen von $f(r)$ zu finden. Das Verfahren findet bei jeder Anwendung maximal eine Nullstelle im gegebenen Intervall. Um alle Nullstellen zu finden benötigen wir mehr Information über die ungefähre Lage der Nullstellen, so dass wir das Bisektionsverfahren drei Mal mit geeigneten Anfangsintervallen starten können. Wir benutzen die Tatsache, dass Nullstellen stets durch lokale Extrema getrennt werden.

Aufgabenstellung

e) Suchen Sie, falls existent, die (eindeutige) positive Nullstelle ξ von $f''(r)$ um das Intervall $[0.01, 100]$ in zwei Teilintervalle zu zerlegen. Benutzen Sie hierfür die Funktion `bisect` aus `scipy.optimize`.

f) Finden Sie die beiden Extrema μ_1 und μ_2 von $f(r)$ (also die beiden Nullstellen von $f'(r)$) um das Intervall $[0.01, 100]$ in drei disjunkte Teilintervalle zu zerlegen. Starten Sie dafür je eine Bisektionssuche auf $[0.01, \xi]$ und $[\xi, 100]$.

g) Finden Sie die drei Nullstellen von $f(r)$ mithilfe des Bisektionsverfahrens und wählen Sie dann die maximale Nullstelle als Rückgabewert.

Bitte wenden!

h) Was ist das mathematisch korrekte Vorgehen, falls die Berechnung in e), f) oder g) in einem Intervall *keine* Nullstelle(n) findet?

Hinweis: Die Funktion `bisect` wirft eine Exception:

```
ValueError: f(a) and f(b) must have different signs
```

die man wie gezeigt abfangen kann:

```
In [2]: f = lambda x: x**2 + 2
In [3]: try:
   ...:     bisect(f, -2, 2)
   ...: except:
   ...:     print("Keine Nullstelle im Intervall (-2, 2)")
   ...:
Keine Nullstelle im Intervall (-2, 2)
```

i) Formulieren Sie diese drei Schritte als eine `Python` Funktion die in Aufgabe a) *anstelle* des Aufrufs von `fsolve` verwendet werden kann. Wie sehen die Resultate aus?