

**Numerische Methoden D-PHYS, WS 2016/17**

Dr. V. Gradinaru

02.02.2017

**1 Aufgabe: 6 Punkte**

Die Lösung des nicht-linearen Gleichungssystems

$$\begin{aligned}x_1 &= \frac{1}{4}(\cos(x_1) - \sin(x_2)) \\x_2 &= \frac{1}{4}(\cos(x_1) - 3\sin(x_2))\end{aligned}$$

soll im Gebiet  $[0, 1]^2$  mit Hilfe des Newton-Verfahrens bestimmt werden.Arbeiten Sie in den folgenden Teilaufgaben mit dem Template `newton.py`.

- a)** (1 punkte) Schreiben Sie auf papier eine Funktion  $\mathbf{F}(x_1, x_2)$ , welche als Nullstelle die Lösung des obigen nicht-linearen Gleichungssystems besitzt.

Schreiben Sie auf papier weiter die Jacobi Matrix sowie deren Inverse Ihrer Funktion  $\mathbf{F}$ .

**Solution:**

(+.5 for writing F and dF, +.5 for writing dFinverse) Die Jacobi Matrix Determinante ist

$$\det(\mathbf{F}') = 1 + \frac{1}{4}\sin(x_1) + \frac{3}{4}\cos(x_2) + \frac{1}{8}\sin(x_1)\cos(x_2) > 0 \quad \forall x_1, x_2 \in \mathbb{R}.$$

Die Inverse der Jacobi Matrix ist dann einfach

$$\mathbf{F}'^{-1}(x_1, x_2) = \frac{1}{\det(\mathbf{F}')} \begin{pmatrix} 1 + \frac{3}{4}\cos(x_2) & -\frac{1}{4}\cos(x_2) \\ -\frac{1}{4}\sin(x_1) & 1 + \frac{1}{4}\sin(x_1) \end{pmatrix}.$$

- b)** (4 punkte) Implementieren Sie das Newton-Verfahren in der Funktion `Newton(F, dFinv, x0, tol, maxit)` innerhalb von `newton.py`.

**Solution:**

(+.5 for correct implementation of F, +.5 for correct implementation of dF ,+1 for implementing dFinverse, +1 correct iteration scheme, +1 correct stopping criteria)

- c)** (1 punkte) Verwenden Sie Ihre Funktion `Newton` und einem geeigneten Startwert um die Lösung des Gleichungssystems zu bestimmen. Benutzen Sie als Abbruchkriterien `tol = 10^-13` und `maxit = 100`.

Drucken Sie die fünf ersten Iterationswerte.

## Solution:

Listing 1.1: newton\_Solution.py

```
1 import numpy as np
2
3 def F(x):
4
5     """
6         Funktion deren Nullstelle gesucht wird
7
8         Input: x ... Punkt an welchem die Funktion F ausgewertet soll
9
10        Output: F ... Funktionswert am Punkt x
11
12    """
13
14    # Werte Funktion F aus am Punkt x
15    F = np.zeros(2)
16    F[0] = x[0] - 0.25*(np.cos(x[0]) - np.sin(x[1]))
17    F[1] = x[1] - 0.25*(np.cos(x[0]) - 3.*np.sin(x[1]))
18
19    # Rueckgabe
20    return F
21
22 def dF(x):
23
24    """
25        Jacobi Matrix der Funktion F
26
27        Input: x ... Punkt an welchem die Jacobi Matrix der Funktion F
28            ausgewertet soll
29
30        Output: dF ... Jacobi Matrix von F am Punkt x
31
32    """
33
34
35    # Werte Jacobie Matrix der Funktion F aus am Punkt x
36    dF = np.zeros((2,2))
37    dF[0,0] = 1 + 0.25*np.sin(x[0])
38    dF[0,1] = 0.25*np.cos(x[1])
39    dF[1,0] = 0.25*np.sin(x[0])
40    dF[1,1] = 1 + 0.50*np.cos(x[1])
41
42    # Rueckgabe
43    return dF
44
45 def dFinv(x):
46
47    """
48        Inverse der Jacobi Matrix der Funktion F
49
50        Input: x ... Punkt an welchem die Inverse der Jacobi Matrix der
51            Funktion F ausgewertet soll
52
53        Output: dFinv ... Jacobi Matrix von F am Punkt x
54
55    """
56
57    # Werte Inverse der Jacobie Matrix der Funktion F aus am Punkt x
58    dFinv = np.zeros((2,2))
59    det_dF = 1. + 0.25*np.sin(x[0]) + 0.50*np.cos(x[1]) \
60        + 1./16.*np.sin(x[0])*np.cos(x[1])
61    dFinv[0,0] = 1 + 3/4*np.cos(x[1])
62    dFinv[0,1] = - 0.25*np.cos(x[1])
63    dFinv[1,0] = - 0.25*np.sin(x[0])
64    dFinv[1,1] = 1 + 0.25*np.sin(x[0])
65    dFinv = dFinv/det_dF
66
```

```

67     # Rueckgabe
68     return dFinv
69
70 def Newton(F,dFinv,x0,tol,maxit):
71
72     """
73     Newton-Verfahren
74
75     Input: F      ... Funktion des Nullstelle gesucht wird
76         dFinv ... Inverse der Jacobi Matrix von F
77         x0     ... Startwert
78         tol    ... Genauigkeit
79         maxit ... maximale Anzahl Iterationen
80
81     Output: x      ... Vektor mit allen Iterationswerten (inklusive x0)
82         Converged ... Konvergenzflag (Converged = True falls konvergiert
83                         Converged = False sonst)
84         i        ... Anzahl benoetigter Iterationen bis zur Genauigkeit
85             tol
86
87     """
88
89     x = np.zeros((len(x0),maxit)) # initialisiere Iterations-Sequence
90             # mit Nulls
91     Converged = False           # Konvergenz Flag
92     x[:,0] = x0                # Startwert
93     i = 0                      # initialisiere Iterations-Zaehler
94     while ( i < maxit - 1 ):
95         # Iterations-Schritt
96         x[:,i+1] = x[:,i] - np.dot(dFinv(x[:,i]),F(x[:,i]))
97         # Untersuche auf Konvergenz
98         if ( np.linalg.norm(x[:,i+1]-x[:,i]) < tol ):
99             Converged = True
100            i = i + 1
101            break
102        # erhaeoehe Iterations Zaehler
103        i = i + 1
104
105    # Rueckgabe
106    return x,Converged,i
107
108 # Bestimme die Nullstelle mit dem Newton-Verfahren
109 x0 = np.array([0.,0.]) # Startwert
110 tol = 1.e-13           # Toleranz
111 maxit = 100            # Maximale Anzahlk Iterationen
112 [x,Converged,it] = Newton(F,dFinv,x0,tol,maxit)
113 print 'Iterationen',i=1,...,5:',x[:,0:5]
114 print 'Die Nullstelle ist:',x[:,it]
```

## 2 Aufgabe: 6 Punkte

Seien  $\mathbf{z}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$ , Vektoren von gemessenen Daten. Die zwei reellen Zahlen  $\alpha^*$  und  $\beta^*$  seien definiert als

$$(\alpha^*, \beta^*) = \min_{\alpha, \beta \in \mathbb{R}} \|\mathbf{T}_{\alpha, \beta} \mathbf{z} - \mathbf{c}\|_2, \quad (2.1)$$

wobei  $\mathbf{T}_{\alpha, \beta}$  eine tridiagonale Matrix

$$\mathbf{T}_{\alpha, \beta} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \cdots & 0 \\ \beta & \alpha & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \alpha & \beta \\ 0 & \cdots & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n,n} \quad (2.2)$$

ist.

- a) (4 punkte) Reformulieren Sie dieses Problem als lineares Ausgleichsrechnung-Problem der Form

$$\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$$

mit passenden  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m,k}$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^k$ ,  $k, m \in \mathbb{N}$ . Schreiben Sie hier  $k, m, \mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{x}$ :

$k =$

$m =$

$\mathbf{A} =$

$\mathbf{b} =$

$\mathbf{x} =$

**Solution:**

$k = 2$  (+.5 punkte)

$m = n$  (+.5 punkte)

$$A = \begin{pmatrix} z_1 & z_2 \\ z_2 & z_1 + z_3 \\ \vdots & \vdots \\ z_{n-1} & z_{n-2} + z_n \\ z_n & z_{n-1} \end{pmatrix} \quad (+2 \text{ punkte})$$

$\mathbf{b} = \mathbf{c}$  (.5 punkte)

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (.5 \text{ punkte})$$

- b) (2 Punkte) Bestimmen Sie  $\alpha^*$  und  $\beta^*$  für die in `leastsqr.py` definierten Vektoren  $\mathbf{z}$  und  $\mathbf{c}$ .

Hinweis: verwenden Sie `linalg.lstsq` aus `numpy`.

**Solution:**

(+1 correct implementation of  $A$ , +1 correct usage of `lstsq`).

Listing 2.1: `leastsqr_Solution.py`

```

1 import numpy as np
2
3 # Vektoren z & c
4 n = 10
5 z = np.arange(1,n+1)
6 c = np.arange(n,0,-1)
7
8 # Bilde Matrix A
9 A = np.zeros((n,2))
10 A[0,:] = np.array([z[0],z[1]])
11 for i in np.arange(1,n-1):
12     A[i,0] = z[i]
13     A[i,1] = z[i-1] + z[i+1]
14 A[-1,:] = np.array([z[-1],z[-2]])
15
16 # Loese Ausgleichsproblem
17 [x,res,rank,s] = np.linalg.lstsq(A,c)
18 a = x[0]
19 b= x[1]
20
21 # Gebe die Loesung aus
22 print 'alpha = ', a
23 print 'beta = ', b

```

Listing 2.2: `leastsqr_Solution.out`

```

1 alpha = -0.421052631579
2 beta = 0.578947368421

```

### 3 Aufgabe: 14 Punkte

Wir betrachten  $N$  Körper im dreidimensionalen Raum. Ihre Dynamik unterliegt einzig der Gravitation. Jeder Körper  $K_i$  hat eine Position  $\vec{q}_i \in \mathbb{R}^3$  und einen Impuls  $\vec{p}_i \in \mathbb{R}^3$  sowie eine Masse  $m_i$ . Wir fassen deren Positionen  $\vec{q}_i$  und Impulse  $\vec{p}_i$  in Vektoren zusammen:

$$\begin{aligned}\vec{q} &= [\vec{q}_1 \dots \vec{q}_N]^T \in \mathbb{R}^{3N} \\ \vec{p} &= [\vec{p}_1 \dots \vec{p}_N]^T \in \mathbb{R}^{3N}.\end{aligned}$$

Die Hamilton-Funktion  $\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p})$  lautet dann:

$$\mathcal{H}(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \vec{p}_i^T \vec{p}_i - G \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{m_i m_j}{\|\vec{q}_j - \vec{q}_i\|}.$$

Schliesslich fasst man noch die Positionen  $\vec{q}$  und Impulse  $\vec{p}$  in einen einzigen grossen Vektor  $\vec{y} = [\vec{q} \mid \vec{p}]^T$  zusammen. Die Bewegungsgleichungen ist gegeben bei ein System von gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung:

$$\dot{\vec{y}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{\vec{q}}(t) \\ \dot{\vec{p}}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}} \\ -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{q}} \end{bmatrix} = f(t, \vec{y})$$

mit  $f : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^{6N} \rightarrow \mathbb{R}^{6N}$  welches wir nun lösen wollen.

- a) (5 punkte) Implementieren Sie in `nbody.py` mithilfe obiger Formeln die Funktion  $f(\vec{y})$  korrekt für  $N$  Körper.

*Hinweis:*

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_i} &= \frac{\vec{p}_i}{m_i}, \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{q}_i} &= G \sum_{j \neq i} m_i m_j \frac{\vec{q}_i - \vec{q}_j}{\|\vec{q}_i - \vec{q}_j\|^3}.\end{aligned}$$

**Solution:**

(+2 for correct kinetic term, +3 for correct potential term)

- b) Implementieren Sie:

a) (2 punkte) das explizite Eulerverfahren,

b) (2 punkte) das implizite Eulerverfahren,

c) (2 punkte) die implizite Mittelpunktsregel.

*Hinweis:* Benutzen Sie die Funktion `fsolve` aus `scipy.optimize`.

- c) (3 Punkte) Implementieren Sie das velocity-Verlet Verfahren und eine kompatible Version der rechten Seite  $f$ . Achten Sie dabei auf die Verwendung korrekter Input-Werte.

**Solution:**

(+1 for correct rhs, +2 for correct velocity-verlet method)

Ihre Implementierung wird für zwei Körper mit den in der Vorlage angegebenen Anfangsbedingungen getestet.

**Solution:**

Listing 3.1: nbldoy

```

1 #!/usr/bin/env python
2 from numpy import *
3 from numpy.linalg import *
4 import scipy.optimize
5 from matplotlib.pyplot import *
6 from time import time
7
8
9 # Unteraufgabe a)
10
11 def F(q, p, m, D=3):
12     """The function f(y)
13
14     Input: q ... array with positions
15         p ... array with momenta
16         m ... array with masses
17         D ... space dimension, default equals 3.
18
19     Output: dq ... time-derivative of the positions
20         dp ... time-derivative of the momenta
21     """
22     N = q.size // D
23
24     dq = zeros_like(p)
25     for k in xrange(N):
26         mk = m[k]
27         pk = p[D*k:D*(k+1)]
28         dq[D*k:D*(k+1)] = 1.0/mk * pk
29
30     dp = zeros_like(q)
31     for k in xrange(N):
32         mk = m[k]
33         qk = q[D*k:D*(k+1)]
34         dpk = zeros_like(qk)
35         for i in xrange(N):
36             if i != k:
37                 mi = m[i]
38                 qi = q[D*i:D*(i+1)]
39                 no = norm(qi - qk)
40                 dpk += mk*mi/no**3 * (qi - qk)
41         dp[D*k:D*(k+1)] = G * dpk
42
43     return dq, dp
44
45
46 def rhs(y):
47     """Right hand side
48
49     Input: y ... array of q and p: y = (q, p)
50
51     Output: dy ... time-derivative of y
52     """
53     q, p = hsplit(y, 2)
54     dy = hstack(F(q, p, m))
55     return dy

```

```

56
57
58
59 # Unteraufgabe b)
60
61 def integrate_EE(y0, xStart, xEnd, steps, flag=False):
62     """IntegrateODEwithexplicitEulermethod
63
64     Input: y0...initialcondition
65     xStart...startx
66     xEnd...endxx
67     steps...numberofsteps(h=(xEnd-xStart)/N)
68     flag...flag==False return complete solution: (phi, phi', t)
69     flag==True return solution at endtime only: phi(tEnd)
70
71     Output: x...variable
72     y...solution
73 """
74     h = (xEnd - xStart) / (1.0*steps)
75     x = zeros(steps+1)
76     y = zeros((steps+1, size(y0)))
77
78     x[0] = xStart
79     y[0, :] = y0.reshape(size(y0),)
80     for i in xrange(steps):
81         x[i+1] = xStart + (i + 1)*h
82         y[i+1, :] = y[i, :] + h*rhs(y[i, :])
83
84     if flag:
85         return x[-1], y[-1][:]
86     else:
87         return x, y
88
89
90 def integrate_IE(y0, xStart, xEnd, steps, flag=False):
91     """IntegrateODEwithimplicitEulermethod
92
93     Input: y0...initialcondition
94     xStart...startx
95     xEnd...endxx
96     steps...numberofsteps(h=(xEnd-xStart)/N)
97     flag...flag==False return complete solution: (phi, phi', t)
98     flag==True return solution at endtime only: phi(tEnd)
99
100    Output: x...variable
101    y...solution
102 """
103    h = (xEnd - xStart) / (1.0*steps)
104    x = zeros(steps+1)
105    y = zeros((steps+1, size(y0)))
106
107    x[0] = xStart
108    y[0, :] = y0
109    for i in xrange(steps):
110        x[i+1] = xStart + (i + 1)*h
111        F = lambda yph: yph - y[i, :] - h*rhs(yph)
112        y[i+1, :] = scipy.optimize.fsolve(F, y[i,:]+h*rhs(y[i,:]))
113
114    if flag:
115        return x[-1], y[-1][:]
116    else:
117        return x, y
118
119
120 def integrate_IM(y0, xStart, xEnd, steps, flag=False):
121     """IntegrateODEwithimplicitmidpointrule
122
123     Input: y0...initialcondition
124     xStart...startx
125     xEnd...endxx
126     steps...numberofsteps(h=(xEnd-xStart)/N)

```

```

127 |     flag==False return complete_solution(phi,phi',t)
128 |     flag==True return solution_at_endtime_only(phi(tEnd))
129 |
130 |     Output: x... variable
131 |     solution
132 | """
133 |         h = (xEnd - xStart) / (1.0*steps)
134 |         x = zeros(steps+1)
135 |         y = zeros((steps+1, size(y0)))
136 |
137 |         x[0] = xStart
138 |         y[0, :] = y0
139 |         for i in range(steps):
140 |             x[i+1] = xStart + (i + 1)*h
141 |             F = lambda yph: yph - y[i, :] - h*rhs(0.5*(yph + y[i,:]))
142 |             y[i+1, :] = scipy.optimize.fsolve(F, y[i,:]+h*rhs(y[i,:]))
143 |
144 |         if flag:
145 |             return x[-1], y[-1][:]
146 |         else:
147 |             return x, y
148 |
149 |
150 # Unteraufgabe c)
151
152 def rhs_vv(q, D=3):
153     """Right hand side
154
155     Input: q ... array with positions
156
157     Output: dp ... time-derivative of the velocities
158     """
159     N = q.size // D
160     dp = zeros_like(q)
161     for k in xrange(N):
162         qk = q[D*k:D*(k+1)]
163         dpk = zeros_like(qk)
164         for i in xrange(N):
165             if i != k:
166                 mi = m[i]
167                 qi = q[D*i:D*(i+1)]
168                 no = norm(qi - qk)
169                 dpk += mi/no**3 * (qi - qk)
170         dp[D*k:D*(k+1)] = G * dpk
171
172     return dp
173
174
175 def integrate_VV(y0, xStart, xEnd, steps, flag=False):
176     """IntegrateODE with velocity verlet rule
177
178     Input: y0... initial condition
179     xStart... start x
180     xEnd... end x
181     steps... number of steps (h=(xEnd-xStart)/N)
182     flag... flag==False return complete_solution(phi,phi',t)
183     flag==True return solution_at_endtime_only(phi(tEnd))
184
185     Output: x... variable
186     solution
187     """
188     h = (xEnd - xStart) / (1.0*steps)
189     x = zeros(steps+1)
190     y = zeros((steps+1, size(y0)))
191
192     x[0] = xStart
193     y[0, :] = y0
194
195     t = x
196     z, v = hsplit(y0,2)
197     for k in xrange(steps):

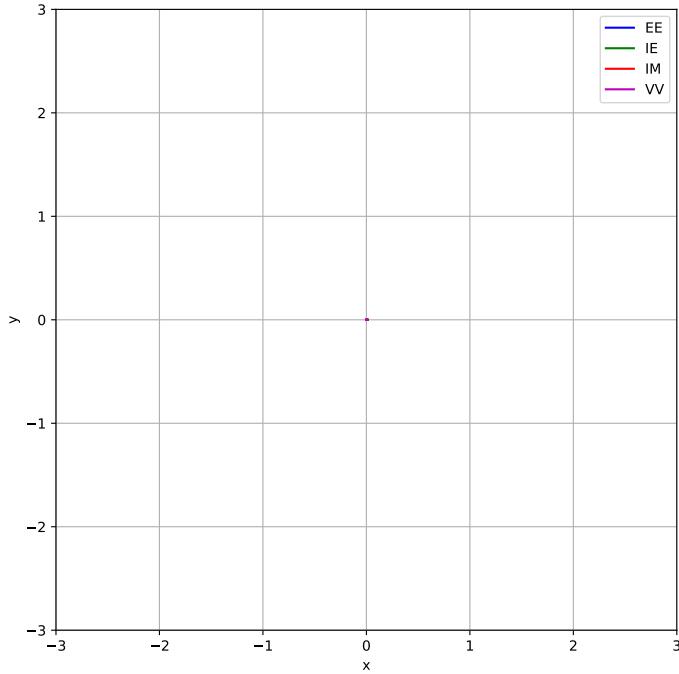
```

```

198     rz = rhs_vv(z)
199     z1 = z + h*v+0.5*h*h*rz
200     v1 = v + 0.5*h*(rz + rhs_vv(z1))
201     y[k+1,:] = 1.*hstack((z1,v1))
202     z = 1.0*z1
203     v = 1.0*v1
204     t[k+1] = k*h
205
206     if flag:
207         return x[-1], y[-1] [:]
208     else:
209         return x, y
210
211
212 # Tests for two bodies
213 G = 1.0
214 m = array([500.0, 1.0])
215 q0 = hstack([0,0,0, 2,0,0])
216 p0 = hstack([0,0,0, 0,sqrt(m[0]/q0[3]),0])
217 y0 = hstack([q0, p0])
218
219 # Compute
220 T = 3
221 nrsteps = 5000
222
223 t_ee, y_ee = integrate_EE(y0, 0, T, nrsteps, False)
224 t_ie, y_ie = integrate_IE(y0, 0, T, nrsteps, False)
225 t_im, y_im = integrate_IM(y0, 0, T, nrsteps, False)
226 t_vv, y_vv = integrate_VV(y0, 0, T, nrsteps, False)
227
228 # Plot
229 fig = figure(figsize=(12,8))
230 ax = fig.gca()
231 ax.set_aspect("equal")
232 ax.plot(y_ee[:,0], y_ee[:,1], "b-")
233 ax.plot(y_ee[:,3], y_ee[:,4], "b-", label="EE")
234
235 ax.plot(y_ie[:,0], y_ie[:,1], "g-")
236 ax.plot(y_ie[:,3], y_ie[:,4], "g-", label="IE")
237
238 ax.plot(y_im[:,0], y_im[:,1], "r-")
239 ax.plot(y_im[:,3], y_im[:,4], "r-", label="IM")
240
241 ax.plot(y_vv[:,0], y_vv[:,1], "m-")
242 ax.plot(y_vv[:,3], y_vv[:,4], "m-", label="VV")
243
244 ax.grid(True)
245 ax.set_xlim(-3,3)
246 ax.set_ylim(-3,3)
247 ax.legend(loc="upper right")
248 ax.set_xlabel("x")
249 ax.set_ylabel("y")
250 fig.savefig("zwei.pdf")

```

**Solution:**



## 4 Aufgabe: 6 Punkte

Wir betrachten die Funktion

$$\int_{\vec{x} \in [0,1]^d} |x_1 + \dots + x_d|^2 d\vec{x},$$

- a) (1 punkt) Implementieren Sie in `MonteCarlo.py` eine Python-Funktion `mcquad(d,k)`, die das obige Integral mit der Monte-Carlo-Methode mit  $N = 10^k$  Zufallsvektoren numerisch berechnet.
- b) (3 punkte) Verwenden Sie diese Funktion mit  $k = 4$  und  $d = 10$  für  $M = 100$  verschiedene Experimente. Bestimmen Sie Mittelwert und

$$\tilde{\sigma}_M = \sqrt{\frac{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M z(t_i)^2 - \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M z(t_i)\right)^2}{M-1}}.$$

Welche Aussage lässt sich daraus über die Genauigkeit der Approximation ableiten?

**Solution:**

(+1 for Mittelwert, +1 for sigma, +1 for "it's the 68% confidence interval for the approximate integral value")

- c) (2 punkte) Bestimmen und printen Sie das Vertrauensintervall für  $d = 2, \dots, 10$  und  $k = 4$  und  $M = 100$ .

**Solution:**

(+2 for correct Vertrauensintervall)

## Solution:

Listing 4.1: Multidimensionale Monte-Carlo Integration.

```
1 from numpy import array, sqrt, sum
2 from numpy.random import rand
3
4 func = lambda x: sum(x, axis=1)**2
5
6 # Unteraufgabe a)
7
8 def mcquad(d, k):
9     "Argumente d und k wie in der Aufgabenstellung"
10    N = 10 ** k
11    # Sample
12    x = rand(N, d)
13    x = func(x)
14    # Integral
15    I = sum(x) / N
16    return I
17
18 # Unteraufgabe b)
19 k = 4
20 d = 10
21 M = 100
22 exval = d/3.0 + 0.25*d*(d - 1)
23 results = []
24
25 for m in xrange(M):
26     ex = mcquad(d, k)
27     results.append(ex)
28 ex = array(results)
29 ev = sum(ex, axis=0) / M
30 sgm = sqrt( (sum(ex**2)/M - ev**2) / (M-1.) )
31
32 print("Dimension: %d" % d)
33 print('Exakt Wert: %f' % exval)
34 print('Mittelwert: %f' % ev)
35 print('Sigma: %f' % sgm)
36 print('*'*16)
37
38 # Unteraufgabe c)
39 k = 4
40 M = 100
41
42 for d in xrange(2, 11):
43     print("Dimension: %d" % d)
44     exval = d/3.0 + 0.25*d*(d - 1)
45     print('Exakt Wert: %f' % exval)
46     results = []
47
48     for m in xrange(M):
49         ex = mcquad(d, k)
50         results.append(ex)
51
52     ex = array(results)
53     ev = sum(ex, axis=0) / M
54     sgm = sqrt( (sum(ex**2)/M - ev**2) / (M-1.) )
55     a = ev-sgm
56     b = ev+sgm
57     print('Vertrauensintervall: [%f, %f]' % (a, b))
58     print('*'*16)
```

## 5 Aufgabe: 16 Punkte

- a) (2 Punkte) Implementieren Sie in `RungeKutta.py` ein Runge-Kutta-Schritt mit dem Butcher Tableau der so genannten *England Formel*:

	0			
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	2
1	0	-1	2	
	$\frac{1}{6}$	0	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$

- b) (3 Punkte) Finden Sie empirisch die Konvergenzordnung dieses Verfahrens indem Sie es für die Lösung der Gleichung  $\ddot{y} = -y(t)$  auf  $[0, 10]$  verwenden.

**Solution:**

(of these points, 1 for saying it is order 4).



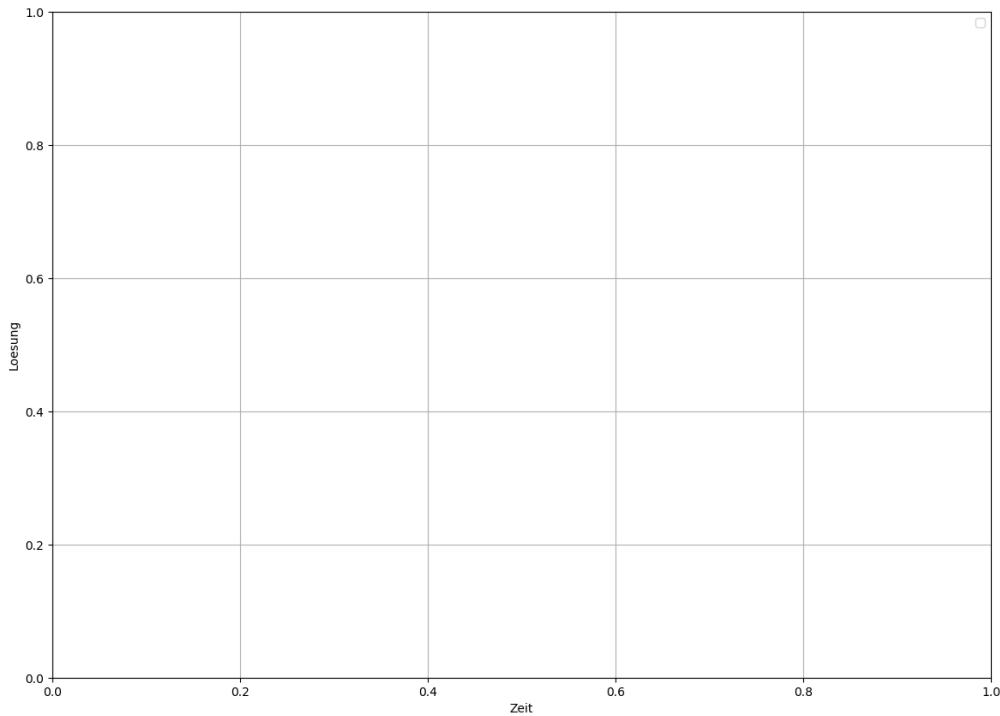
- c) (2 Punkte) Verwenden Sie diese Methode, um die Gleichung

$$\begin{cases} \ddot{y} = 10025 - 10025y - 10\dot{y} \\ y(0) = 2 \\ \dot{y}(0) = 95 \end{cases} \quad (5.1)$$

auf  $[0, 1]$  mit  $2^{12}$  Zeitschritten zu lösen. Plotten Sie die numerische Lösung.

**Solution:**

2 Punkte.



- d) (2 Punkte) Kann man mit dieser Methode in 5 Zeitschritten eine glaubwürdige Annäherung der Lösung der letzten Gleichung zur Zeit  $T = 1$  erhalten? Warum?

**Solution:**

2 Punkt fuer "Nein, Stabilitaetsgebiet/Problem".

- e) (7 Punkte) Implementieren Sie die Stabilitätsfunktion  $S : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ . Das Template verwendet dieses  $S(z)$  um den Stabilitätsbereich der Runge-Kutta-Methode zu plotten. Bestimmen Sie durch Ablesen aus diesem Bild eine maximale Zeitschrittweite  $h$ , die eine stabile Lösung für letztgenannte Differentialgleichung garantiert. Notieren Sie die Herleitung und den Wert auf Papier.

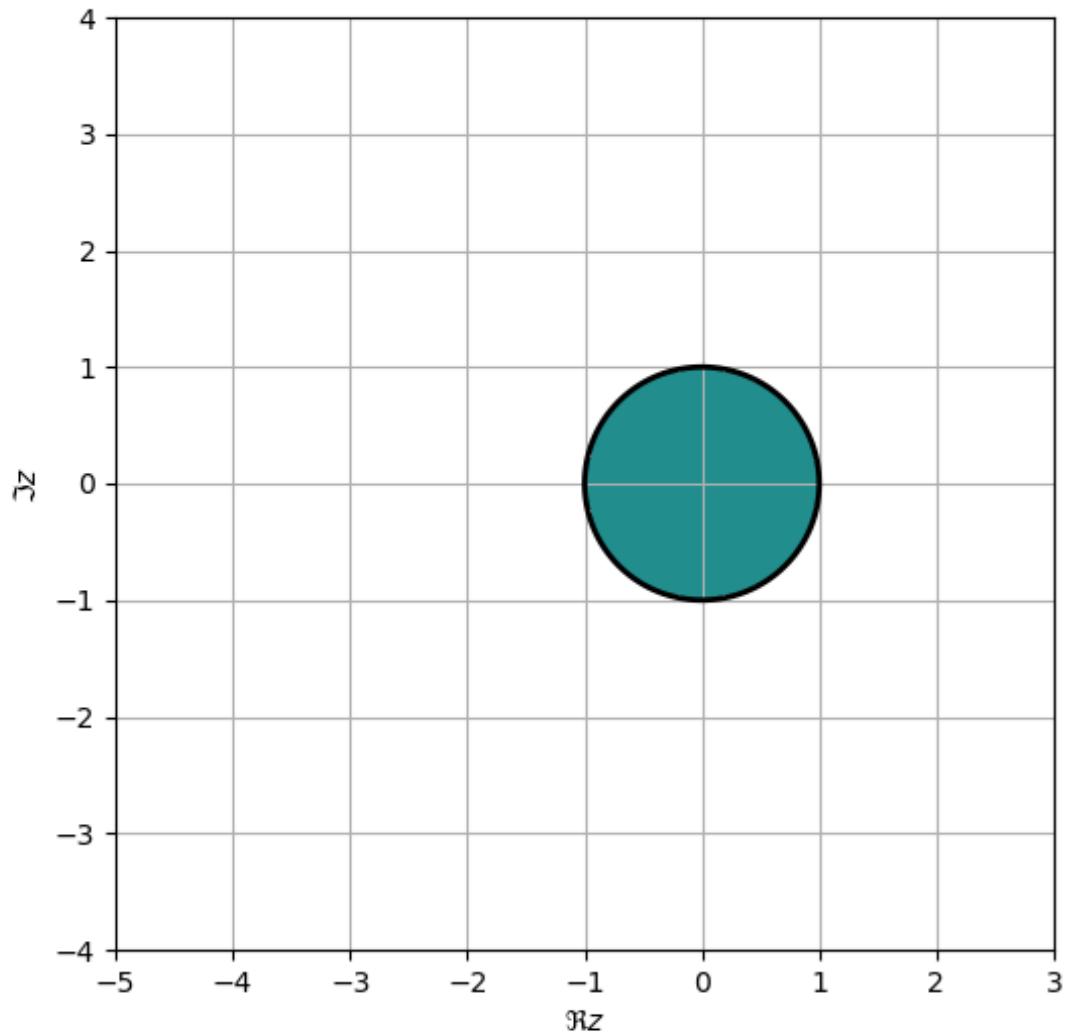
**Solution:**

(+2 for theoretical derivation of S, +1 for correct implementation of S in Python, +1 for correct linearized system, +1 for saying  $\lambda$  is one of the eigenvalues, +1 for correct value for  $\lambda$ , +1 for  $h \simeq 0.0275$ ).

The matrix corresponding to the first order linearized system is

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -10025 & -10 \end{pmatrix}$$

whose eigenvalues can be computed to be  $\lambda = -5 \pm 100i$ . Their norm is 100.125, thus (looking at the picture) the biggest  $h$  so that  $|S(\lambda h)| < 1$  is approx.  $2.75/100.125 \simeq 0.0275$ .



## Solution:

Listing 5.1: Runge-Kutta Verfahren

```
1 #!/usr/bin/env python
2 from numpy import *
3 from matplotlib.pyplot import *
4
5 # England Formel
6 bs_A = array([[0.0, 0.0, 0.0, 0.0],
7               [2.0, 0.0, 0.0, 0.0],
8               [1.0, 1.0, 0.0, 0.0],
9               [0.0, -4.0, 8.0, 0.0]]) / 4.0
10
11 bs_b = array([1.0, 0.0, 4.0, 1.0]) / 6.0
12
13 bs_c = array([0.0, 0.5, 0.5, 1.0])
14
15
16 # ex. a
17
18 def RK_step(rhs, A, b, c, t, y, h):
19     """
20         Makes a single Runge-Kutta step of size h.
21
22         Input:
23         rhs: right hand side of considered differential eq.
24         A, b, c: Butcher Schema
25         t: Current time t_i
26         y: Current solution y_i
27         h: Timestep size
28     """
29
30     tnew = t
31     ynew = y
32     s = A.shape[0]
33     k = zeros((2, s))
34
35     for i in xrange(s):
36         k[:,i] = rhs(t + c[i]*h, y + h*dot(A[i,:].T, k.T))
37
38     tnew = t + h
39     ynew = y + h * squeeze(dot(k, b))
40
41     return tnew, ynew
42
43 def RK(rhs, A, b, c, y0, tstart, tend, N):
44     """
45         Integrate the equation with a Runge-Kutta.
46
47         Input:
48         rhs: right hand side of considered differential eq.
49         A, b, c: Butcher Schema
50         y0: initial condition
51         tstart, tend: start, end time
52         N: number of steps
53     """
54
55     y = zeros((2, N+1))
56     t = zeros((N+1,))
57     t[0] = tstart
58     y[:,0] = y0
59     h = (tend - tstart) / float(N)
60     for n in xrange(N):
61         t[n+1], y[:,n+1] = RK_step(rhs, A, b, c, t[n], y[:,n], h)
62
63     return t, y
64
65 # ex b
66
67 IV = array([0.0, 1.0])
68 T = 10.0
```

```

67
68 Ns = 2**arange(2, 12)
69 hs = T / Ns
70 listErrors = []
71
72 rhs = lambda t, y: array([y[1], -y[0]])
73
74 for N in Ns:
75     t, y = RK(rhs, bs_A, bs_b, bs_c, IV, 0.0, T, N)
76     err = max(abs(y[0,:] - sin(t)))
77     listErrors.append(err)
78
79 k = 4 # Konvergenzordnung
80
81 figure(figsize=(14, 10))
82 loglog(hs, listErrors, 'x-', label='Fehler')
83 loglog(hs, hs**k, label='$h^{:d}'.format(int(k)))
84 xlabel('Fehler')
85 xlabel('Schrittweite')
86 legend()
87 grid(True)
88 savefig('RK_EnglandFehler.png')
89
90
91 # ex c
92
93 IV = array([2.0, 95.0])
94 T = 1.0
95
96 rhs = lambda t, y: array([y[1],
97                           10025 - 10025*y[0] - 10.0*y[1]]) # === 0.5 Punkt
98
99 tex, yex = RK(rhs, bs_A, bs_b, bs_c, IV, 0.0, T, 2**12)
100 yex = yex[0,:]
101
102 t, y = RK(rhs, bs_A, bs_b, bs_c, IV, 0.0, T, 5) # === 0.5 Punkt
103 y = y[0,:]
104
105 figure(figsize=(14, 10))
106 plot(t, y, label='N=5') # === 0.5 Punkt
107 plot(tex, yex, label='N=2^{12}')
108 legend()
109 xlabel('Zeit')
110 ylabel('Loesung')
111 xlim(0.0, T)
112 grid(True)
113 savefig('RK_EnglandLoesung.png')
114
115
116 # ex e
117
118 from numpy.linalg import det
119
120
121 def S(z):
122     Id = identity(4)
123     oneT = ones(4)
124     num = det(Id - z*bs_A + z*outer(oneT, bs_b.T))
125     den = det(Id - z*bs_A)
126     result = num / den
127     return result
128
129
130 xl = -5.0
131 xr = 3.0
132 yl = -4.0
133 yr = 4.0
134 xd = linspace(xl, xr, 200)
135 yd = linspace(yl, yr, 200)
136 X, Y = meshgrid(xd, yd)
137 Z = X + 1j * Y

```

```
138 | Sz = array(map(S, Z.flat)).reshape(Z.shape)
139 |
140 | figure(figsize=(6, 6))
141 | contourf(X, Y, where(abs(Sz) <= 1.0, 1.0, -inf), levels=linspace(0, 2, 51))
142 | contour(X, Y, abs(Sz), levels=[1.0], colors='k', linewidths=[2])
143 | grid(True)
144 | xlim(-5, 3)
145 | ylim(-4, 4)
146 | xlabel(r'$\Re z$')
147 | ylabel(r'$\Im z$')
148 | savefig('RK_EnglandStabilityDomain.png')
```