

Serie 5

Abgabedatum: Di. 03.04 / Mi. 04.03, in den Übungsgruppen, oder im HG J 68.

Koordinatoren: Kjetil Olsen Lye, HG G 56.1 kjetil.lye@sam.math.ethz.ch

Webpage: <http://metaphor.ethz.ch/x/2018/fs/401-1662-10L>

1. Teilchen im Gravitationsfeld einer Punktmasse

Bewegungsgleichungen können oft als Hamiltonisches System

$$\dot{\underline{q}} = \nabla_{\underline{p}} \cdot H(\underline{p}, \underline{q}) \quad (1)$$

$$\dot{\underline{p}} = -\nabla_{\underline{q}} \cdot H(\underline{p}, \underline{q}) \quad (2)$$

geschrieben werden. Für ein Teilchen im Gravitationsfeld der Sonne gilt

$$H = 1/2m \|\underline{p}\|^2 + U(\underline{q})$$

wobei

$$U(\underline{q}) = U(q) = -\frac{GM}{q}.$$

Wir setzen $G = M = m = 1$.

- Leiten Sie die Bewegungsgleichungen eines Teilchens in im Gravitationsfeld einer Punktmasse her. Verwenden Sie die Newtonschen Gesetze. Vergewissern Sie sich, dass (1) mit der von Ihnen hergeleiteten ODE übereinstimmt.
- Spalten Sie den Hamiltonian in zwei Teile $T(\underline{p})$ und $V(\underline{q})$. Welchen physikalischen Grössen entsprechen T und V ?
- Schreiben Sie die beiden ODEs welche durch das Splitting entstehen auf und lösen Sie beide analytisch.
- Implementieren Sie Strang-Splitting oder eines der vielen Splittingverfahren aus Code 8.4.9 im Skript, die Parameter finden Sie auch in `splitting_parameters.py`.
- Integrieren Sie (1) mit Startwert $p(0) = (0, 1)$, $q(0) = (1, 0)$ bis zur Zeit $t = 50$.
Plotten Sie $q_2 - q_1$, $p - q$ sowie $H - t$, $T - t$ und $V - t$. Die letztem drei Grössen plotten Sie am besten in einem Plot.
 - Versuchen Sie andere Startwerte.
 - Untersuchen Sie das Langzeitverhalten.
 - Probieren Sie auch ganz kleine Schrittweiten aus.

Bitte wenden!

2. Kernaufgabe: Pendel mit Reibung und externer Kraft

Modellierung der Physik

Wir betrachten das mathematische Pendel, welches durch folgende Gleichung ($l = g = 1$) beschrieben ist:

$$\ddot{\varphi} + \mu\dot{\varphi} + \frac{g}{l} \sin \varphi = F(t) \quad (3)$$

mit externer Kraft:

$$F(t) = A \sin(\omega t) \quad (4)$$

mit Frequenz $\omega = 1.3$, Amplitude $A = 1$ und Reibung $\mu = 0$ bzw. $\mu = 0.1$. Verwenden Sie die Anfangswerte $\varphi(0) = \frac{\pi}{3}$ und $\dot{\varphi}(0) = 0$.

a) Lösen Sie (3) mit Runge-Kutta aus `ode45`.

b) Lösen Sie (3) mit den Splitting-Verfahren `SS`, `PRKS6`, `Y61`, `KL8`.

Hinweis: Sie finden die Parameter der verschiedenen Splittingverfahren in `splitting_parameters.py`.

c) Plotten Sie die Auslenkung $\varphi(t)$ und die Trajektorien im Phasenraum $\varphi(t), \dot{\varphi}(t)$.

3. Kernaufgabe: Molekulardynamik II

Modellierung der Physik

Wir betrachten ein System von N Teilchen, deren paarweise Wechselwirkung durch das Lennard-Jones Potential $U(r) = U(\|\underline{x}\|)$ gegeben ist:

$$U(r) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right) \quad (5)$$

und:

$$V(\underline{q}_1, \dots, \underline{q}_N) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N U(\|\underline{q}_i - \underline{q}_j\|) \quad (6)$$

Die Hamiltonfunktion des Systems ist dann:

$$\mathcal{H}(\underline{q}_1, \dots, \underline{q}_N, \underline{p}_1, \dots, \underline{p}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{\underline{p}_i^2}{2m} + V(\underline{q}_1, \dots, \underline{q}_N). \quad (7)$$

Wir wollen die Zeitevolution mittels Splittingverfahren berechnen.

a) Leiten Sie die Splittingoperatoren Φ_a, Φ_b aus den Hamiltongleichungen:

$$\begin{aligned} \dot{\underline{q}}_i &= \nabla_{\underline{p}_i} \mathcal{H} \\ \dot{\underline{p}}_i &= -\nabla_{\underline{q}_i} \mathcal{H} \end{aligned} \quad (8)$$

analog dem Skript her.

b) Implementieren Sie diese Operatoren in den beiden Funktionen `PhiT`, `PhiV`.

c) Studieren Sie die Klasse `SplittingParameters` aus dem Skript und benutzen Sie ihre Funktion `intsplit` um die Zeitevolution zu berechnen. Verändern Sie den Code dieser Klasse nicht. Schreiben Sie `PhiV`, `PhiT` so, dass sie kompatibel sind.

d) Verwenden Sie die Methoden `SS` ("Strang") und `BM42` zur Zeitintegration. Plotten Sie die Erhaltungsgrößen.