D-MATH
Dr. Vasile Gradinaru
Kjetil Olsen Lye

Numerische Methoden

FS 2018

Serie 7

Abgabedatum: Di. 22.05 / Mi. 23.05, 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. 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

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

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.*

Bitte wenden!

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 $g = 9.81\ \mathrm{ms}^{-2}$. 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 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 $\mathrm{agm}(x, y)$ zweier Zahlen. Es berechnet sich iterativ wie folgt: $x_0 := x$, $y_0 := y$ und

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

Siehe nächstes Blatt!

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

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

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 $0 < k < 1$.

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.

2. *Nichtlineares System*

Das nichtlineare Gleichunssystem

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

$$x^2 + y^2 + x - \frac{11}{20} = 0 \tag{3}$$

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.

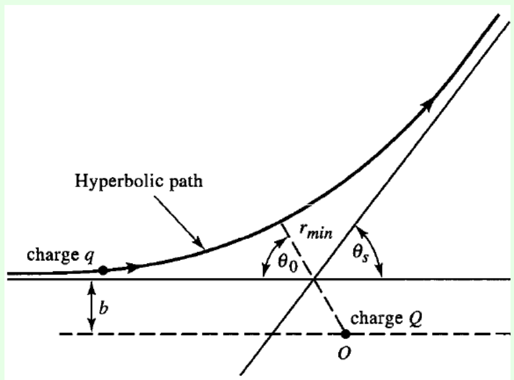
3. Kernaufgabe: Streuung an einem Potential

Modellierung der Physik

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

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

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 $r_{\text{min}}(b)$ zwischen q und Q. Die Energie E und der Drehimpuls L des Teilchens q sind Erhaltungsgrössen und an diesem Punkt gegeben als:

$$E \equiv E(r_{\text{min}}) = \frac{L^2}{2r_{\text{min}}^2} + U(r_{\text{min}}) \tag{5}$$

$$L \equiv b\sqrt{2E} \tag{6}$$

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 $r_{\text{min}}(b)$ 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 $r_{\text{min}}(b)$ gegen b.

c) Der Streuungswinkel θ_s ist gegeben als das Integral:

$$\theta_s(b) = \pi - 2\int_{r_{\text{min}}(b)}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\mathrm{d}r \tag{7}$$

von:

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r} = \frac{b}{r^2}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{b^2}{r^2}-\frac{U(r)}{E}}}. \tag{8}$$

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 $E(r_{\min}) = 0.2$ 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.

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?

Bitte wenden!

4. *Polynomfit und die Runge Funktion*

Die Runge Funktion ist definiert als:

$$f(x) := \frac{1}{1+x^2}\,. \tag{9}$$

Wir wollen diese Funktion auf dem Interval $[-5,5]$ mit einem Polynom $P_n(x)$ von Grad n approximieren. Dazu schreiben wir ein lineares Ausgleichsproblem mit m gleichmässig in $[-5,5]$ verteilten Punkten $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=1}^m$ wie folgt:

$$\mathbf{A}\underline{c} = \underline{b} \tag{10}$$

wobei $\underline{c}$ die $n+1$ Koeffizienten des Polynoms P_n sind.

a) Finden Sie die Matrix $\mathbf{A}$ und die rechte Seite $\underline{b}$.

b) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem mit der **QR**-Zerlegung von $\mathbf{A}$.

c) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem mit der Singulärwertzerlegung von $\mathbf{A}$.

d) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem mit der Funktion `lstsq` aus `numpy.linalg`.

e) Wiederholen Sie die Aufgabe für Polynome mit Grad $2 \leq n \leq 14$ und jeweils $m = 20$ und $m = 40$.

5. Kernaufgabe: Adaptive Methoden für steife Systeme

Aufgabenstellung

a) Implementieren Sie die Rosenbrock-Wanner Methoden der Ordnung 2 und 3. Es sollen Funktionen `row_2_step(f, Jf, yi, h)` und `row_3_step(f, Jf, yi, h)` geschrieben werden, die ausgehend vom Wert $y_i(t_i)$ genau einen Zeitschritt h der entsprechenden Methode berechnen und die Propagierte $y_{i+1}(t_i + h)$ zurück geben.

Hinweis: Die Parameter sind im Template `stiff_row_Template.py` erklärt.

b) Lösen Sie die logistische Differentialgleichung:

$$\dot{y}(t) = \lambda y(t)(1 - y(t))$$

mit dem Anfangswert $y(0) = c = 0.01$ und $\lambda = 25$ bis zum Zeitpunkt $T = 2$. Benutzen Sie $N = 100$ Zeitschritte. Plotten Sie die numerischen Lösungen $y(t)_{\texttt{ROW}}$ sowie die Fehler $y(t)_{\texttt{ROW}} - y(t)$ beider Methoden gegen die Zeit. Wie gross kann λ sein, bevor der Fehler der `ROW-2` Methode einen maximalen Wert von 0.05 überschreitet?

c) Messen Sie die Konvergenzordnung beider Methoden. Benutzen Sie hierfür obige Gleichung und Anfangswerte mit $\lambda = 10$. Wählen Sie $N = [2^4, \ldots, 2^{12}]$ und berechnen Sie den Fehler zum Endzeitpunkt $T = 2$ gegenüber der exakten Lösung:

$$y(t) = \frac{ce^{\lambda t}}{1 - c + ce^{\lambda t}}$$

Plotten Sie den Fehler gegen die Anzahl Schritte doppelt logarithmisch.

d) Implementieren Sie eine adaptive Strategie basierend auf den `ROW-2` und `ROW-3` Methoden. Verwenden Sie als Fehlerschätzer die Norm:

$$\varepsilon_i := \|y(t_i)_{\texttt{ROW-2}} - y(t_i)_{\texttt{ROW-3}}\|_2$$

Wählen Sie den initialen Zeitschritt als $h_0 = T/(100\,(\|f(y_0)\|_2 + 0.1))$ und passen Sie die Grösse des nächsten Zeitschritts durch Verkleinern ($h_{j+1} = \frac{h_j}{2}$) oder Vergrössern ($h_{j+1} = 1.1 h_j$) an.

e) Testen Sie die Implementation wiederum an der logistischen Differentialgleichung mit $\lambda = 50$. Wie viele Zeitschritte werden insgesamt zur Lösung benötigt? Plotten Sie die numerische Lösung $y(t)_{\texttt{ADA}}$ sowie die Fehler $y(t)_{\texttt{ADA}} - y(t)$ gegen die Zeit.

f) Lösen Sie das folgende gekoppelte System:

$$\dot{y}_0(t) = -76\, y_0(t) - 25\sqrt{3}\, y_1(t)$$
$$\dot{y}_1(t) = -25\sqrt{3}\, y_0(t) - 26\, y_1(t)$$

mit Anfangswerten $y_0(0) = 1$ und $y_1(0) = 1$ bis zum Zeitpunkt $T = 1$ mit dem adaptiven Verfahren und einer Anfangsschrittweite von $h = 0.1$, plotten Sie $y(t)$.

g) Lösen Sie die folgende sehr steife Gleichung:

$$\dot{y}(t) = \lambda y^2(t)(1 - y^2(t))$$

mit dem Anfangswert $y(0) = 0.01$ und $\lambda = 500$. Plotten Sie die numerische Lösung $y(t)_{\texttt{ADA}}$ sowie die Grösse der Zeitschritte gegen die Zeit. Wie viele Zeitschritte benötigt dieses Verfahren und was ist der kleinste Zeitschritt? Wie viele Zeitschritte dieser Grösse würde ein nicht-adapives Verfahren benötigen?

Bitte wenden!

6. *Nichtlineares System II*

Es sollen alle Nullstellen des nichtlinearen Gleichunssystems:

$$f_1(x, y) = 0 \tag{11}$$
$$f_2(x, y) = 0 \tag{12}$$

gefunden werden, wobei die Funktionen f_1 und f_2 definiert sind als:

$$f_1(x, y) = e^{x^2 - y^2} + x^2 + y - \frac{6}{5} \tag{13}$$
$$f_2(x, y) = \left(x + \frac{1}{4}\right)^2 + \left(y + \frac{3}{4}\right)^2 - 1\,. \tag{14}$$

a) Plotten Sie mittels `contour` die implizit definierten Funktionen $f_1(x, y) = 0$ und $f_2(x, y) = 0$ um alle Lösungen des nichtlinearen Gleichungssystems grob zu lokalisieren. Finden Sie dann alle Lösungen genau mittels eines Newton-Verfahren.

b) Verwenden Sie ein Newton-Verfahren um die implizit definierte Funktion $f_1(x, y) = 0$ explizit zu berechnen und plotten.