D-MATH
Dr. Vasile Gradinaru
Marco Petrella

Numerische Methoden

FS 2019

Serie 6

Abgabedatum: Fr. 5.4, in den Übungsgruppen
Koordinatoren: Marco Petrella, HG J 45 `marco.petrella@sam.math.ethz.ch`
Webpage: http://metaphor.ethz.ch/x/2019/fs/401-1662-10L

1. *Simples Splittingverfahren*

Die folgende ODE beschreibt die Drehung und gleichzeitiges Schrumpfen eines Vektors in $\mathbb{R}^2$.

$$\frac{d}{dt}\underline{y} = \frac{dR}{dt} \cdot R^{-1} \cdot \underline{y} + b\,\underline{y} \tag{1}$$

mit $b = -0.1$ und der Rotationsmatrix

$$R(t) = \begin{pmatrix} \cos\theta t & -\sin\theta t \\ \sin\theta t & \cos\theta t. \end{pmatrix} \tag{2}$$

a) Identifizieren Sie die Rotations- und Streckungsterme in der ODE. Splitten Sie die ODE in die zwei Terme.

b) Lösen Sie die beiden ODEs welche Sie durch das Splitting erhalten haben analytisch.

Hinweis: Die beiden Terme haben eine klare geometrische Bedeutung. Nutzen Sie dies aus um analytische Lösungen zu finden.

c) Implementieren Sie das Strang-Splittingverfahren und integrieren Sie die ODE mit dem Startwert $\underline{y} = (1, 0)$ bis $t = 100$.

Hinweis: Implementieren Sie autonome Lösungsoperatoren.

2. *Teilchen im Gravitationsfeld einer Punktmasse*

Bewegungsgleichungen können oft als Hamiltonisches System

$$\dot{\underline{q}} = \nabla_{\underline{p}} \cdot H(\underline{p}, \underline{q}) \tag{3}$$
$$\dot{\underline{p}} = -\nabla_{\underline{q}} \cdot H(\underline{p}, \underline{q}) \tag{4}$$

geschrieben werden. Für ein Teilchen im Gravitationsfeld der Sonne gilt

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

wobei

$$U(\underline{q}) = U(q) = -\frac{G\,M}{q}.$$

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

a) Leiten Sie die Bewegungsgleichungen eines Teilchens in im Gravitationsfeld einer Punktmasse her. Verwenden Sie die Newtonschen Gesetze. Vergewissern Sie sich, dass (3) mit der von Ihnen hergeleiteten ODE übereinstimmt.

b) Spalten Sie den Hamiltonian in zwei Teile $T(\underline{p})$ und $V(\underline{q})$. Welchen physikalischen Grössen ensprechen T und V?

c) Schreiben Sie die beiden ODEs welche durch das Splitting entstehen auf und lösen Sie beide analytisch.

d) Implementieren Sie Strang-Splitting oder eines der vielen Splittingverfahren aus Code 2.4.9 im Skript, die Parameter finden Sie auch in `splitting_parameters.py`.

e) Integrieren Sie (3) 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.

3. Kernaufgabe: Pendel mit Reibung und externer Kraft

Modellierung der Physik

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

$$\ddot{\varphi} + \mu\dot{\varphi} + \frac{g}{l}\sin\varphi = F(t) \tag{5}$$

mit externer Kraft:

$$F(t) = A\sin(\omega t) \tag{6}$$

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 (5) mit Runge-Kutta aus `ode45`.

b) Lösen Sie (5) 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 $\varphi(t)$, $\dot{\varphi}(t)$.

4. 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:

$$U(r) = 4\epsilon\left(\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right) \tag{7}$$

und:

$$V(\underline{q}_1, \ldots, \underline{q}_N) := \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ i\neq j}}^{N} U(\|\underline{q}_i - \underline{q}_j\|) \tag{8}$$

Die Hamiltonfunktion des Systems ist dann:

$$\mathcal{H}(\underline{q}_1, \ldots, \underline{q}_N, \underline{p}_1, \ldots, \underline{p}_N) = \sum_{i=1}^{N}\frac{\underline{p}_i^2}{2m} + V(\underline{q}_1, \ldots, \underline{q}_N)\,. \tag{9}$$

Wir wollen die Zeitevolution mittels Splittingverfahren berechnen.

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

$$\begin{aligned} \dot{\underline{q}}_i &= \nabla_{\underline{p}_i}\mathcal{H} \\ \dot{\underline{p}}_i &= -\nabla_{\underline{q}_i}\mathcal{H} \end{aligned} \tag{10}$$

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.