

Serie 9

Abgabedatum: Fr. 03.5, in den Übungsgruppen

Koordinatoren: Marco Petrella, marco.petrella@sam.math.ethz.ch

Webpage: <http://metaphor.ethz.ch/x/2019/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

$$\ddot{\phi} = -\frac{g}{l} \sin(\phi), \quad \phi(0) = \phi_0 \in]0, \frac{\pi}{2}], \quad \dot{\phi}(0) = 0,$$

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

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

und per Integration nach t bekommt man die Periode

$$T(\phi_0) = 4\sqrt{\frac{l}{2g}} \int_0^{\phi_0} \frac{1}{\sqrt{\cos \phi - \cos \phi_0}} d\phi.$$

Dieses Integral ist singular 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

$$T(\phi_0) = 4\sqrt{\frac{l}{g}} \underbrace{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} d\theta}_{:=K(k)}. \quad (1)$$

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*.

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 $g = 9.81$ 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

- Schreiben Sie die Differentialgleichung 2. Ordnung als ein System von Differentialgleichungen 1. Ordnung.
- 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.
- Lösen Sie das Anfangswertproblem auf $[0, t_{\text{end}}]$ 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.

- 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 bestimmen^a. Plotten Sie die Lösung und verifizieren Sie, dass die numerische Lösung tatsächlich die Periode $T = 1.8$ s hat.

- 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.

- Eine wesentlich effizientere Methode zur Berechnung der Funktion $K(k)$ verwendet das arithmetisch-geometrische Mittel $\text{agm}(x, y)$ 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 $n \rightarrow \infty$ gilt $x_n = y_n = \operatorname{agm}(x, y)$. Das elliptische Integral lässt sich nun schreiben als

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

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

(Diese Aufgabe besitzt kein Template)

Das nichtlineare Gleichungssystem

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

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

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.

Siehe nächstes Blatt!

3. Kernaufgabe: Streuung an einem Potential

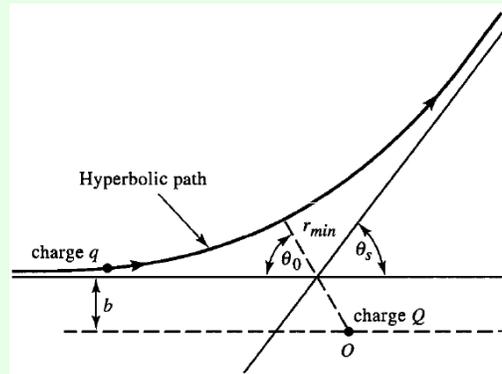
(Diese Kernaufgabe besitzt kein Template)

Modellierung der Physik

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

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

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

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

$$L \equiv b\sqrt{2E} \quad (6)$$

Wir wählen für die Energie $E = 0.2$.

^aAus Fowles and Cassiday, Analytical Mechanics (Thomson Brooks/Cole)

Aufgabenstellung

- Wiederholen Sie folgende Teilaufgaben für 20 verschiedene Werte von ε im Intervall $[0.01, 2]$. Testen Sie die Berechnungen aber zunächst für ein fixes $\varepsilon \approx 0.8$.
- 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 .
- Der Streuwinkel θ_s ist gegeben als das Integral:

$$\theta_s(b) = \pi - 2 \int_{r_{\min}(b)}^{\infty} \frac{d\theta}{dr} dr \quad (7)$$

Bitte wenden!

von:

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

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

```
1 | 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.

Siehe nächstes Blatt!

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:

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

die man wie gezeigt abfangen kann:

```
1 | In [2]: f = lambda x: x**2 + 2
   | In [3]: try:
3 |     ...:     bisect(f, -2, 2)
   |     ...: except:
5 |     ...:     print("Keine Nullstelle im Intervall (-2, 2)")
   |     ...:
7 | 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?