Computerphysik WS 2016/2017

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

Übungsblatt 8: Integration und gewöhnliche Differentialgleichungen

9. Dezember 2016

Aufgabe 8.1: Numerische Integration mittels Simpsons-Regel (5 Punkte)

Gegegeben sei ein Intervall $[a, b]$, welches in n Subintervalle aufgeteilt ist, wobei n eine gerade Zahl ist. Eine Integration einer Funktion im Intervall $[a, b]$ kann stückweise erfolgen nach der Simpson-Regel

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big]. \qquad (1)$$

Der Fehler bei der Integration nach der Simpson-Regel ist beschränkt durch

$$\frac{h^4}{180}(b-a) \max_{\xi\in[a,b]} \left| f^{(4)}(\xi)) \right| \qquad (2)$$

worin $h = \frac{(b-a)}{n}$ die Schrittweite ist.

a) (2 Punkte) Implementieren Sie die numerische Integration nach der Simpson-Regel als eine Funktion in python welche die Funktion $f(x)$, die Intervvallgrenzen a und b, sowie die Anzahl Schritte n als Argumente nimmt und den Wert des bestimmten Integrals zurückgibt.

b) (1 Punkt) Nutzen Sie diese Implementierung und approximieren Sie den Wert der folgende Integrale

$$\int_0^{3\sqrt{\pi}} x\sin(x^2)\,\mathrm{d}x, \qquad \int_1^3 e^{x^2}\,\mathrm{d}x$$

für $n = 100$.

c) (1 Punkt) Variieren Sie die Anzahl der Subintervalle so, dass die Schrittweite h in den Größenordnungen 10^{-1}, 10^{-2}, … 10^{-6} liegt, und bestimmen Sie den Wert der Integrale abhängig von der Schrittweite. Diskutieren Sie Ihre Ergebnisse.

d) (1 Punkt) Verwenden Sie Gleichung 2 und bestimmen Sie die Anzahl Schritte so, dass der Fehler in dre Auswertung des folgenden Integrals nach der Simpson-Regel kleiner als 0.00001 ist.

$$\int_1^3 \frac{1}{x}\mathrm{d}x$$

Hinweis: Ableitungen können Sie entweder analytisch bestimmen oder numerisch mittels eigener Implementierungen oder `scipy.misc.derivative`

Aufgabe 8.2: Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung - Bakterielles Wachstum (6 Punkte)

Das einfachste Model für die Beschreibung des Wachstums (oder Rückgangs) bakterieller Populationen ist, dass die Änderung der Populationszahl proportional zur Populationszahl ist. Dieses Model wurde 1798 vom englischen Pfarrer und Ökonom Thomas Malthus vorgeschlagen. Angenommen die Populationszahl zur Zeit t ist $y(t)$ und r ist die Wachstumsrate, so ergibt sich die folgende Differenzialgleichung.

$$\frac{dy}{dt} = r \cdot y(t) \tag{3}$$

Die Lösung dieser Gleichung, mit gegebener Anfangspopulationszahl $y(t=0) = y_0$, ist $y(t) = y_0 \cdot e^{r \cdot t}$. Bei positiver Wachstumsrate wächst die Populationszahl demnach exponentiell.

Offensichtlich ist ein exponentielles Wachstum der Population nur möglich sollten alle benötigten Ressourcen unendlich zur Verfügung stehen. Da dies bei größeren Populationszahlen nicht mehr gewährleistet ist, kommt es zum Wettbewerb um die limitierten Ressourcen. Deswegen schlug Verhulst 1838 vor, dass die Wachstumsrate mit steigender Populationszahl abnehmen sollte. Das führte zu folgender Differenzialgleichung:

$$\frac{dy}{dt} = r \cdot (1 - \frac{y(t)}{K}) \cdot y(t), \tag{4}$$

wobei K den Gleichgewichtswert der Population darstellt. Die Lösung dieser Gleichung, mit gegebener Anfangspopulationszahl $y(t=0) = y_0$, ist

$$y(t) = \frac{y_0 \cdot K}{y_0 + (K - y_0) \cdot e^{-r \cdot t}} \tag{5}$$

Dieses Model beschreibt experimentell erhobene Populationsdaten in vielen Fällen erstaunlich gut.

Im Folgenden sollen Sie drei verschiedene Methoden implementieren, um beliebige eindimensionale gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung zu lösen. Jede Methode sollte als Funktion implementiert werden, die als Eingabeparameter die Differentialgleichung (d.h. die Funktion $F(t, y(t))$ sodass $\frac{dy}{dt} = F(t, y(t))$), die Anfangs- und Endpunkte $t_{\text{min}} = 0$ min, $t_{\text{max}} = 600$ min, den Diskretisierungsschritt $h = 1$ min und eine Anfangsbedingung $y(t = t_{\text{min}}) = y_0 = 1$ hat.

a) (2 Punkte): Implementieren Sie die Euler-Methode und die modifizierte Euler Methode und plotten Sie die Ergebnisse für $r = \frac{ln(2)}{g}$ mit der Generationszeit $g = 27$ min und dem Gleichgewichtswert $K = 500$.

Hinweis: Die modifizierte Euler-Methode (zweistufige Runge-Kutta Methode) ist gegeben durch folgende Rekursionsformel:

$$x_{n+1} = x_n + hK_2, \tag{6}$$

wobei x_i der Wert am i-ten Zeitschritt ist und

$$\begin{aligned} K_1 &= F(t_n,\ x_n) && (7) \\ K_2 &= F(t_n + \frac{h}{2},\ x_n + \frac{h}{2}K_1) && (8) \\ & && (9) \end{aligned}$$

b) (2 Punkte): Implementieren Sie die klassische vierstufige Runge-Kutta Methode und plotten Sie die Ergebnisse für $r = \frac{ln(2)}{g}$ mit der Generationszeit $g = 27$ min und dem Gleichgewichtswert $K = 500$.

Hinweis: Das klassische vierstufige Runge-Kutta Verfahren basiert auf der folgenden Rekursionsformel:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \tag{10}$$

wobei

$$\begin{aligned} K_1 &= F(t_n,\ x_n) & (11)\\ K_2 &= F(t_n + \frac{h}{2},\ x_n + \frac{h}{2}K_1) & (12)\\ K_3 &= F(t_n + \frac{h}{2},\ x_n + \frac{h}{2}K_2) & (13)\\ K_4 &= F(t_n + h,\ x_n + hK_3). & (14) \end{aligned}$$

c) (2 Punkte):

Nun wollen wir die Genauigkeiten dieser drei Methoden untersuchen, indem wir die numerischen Ergebnisse mit der exakten Lösung, Gleichung 3, vergleichen. Lösen Sie dazu Gleichung 2 für die Diskretisierungsschritte $h = 10^1,\ 10^0,\ ..,\ 10^{-3}$, mit den anderen Parametern wie oben gegeben. Stellen Sie für jede Methode den maximalen absoluten Fehler (verglichen mit der analytischen Lösung) in einem doppellogarithmischen Graphen als Funktion von h dar.

Für jede Methode sollte der Fehler proportional zu h^ξ skalieren; Welche Methode liefert welches ξ?

Aufgabe 8.3: Gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung (4 Punkte)

Gegeben ist die Bewegnungsgleichung eines Oszillators

$$u''(t) = -u(t) \tag{15}$$

Zum Zeitpunkt $t = 0.0$s sind $u(0) = 11$m und $u'(0) = -4.0$m/s.

a) (3 Punkte) Nutzen Sie jeweils einmal das Euler-Verfahren und das vierstufige Runge-Kutta-Verfahren um die Differentialgleichung 15 zu lösen. Verwenden Sie hierzu Zeitschritte von $dt = 1.$s; $dt = 0.1$s ; $dt = 0.01$s; ; $dt = 0.001$s und $dt = 0.0001$s Bestimmen Sie die Auslenkung und Geschwindigkeit zum Zeitpunkt $t = 25.$s.

b) (1 Punkt) Vergleichen Sie die numerischen Ergebnis mit der analytischen Lösung

$$11 \cdot cos(t) - 4 \cdot sin(t) \tag{16}$$

Plotten Sie hierzu die Zeitreihen der Auslenkung $u(t)$ und Geschwindigkeit $u'(t)$

Hinweis: Teilen Sie das Problem in zwei Differentielgleichungen erster Ordnung auf $u' = v$ und $v' = f(t, u)$

Aufgabe 8.4: Eigenwertprobleme gewöhnlicher Differentialgleichungen -Teilchen im Kasten (Schießverfahren) (5 Punkte)

Gegeben ist die zeitunabhängige 1-dimensionale Schrödingergleichung für ein Teilchen im Kasten.

$$-\frac{d^2\Phi(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + V(\tilde{x})\Phi(\tilde{x}) = \epsilon \cdot \Phi(\tilde{x}). \tag{17}$$

mit $\tilde{x} = \frac{x}{\hbar}\sqrt{2m}$, m ist die Masse des Teilchens und $\hbar$ die Planckkonstante.

Der "Kasten" hat die Breite $\tilde{L} = \pi$ und unendlich hohe Potentialwände. Innerhalb des Kastens ist $V(\tilde{x}) = 0$. Es gelten weiter folgende Randbedingungen:

$$\Phi(\tilde{x}) = 0 \qquad \text{for} \qquad |\tilde{x}| \geq \tilde{L}/2 \tag{18}$$

und

$$\Phi'(-\tilde{L}/2) = 1 \tag{19}$$

$$\Phi'(\tilde{L}/2) = \pm 1 \tag{20}$$

mit -1 im Grundzustand, zweiten, vierten... angeregten Zustand und $+1$ im ersten, dritten ... angeregten Zustand.

a) (2 Punkte) Implementieren Sie das Schießverfahren als eine Funktion in python, welche das Potenzial, eine Anzahl Schritte und ϵ als Argument nimmt und mittels Runge-Kutta-Verfahren das Differentialgleichungssystem für die zeitunabhängige Schrödingergleichung für das Teilchen im Kasten löst.

b) (1 Punkt) Benutzen Sie Ihre Implementierung mit ϵ=1 und 50 Schritten und bestimmen Sie damit $\Phi(\tilde{x})$ und $\Phi'(\tilde{x})$. Sind die Randbedingungen erfüllt?

c) (2 Punkte) Optimieren Sie nun ϵ mit Hilfe von scipy.optimize.bisect, so dass alle Randbedingungen erfüllt sind und bestimmen Sie die 4 niedrigsten Eigenwerte. Plotten Sie jeweils $\Phi(x)$.