Übungen zur Computerphysik
SS 2020

T. Luu, A. Nogga, M. Petschlies, A. Wirzba

Übungsblatt 5 $\boxed{\textbf{07. - 15. Mai 2020}}$

A.5.1: Anfangswertproblem

Die klassische Beschreibung der Dynamik physikalischer Objekte erfolgt häufig über Differentialgleichungen. In dieser ersten Übung zu gewöhnlichen DGLs wollen wir das Anfangswertproblem für den harmonischen und ein Beispiel für den anharmonischen Oszillator numerisch lösen. Dazu kommen die Integrationsverfahren aus den VLs Vorlesung-05-2020-05-01 und Vorlesung-05-2020-05-06 zum Einsatz.

1. Wir betrachten also ein Teilchen der Masse 1 (in geeignet gewählten Einheiten) im Potential

$$V(y) = \frac{1}{2}\, y^2 \,. \tag{1}$$

Alle Größen sind von der Dimension 1. Die Anfangswerte einer Bahnkurve seien $y(0) = y_0$ und $\dot{y}(0) = v_0$.

   (a) Implementieren Sie die in der VL vorgestellten Integrationsverfahren Euler-Cauchy, Trapez, Runge-Kutta 2,3,4, und wenden Sie Ihr Programm auf den harmonischen Oszillator Gl. (1) an mit Anfangswerten

$$(1)\; y_0 = 1,\, v_0 = 0, \quad (2)\; y_0 = 0,\, v_0 = 1, \quad (3)\; y_0 = 1/2,\, v_0 = 1/2$$

   (Hinweis: Die elegante Variante: Versuchen Sie möglist nur eine Integrator-Funktion zu schreiben, die alle o.g. Integrationsschemata abdeckt nach Gl. (4, 5). Ansonsten wählen Sie einfach RK3 und RK4.)

   (b) Verifizieren Sie Ihren Code durch Vergleich mit der exakten Lösung für Schrittweiten der Zeitintegration $h = 0.1, \ldots, 0.0001$. Plotten Sie die Bahnkurven für $0 \leq t \leq 6\pi$.

   (c) Demonstrieren Sie numerisch das in der VL behauptete Skalierungsverhalten des Integrationsfehlers für den einzelnen Zeitschritt.

   (d) Demonstrieren Sie numerisch die Zeitreversibilität am Beispiel des Integrators RK3.

2. Wir verallgemeinern nun das Potential zu

$$V(y) = \frac{\sigma}{2}\, y^2 + \frac{\kappa}{4}\, y^4 \,. \tag{2}$$

κ ist wiederum dimensionslos und $\sigma = \pm 1$. Wir interessieren uns für den Fall $\sigma = -1$, $\kappa > 0$.
(Hinweis: Skizzieren Sie sich das Potential mal für $\kappa = 0.5$.)

(a) Erweitern Sie Ihr Programm aus Aufgabenteil 1 zur Simulation von Gl. (2) mit Runge-Kutta 4.

(b) Implementieren Sie die numerische Bestimmung der Periodendauer.

(c) Verifizieren Sie Ihren Code im Grenzfall kleiner Auslenkung aus den Potentialminima. Welche Periodendauer erwarten Sie in diesem Grenzfall ?
(Hinweis: Entwickeln Sie Gl. (2) um die Potentialminima.)

(d) Plotten Sie die numerisch bestimmte Periodendauer für einige Energiewerte oberhalb des lokalen Potentialmaximums.

Parameterliste:

- $\sigma = -1$, $\kappa = 0.5$
- Schrittweite Zeitintegration $h = 10^{-4}$
- $v_0 = 0$; y_0 entsprechend gewünschtem Energiebereich

A.5.2: DGL-Verfahren

Nochmal ein Beispiel zur Bestimmung der Koeffizienten für (p, M)-Verfahren mit

$$\frac{d}{dt}\vec{y}(t) = \vec{f}\,(t, \vec{y}(t)) \tag{3}$$

1. Es sei $\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$. Ausgehend von Gl. (3), was ist der entsprechende Ausdruck für $\frac{d^2}{dt^2}\vec{y}(t)$ und $\frac{d^3}{dt^3}\vec{y}(t)$?

2. *(für's Bienchen, wer möchte)* Ein (p, M)-Verfahren ist gegeben durch (vgl. VL)

$$\vec{y}_{n+1} = \vec{y}_n + \sum_{q=1}^{p} c_q \vec{k}_q + \mathcal{O}\left(h^{M+1}\right) \tag{4}$$

$$\vec{k}_q = h\,\vec{f}\left(t_n + a_q h, \vec{y}_n + \sum_{r=1}^{q-1} b_{qr}\,\vec{k}_r\right) \tag{5}$$

Bestimmen Sie die Bedingungen an die Koeffizienten für ein beliebiges $(2, 2)$-Verfahren.