Numerische Methoden der Physik

SoSe 2021 – Prof. Marc Wagner

Lasse Müller: `lmueller@itp.uni-frankfurt.de`
Laurin Pannullo: `pannullo@itp.uni-frankfurt.de`

Aufgabenblatt 10

Wird besprochen am 13.07 und 14.07.

Aufgabe 1 [*Prinzip der kleinsten Wirkung*] `(3+7+4+4+2=20 Pkt.)`

Die Wirkung eines sich in einer Dimensionen bewegenden, freien Teilchens lautet

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t \; L_0(\dot{x}, x, t) \tag{1}$$

mit

$$L_0(\dot{x}, x, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 ,$$

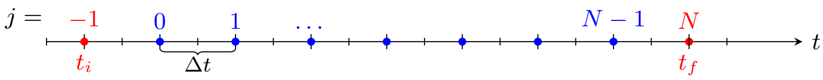
wobei m die Masse des Teilchens ist.

Das Prinzip der kleinsten Wirkung besagt, dass von allen möglichen Trajektorien vom Ort x_i bei Zeit t_i zum Ort x_f bei Zeit t_f diejenige realisiert ist, die die Wirkung minimiert. Das Ziel dieser Übungsaufgabe ist es solche Trajektorien numerisch über das Prinzip der kleinsten Wirkung zu berechnen.

(i) Zunächst führen wir ein Zeitgitter

$$t \to t_j = j\Delta t \quad \text{mit} \quad j = 0, 1, \ldots, N-1 \quad \text{und} \quad \Delta t = \frac{t_f - t_i}{N+1}$$

ein, welches aus N Gitterpunkten besteht.



Verwende außerdem im Folgenden die Notation

$$x(t_j) = x_j \quad \text{mit} \quad \mathbf{x} = (x_0, x_1, \ldots, x_{N-1}) \; .$$

Diskretisiere nun die Wirkung des freien Teilchens in Gl. (1) indem du die Ableitungen gemäß

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} \to \frac{x_{j+1} - x_j}{\Delta t}$$

diskretisierst, das Integral in eine Summe über die Gitterpunkte umschreibst und dir überlegst wie die Randbedingungen $x(t_i) = x_i$ und $x(t_f) = x_f$ korrekt behandelt werden müssen.

Hinweis: Vorsicht bei den Summationsgrenzen!

Schreibe in einem zweiten Schritt die diskretisierte Wirkung so um, dass sie nur noch dimensionslose Größen enthält.

(ii) Informiere dich basierend auf der Einführung der Vorlesung in Kapitel 11.5 über die Implementation eines konjugierten Gradienten Algorithmus zur Minimierung einer Funktion $f(\mathbf{x})$ in ≥ 2 Variablen mithilfe einer wiederholten eindimensionalen Minimierung (hierfür eignet sich z.B. Kapitel 10.8 in `http://numerical.recipes/book/book.html`). Implementiere anschließend diesen Algorithmus für eine allgemeine Funktion f.

Produced with the ExerciseHandler

Hinweis: Die grundlegenden Ideen und Formeln dieses Algorithmus sind bereits in Kapitel 7.7 des Vorlesungsskriptes vorgestellt worden. Es ergeben sich lediglich zwei Unterschiede. Der Erste liegt in der Berechnung von α_n, welches nun durch eine eindimensionale Minimierung bestimmt wird. Im Schritt n wird das α_n verwendet, welches $f(\mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n)$ minimiert. Diese eindimensionale Minimierung kann z.B. mit dem Verfahren des Goldenen Schnittes durchgeführt werden. Außerdem wird das Residuum $\mathbf{r}_{n+1} = -\nabla f(\mathbf{x}_n + \alpha_n \mathbf{p}_n)$ gesetzt. Alle weiteren Größen $\beta_{n+1}, \mathbf{p}_{n+1}, \mathbf{x}_{n+1}$, werden entsprechend den gegebenen Formeln in Kapitel 7.7 des Vorlesungsskriptes berechnet. Wähle außerdem $\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 = -\nabla f(\mathbf{x}_0)$.

Teste dein Programm indem du das Minimum der Funktion

$$f(\mathbf{x}) = (x-1)^2 + (y+1)^2 + (z-2)^2$$

berechnest und es mit dem offensichtlichen analytischen Ergebnis vergleichst.

(iii) Verwende dein Programm um die diskretisierte Wirkung des freien Teilchens in den Variablen x_j für $N = 1, 5, 10$ zu minimieren und damit die physikalisch realisierte Trajektorie zu bestimmen. Setze als dimensionslose Randbedingungen $\hat{x}_i = 0.0$ und $\hat{x}_f = 1.0$.

In diesem Verfahren muss eine anfängliche Trajektorie $\mathbf{x}_0$ als Startpunkt der iterativen Minimierung gewählt werden. Variiere diese anfängliche Trajektorie und probiere dabei zumindest eine konstante und eine zufällig gewählte Trajektorie $\mathbf{x}_0$ aus. Hat dies einen Einfluss auf die aus der Minimierung resultierende Trajektorie?

(iv) Setze das Teilchen nun einem konstanten Schwerefeld aus, indem du die Kontinuums-Lagrangefunktion in der Wirkung aus Gl. (1) um ein entsprechendes Potential

$$V = mgx$$

erweiterst, wobei g die Fallbeschleunigung ist. Überführe diese Wirkung nun wieder in eine diskretisierte Form und drücke sie durch dimensionslose Größen aus.

Minimiere diese diskretisierte Wirkung mit den gleichen Randbedingungen wie in Teilaufgabe (iii) in den Variablen x_j für $N = 1, 5, 10, 20$ und plotte die erhaltene Trajektorie. Halte dabei die Zeitspanne $t_f - t_i = \Delta t \times (N+1)$ für die verschiedenen N konstant indem du die dimensionlosen Größen des Problems entsprechend variierst. Vergleiche auch mit der analytischen Kontinuums-Lösung des Problems.

Variiere auch für dieses Problem wieder die anfängliche Trajektorie $\mathbf{x}_0$ wie in Teilaufgabe (iii) und beobachte, ob sich die aus der Minimierung resultierende Trajektorie verändert.

(v) Warum hat die anfängliche Trajektorie in beiden Fällen keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis? Welche Probleme könnten sich für andere physikalische Systeme ergeben?

Produced with the ExerciseHandler