

Lösung 14

1. Steifes nichtlineares AWP

- a) Zunächst müssen wir die Van der Pol-Gleichung umschreiben in ein System erster Ordnung:

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$$

wobei

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} y_0(t) \\ y_1(t) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ \mu(1 - y_0^2(t))y_1 - y_0 \end{pmatrix}.$$

Die Anfangswerte sind dann $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 = [2, 0]^T$.

Lassen wir `StiffVanDerPol.m` laufen, so beobachten wir, dass der explizite Löser `ode45` viel länger braucht als der implizite `ode23s`. In Abb. 2 sehen wir den Grund dafür: `ode45` macht $\sim 10^4$ mal kleinere Schritte als `ode23s` wo die Lösung glatt ist (d.h. wenig variiert)! Also obwohl ein Schritt mit dem impliziten Verfahren `ode23s` massiv teurer ist, gewinnt man viel an Rechenzeit verglichen mit dem expliziten Löser `ode45` der sehr viele kleine Schritte (aus Stabilitätsgründen) machen muss.

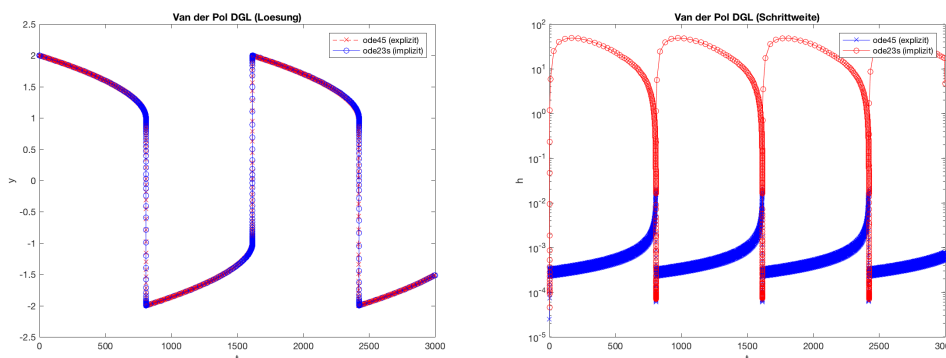


Abbildung 1 – Lösung $y(t)$ links und Schrittweite h rechts.

- b) Da die Van der Pol Diff.-Gl. nichtlinear ist, müssen wir wie in den Vorlesungsnotizen (Kap. 5 Seite 14) linearisieren. Die Jacobi Matrix von $\mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$ lautet

$$J(t, \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2\mu y_0(t)y_1(t) - 1 & \mu(1 - y_1^2) \end{pmatrix}.$$

Setzen wir die Anfangszeit $t_0 = 0$ und die AWe ein, erhalten wir

$$J(t_0, \mathbf{y}_0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -3000 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte dieser Matrix berechnet man sehr einfach zu

$$\lambda_{1,2} = \frac{-3000 \pm \sqrt{8999996}}{2}.$$

Damit lautet der Steifigkeitsparameter

$$S = \frac{\max_{i=1,\dots,n} |\operatorname{Re} \lambda_i|}{\min_{i=1,\dots,n} |\operatorname{Re} \lambda_i|} \approx 9 \times 10^6 \gg 1$$

Somit erwarten wir ein um den Punkt (t_0, y_0) lokal steifes Problem.

- c) In Abb. ist der Steifigkeitsparameter S als Funktion der Zeit gezeichnet. Wir beobachten, dass die Lösung hin und her oszilliert zwischen sehr steifen ($S \gg 1$) und nicht steifen Verhalten. Somit ist klar, dass bei nichtlinearen Problemen sowohl steife als auch nicht steife Abschnitte auftreten können. Weiter erklärt die Abb. wieso der explizite Löser so kleine Schrittweiten machen muss.

2. Molekular-Dynamik mit dem Verlet-Algorithmus

In Abb. 3 ist der zeitliche Verlauf der totalen Energie in der MD-Simulation gezeichnet. Es ist klar (aus elementarer Physik!), dass die totale Energie eine Erhaltungsgröße ist. Wir beobachten, dass der ode45 diese nicht erhält. Der Verlet-Algorithmus (bis auf kleine Fluktuation) jedoch schon! Es lässt sich zeigen, dass der Verlet-Algorithmus Energie erhält. Dieses Verfahren erhält auch noch weitere Größen (z.B. Drehimpuls, ...) und ist deshalb sehr populär in Mehr-Körper-Simulationen.

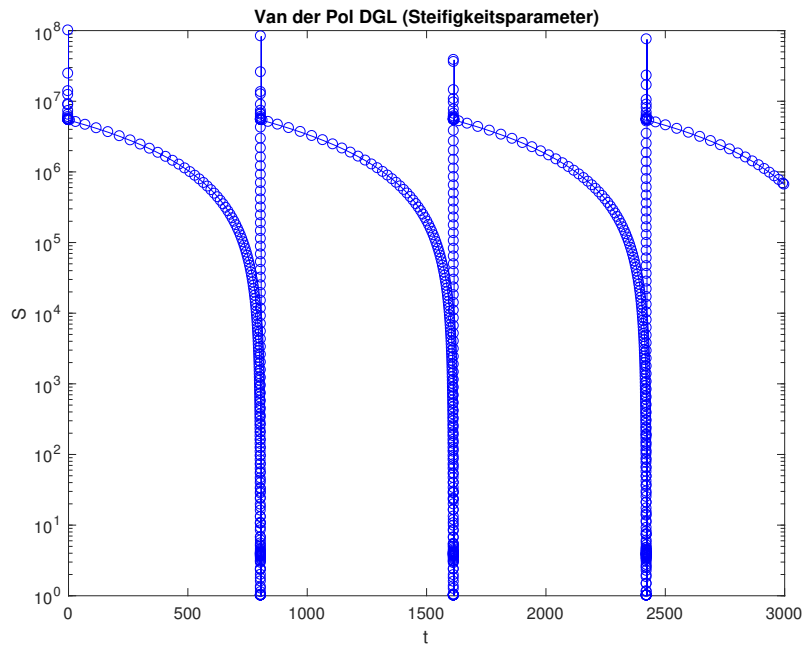


Abbildung 2 – Steifigkeitsparameter als Funktion der Zeit.

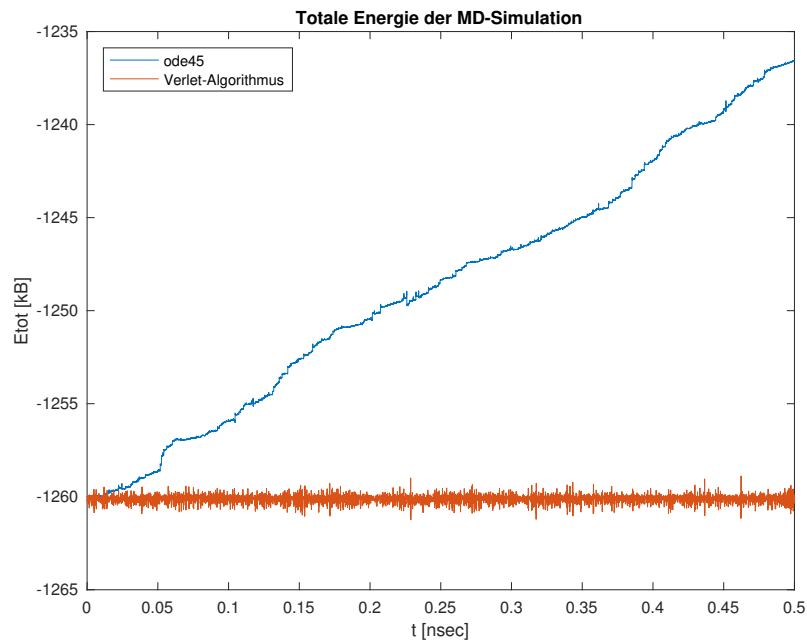


Abbildung 3 – Zeitliche Entwicklung der totalen Energie in der MD-Simulation für die beiden Löser.