Übungen aus den numerischen Methoden der Astronomie SS 2010

1. Diskussion Simplex 1: Warum heißt der Simplex Simplex? Wie könnte man einen Simplex mathematisch korrekt definieren? Wozu könnte man Ihrer Ansicht nach Simplices verwenden?

2. Diskussion Simplex 2: Gegeben sei ein k-dimensionaler, euklidischer Raum (z.B. $\mathbb{R}^k$). Welche Dimension kann ein Simplex *maximal* haben, wenn er diesen Raum bewohnt $(k-1, k, k+1)$? Welche Dimension muss er mindestens haben? Wie viele Ecken besitzt er? Wie viele Kanten? Was kann man über den Rand eines Simplex sagen?

3. Der in der Vorlesung behandelte Simplex-Algorithmus wird auch als "Downhill-Simplex-Verfahren" bezeichnet. Was bezweckt dieses Verfahren? Es sei das Potential eines "verrückten" Harmonischen Oszillators in 2 Dimensionen gegeben:

$$\Omega(x, y) = x^2 + (y-4)^2$$

   Finden sie das (hier triviale) Minimum von Ω. Berechnen Sie 5 Durchläufe des Simplexalgorithmus mit den Startpunkten:

$$A = (2, 3)\ B = (3, 2)\ C = (-2, 0)$$

   und den folgenden Parameterwerten:

$$\alpha = 1\ \beta = 0.5\ \gamma = 2\ \delta = 0.5$$

4. Folgt der Schwerpunkt des Simplex aus dem vorigen Beispiel dem Gradienten des Potentials?

5. Da der Parameterraum eines Simplex beliebig gewählt werden kann, stellt die Ausgleichsrechnung ein weiteres Anwendnungsgebiet des Downhill-Algorithmus dar. Ihre Messreihe liefert folgende Ergebnisse (die Unsicherheit liegt unter +- 10^{-4}):

i	x_i	y_i
1	0.1	1.0289
2	0.5	1.0263
3	2.5	0.1795
4	3.0	0.0423

Aus der Theorie wissen Sie, dass ihre gesuchte (höchst nichtlineare) Funktion folgende Form haben muss:

$$y(x) = a \cdot Sin(x) + e^{b \cdot x^3}$$

Bestimmen Sie die Parameter a und b mit 5 Simplex-Iterationsschritten! Ihre Startwerte schätzen Sie dabei wie folgt:

a_1=0	b_1=0
a_2=0.35	b_2=-1
a_3=-0.1	b_3=0.1

Die Parameter für α, β, γ und δ können Sie aus dem vorigen Beispiel übernehmen. Tipp: Eine Ausgleichsrechnung basiert auf der Minimierung der Fehlerquadratsumme $\sum_i [y_i - y(x_i, a_i, b_i)]^2$.

6. Diskussion Operator 1: Was ist ein Operator? Nennen Sie einige Unterschiede und Gemeinsamkeiten von Operatoren, Funktionen und Funktionalen.

7. Diskussion Operator 2: Die in der Vorlesung definierten Verschiebungs- und Differenzenoperatoren τ, Δ und ∇ sind lineare Operatoren. Welche Eigenschaften definieren Linearität? Nennen Sie Beispiele für lineare und nichtlineare Operatoren. Warum glauben Sie, haben lineare Operatoren eine derart große Bedeutung in der Physik?

8. Gregory-Newton Interpolation mit äquidistanten Stützstellen. Tabellieren Sie die Funktion $y = Sin(x)$ für die Werte $x = 0, 1, 2, 3, 4$. Erstellen Sie ein Differenzenschema und ermitteln Sie alle möglichen Interpolationspolynome ausgehend von der Stützstelle $x_0 = 1$ nach der Formel:

$$p_n(x) = y_0 + \frac{\Delta^1 y_0(x - x_0)}{1!h} + \frac{\Delta^2 y_0(x - x_0)(x - x_1)}{2!h^2} + ... \\ + \frac{\Delta^n y_0(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1})}{n!h^n}$$

wobei h den konstanten Abstand der Stützstellen, n die Ordnung des Interpolationspolynoms, x_n die Stützstellen, und $\Delta^n y_0$ die in der Vorlesung definierten Vorwätsdifferenzen des Funktionswertes y_0 am Stützpunkt x_0 angeben. Welcher Ordnung kann ein Interpolationspolynom höchstens haben, wenn m Stützstellen zur Verfügung stehen?

9. Verwenden Sie die Interpolationspolynome aus dem vorhergehenden Beispiel und berechen Sie damit die Werte der interpolierten Funktion bei $x = \pi/2$. Berechnen Sie die prozentuelle Abweichung der einzelnen Ergebnisse, vom tatsächlichen Wert $y = Sin(\pi/2)$. Steigt die Genauigkeit bei steigender Ordnung der Polynome? Skizzieren sie die Polynome im Bereich von $x \in [0, \pi]$.

10. Verwenden Sie wiederum die Interpolationspolynome um die Funktionswerte bei $x = 5$ und $x = 8$ zu berechnen (extrapolieren), und bestimmen Sie erneut die prozentuelle Abweichung an diesen Punkten. Wie verhält sich die Abweichung nun mit zunehmender Ordnung? Benutzen Sie zur Kontrolle ebenso die in der Vorlesung präsentierte Formel $f(a+n \cdot h) = ...$ um die Funktionswerte direkt (ohne explizite Erstellung eines Interpolationspolynoms) zu erhalten. Skizzieren sie die Polynome im Bereich von $x \in [0, 4\pi]$.

11. Bestimmen Sie die Rektaszension und Deklination (α, δ) und die heliozentrische Distanz r von Mars mittels Newtonscher Interpolation aus der beiliegenden Tabelle für den 06.05.2010 21:00 MESZ (MittelEuropärische SommerZeit) so genau wie möglich.

12. Die beiliegende Tabelle von Rektaszensions- und Deklinationswerten für Wien stammt aus dem *HORIZON* System des Jet Propulsion Laborartory (JPL) der NASA. Besuchen Sie die Homepage `http://ssd.jpl.nasa.gov/horizons.cgi`, und kreieren Sie eine analoge Tabelle für Uranus. Führen Sie danach die im vorigen Beispiel angeführte Aufgabe durch. Vergessen Sie dabei nicht, als Beobachtungsort Wien anzugeben!

13. Führen Sie die in der Vorlesung begonnene Herleitung der numerischen Differentiation über das Stirling'sche Interpolationsverfahren bis zu den sechsten Differenzen $f^{VI}(a)$ fort (auch geradzahlige Ableitungen!), und berechnen Sie die Umkehrung, sprich die Differenzen aus den Ableitungen der Funktion f ebenso bis $h^6 f^{(6)}$. Folgende Zusammenhänge können Ihnen dabei nützlich sein:

$$f(t) = f(a + sh)$$

wobei t und s kontinuierliche Parameter sind (entsprechen x aus der Interpolationsformel der vorigen Beispiele) und über die einfache lineare Transformation $t = a + sh$ mit der Stützstelle a und der Schrittweite h der Funktion verknüpft sind.

$$\frac{df(t)}{ds} = \frac{df}{dt}\frac{dt}{ds} = h\frac{df}{dt}$$
$$\frac{d^n f}{ds^n} = h^n f^{(n)}(t)$$

mit $f^{(n)} = \frac{d^n f}{dt^n}$. Differenzieren Sie die Stirling'sche Interpolationsformel (7)

$$f(t) = f(a + sh) = f(a) + sf^I(a) + \frac{s^2}{2!}f^{II}(a) + \frac{(s+1)s(s-1)}{3!}f^{III}(a) + ...$$

nach dem Parameter s, setzen Sie dann $s = 0$ um die Ableitungen als Funktion der Differenzen zu gewinnen. Führen Sie die Umkehrung analog zur Vorlesung durch.

14. Verwenden Sie die Ergebnisse des vorigen Beispiels um aus beiliegender Tabelle (heliozentrische Koordinaten der Erde) $\frac{dx}{dt}$ und $\frac{dy}{dt}$ für den 160. und den 300. Tag zu berechnen.

15. Berechnen Sie weiters die Beschleunigungen $\frac{d^2x}{dt^2}$ und $\frac{d^2y}{dt^2}$ bestimmen Sie damit die Gauß'sche Gravitationskonstante k über das Newton'sche Gravitationsgesetz!

16. Tabellieren Sie die Funktion $Cos(x^2)$ and den Stellen $x = \{0, \frac{\pi}{5}, \frac{2\pi}{5}, \frac{3\pi}{5}, \frac{4\pi}{5}, \pi\}$ Berechnen Sie

$$I = \int_0^\pi Cos(x^2)dx$$

(Versuchen Sie auch das Integral analytisch zu lösen, und vergleichen Sie die Ergebnisse.)

17. Diskussion Differentialgleichungen (DGL): Wozu dienen DGL? Welche Arten von DGL gibt es, und wie kann man diese klassifizieren? Demonstrieren Sie anhand einfacher Beispiele verschiedene Lösungsansätze für gewöhnliche DGL erster und zweiter Ordnung!

18. Integrieren Sie die folgende Differentialgleichung (DGL) nach der Methode von *ADAMS* von $x = 0$ bis $x = 0.4$ mit einer Schrittweite $h = 0.1$:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{y}{6+x}$$

Wählen Sie Ihr Anlaufstück dabei symmetrisch um $x_0 = 0$ (Warum?)! Ihr zugehöriger Funktionswert lautet $y_0 = 1$. Lösen Sie dieses Beispiel auch analytisch, und verlgeichen Sie Ihre Ergebnisse mit denen der numerischen Integration!
Tipp: Um überhaupt ein Anlaufstück zu erhalten, könnte man ein Taylorpolynom der Funktion $y(x)$ um den Startwert x_0 bis zur zweiten Ordnung in der Schrittweite h entwickeln: $y(x_0+h) \simeq y(x_0)+h\cdot y'(x_0)+h^2/2\cdot y''(x_0)$. Analoges für $y(x_0-h)$, $y(x_0+2h)$,$y(x_0-2h)$, damit sollte eine erste Näherung des Anlaufstücks erzielbar sein. $y'(x_0)$ erhält man dabei aus der DGL - wie könnte man folglich $y''(x_0)$ ermitteln? Nicht vergessen: Anlaufstück verbessern bis keine Änderungen der letzten Differenzen mehr sichtbar sind (6 Nachkommastellen!), bevor mit der Rechnung begonnen wird!

19. In der Vorlesung wurde die Differentialgleichung für den eindimensionalen, harmonischen Oszillator mit Hilfe der Lie-Reihen Integrationsmethode gelöst. Dabei wird die tatsächliche Lösung durch Potenzreihen im Systemparameter (in unserem Fall der Zeit t) dargestellt. Führen Sie die in der Vorlesung begonnene Lie-Reihe bis zur achten Ordnung in t fort und skizzieren Sie die durch die Lie-Reihe repräsentierte Lösungsfunktion für Parameterwerte $t \in \{-3, 3\}$ im Phasenraum (ξ gegen η) für die Ordnungen $O(t), O(t^2)$... bis $O(t^8)$ mit Anfangsbedingungen $\xi_0 = 1$ und $\eta_0 = 0$, wobei die Kopplungskonstante des harmonischen Oszillators $\alpha = 1$ zu setzen ist. Vergleichen Sie diese Lösungen mit der analytischen!
Tipp: Erstellen Sie die Lie-Reihe bis zur Ordnung $O(t^8)$ in den Orten ξ und den Geschwindigkeiten η. Brechen Sie die Reihe zuerst nach dem konstanten Term ab, und setzen Sie die Anfangsbedingungen ein. Skizzieren Sie die Lösungsfunktion indem Sie ξ gegen η auftragen. Führen Sie selbiges Verfahren erneut durch, aber brechen Sie nun nach dem linearen, quadratischen, etc. Term in t ab. Eine positive Eigenschaft der Lie-Reihe besteht darin, dass die Lösungskurven für ξ und η bereits über t parametrisiert sind, d.h. Sie brauchen lediglich Werte für $t \in \{-3, 3\}$ in den Phasenraumvektor $(\xi, \eta) = (\xi(\xi_0, \eta_0, t), \eta(\xi_0, \eta_0, t))$ einzusetzen.

20. Lösen Sie die Differentialgleichung für das mathematische Pendel mit Hilfe der Lie-Reihen bis zur fünften Ordnung in t!

$$\ddot{\phi} = Sin(\phi)$$

Tipp: Spalten Sie die Differentialgleichung zweiter Ordnung in zwei Differentialgleichungen erster Ordnung in $\xi = \phi$ und $\eta = \dot{\phi}$. Da keine Anfangsbedingungen angegeben sind, erstellen Sie einfach die Lie-Reihen für Orte und Geschwindigkeiten bis zur fünften Ordnung in t.

21. Berechnen Sie die ersten drei Lie-Reihen Terme des gekoppelten Differentialgleichungssystems zweiter Ordnung:

$$\ddot{x} = -x - 8xy$$
$$\ddot{y} = -y - x^2 + y^2$$

22. Finden Sie die Formel für die sechste Anwedung des Lie-Operators ($D^6\vec{\xi}_l$) auf die Ortskoorinate des l-ten Körpers im gravitativen Drei-Körper-Problem. Benützen Sie dabei folgende Relationen:

$$D = \sum_{i=1}^{3}\sum_{l=1}^{N}(\eta_l^i \frac{\partial}{\partial \xi_l^i} + \sum_{k=1, l\neq k}^{N} m_k \xi_{kl}^i \rho_{lk}^{-3} \frac{\partial}{\partial \eta_l^i})$$

wobei ξ_l^i die i-te Komponente des l-ten Ortsvektors, und η_l^i die i-te Komponente des l-ten Geschwindigkeitsvektors bezeichnet.

$$\vec{\xi}_{lk} = \vec{\xi}_k - \vec{\xi}_l = -\vec{\xi}_{kl}$$
$$\vec{\eta}_{lk} = \vec{\eta}_k - \vec{\eta}_l = -\vec{\eta}_{kl}$$
$$\rho_{lk} = \|\vec{\xi}_k - \vec{\xi}_l\| = \rho_{kl}$$
$$\phi_{lk} = \rho_{lk}^{-3}$$
$$\sigma_{lk} = \sum_{i=1}^{3} \xi_{lk}^i \eta_{lk}^i$$

Tipp: Sie brauchen die Ableitungen $D\phi_{lk}$ und $D\sigma_{lk}$ nicht explizit auszurechnen. Es reicht wenn Sie diese schlicht mit der korrekten Anzahl an Anwendungen des Operators anführen, z.B. $D^3\phi_{lk}D^2\xi_{lk}$. Daher sollte in Ihrer Formel σ nicht vorkommen...

23. Verwenden Sie die LU-Zerlegung um folgendes Gleichungssystem zu lösen:

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 8 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 9 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & -8 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 9 \\ 1 \\ 3 \\ 7 \\ 1 \end{pmatrix}$$

24. Legen Sie einen kubischen Spline durch folgende fünf Punkte

i	x_i	y_i
1	1.0	1.00
2	2.3	5.29
3	4.2	17.64
4	4.5	20.25
5	5.0	25.00

mit den Randbedingungen $y_1' = 2, y_5' = 10$.

25. Legen Sie einen weiteren kubischen Spline durch die Punkte

i	x_i	y_i
1	0.0	0.00
2	0.1	0.10
3	0.4	0.38
4	0.5	0.46
5	1.8	1.06

für folgende Randbedingungen: $y_1' = 1, y_5' = 0.24$.

26. Wiederholen Sie das vorige Beispiel mit folgenden Anfangsbedingungen $y_1'' = 0, y_5'' = -0.2$

27. Tabellieren Sie die Funktion:

$$f(x) = Cos(x^2)$$

an den Stellen $x = 0, 1, 2, 3, 4, 5$. Legen Sie eine kubische Splinefunktion durch diese Punkte, und ermitteln Sie deren Wert an der Stelle $x = \frac{3\pi}{4}$. Legen Sie ebenfalls ein Interpolationspolynom maximaler Ordnung durch diese Punkte, und vergleichen Sie die beiden Ergebnisse mit dem korrekten Wert von $f(x)$! Da die Funktion $f(x)$ bekannt ist, sollte es ein Leichtes für Sie sein, die richtigen Randbedingungen an den Intervallgrenzen für die Splines ausfindig zu machen...

28. Legen Sie eine Regressionsgerade (linearer least squares fit erster Ordnung) der Form

$$y - (Ax + B) = 0$$

mit Parametern A und B durch folgende Datenpunkte:

i	x_i	y_i
1	1.82	7.81
2	2.87	12.09
3	3.64	15.20
4	4.79	19.90
5	5.85	24.17
6	6.06	25.09

und berechnen Sie die Fehler von A und B.

29. Verwenden Sie die Tabelle aus dem vorherigen Beispiel und erstellen Sie ein Ausgleichspolynom zweiter Ordnung der Form

$$y - (Ax^2 + Bx + C) = 0$$

mit den Parametern A, B, C. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem des vorigen Beispiels! Welcher Fit produziert die geringeren Fehler?

30. Ein Ausgleichskreis der Form:

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = r^2$$

mit den Parametern x_0, y_0, r sei durch folgende Messpunkte zu führen:

i	x_i	y_i
1	-0.887	3.26
2	-1.17	3.04
3	-1.33	2.83
4	-1.38	-0.0176
5	-1.42	-0.0344
6	-1.38	-0.029

Dabei sollte das Problem linearisiert werden (warum?).

Ein Linearisierungsvorschlag ($x_0, y_0, r \rightarrow A, B, C$)

$$\begin{aligned} z &= x^2 + y^2 \\ A &= 2x_0 \\ B &= 2y_0 \\ C &= r^2 - x_0^2 - y_0^2 \end{aligned}$$

sodass hieraus die neue Gleichung

$$z = Ax + By + C$$

folgt.

31. Lösen Sie das vorige Beispiel mit der Simplex Methode!

$$\alpha = 1 \; \beta = 0.5 \; \gamma = 2 \; \delta = 0.5$$

Startwerte:

x_0=0	y_0=0	r=2
x_0=0.16	y_0=-1	r=1
x_0=-0.2	y_0=0.5	r=4
x_0=0.7	y_0=2	r=0.2

Rechnen Sie mindestens 4 Iterationen! (Falls Sie ein Programm erstellt haben, überprüfen Sie, wieviele Iterationen nötig sind, um eine mit der Ausgleichsrechnung vergleichbare Genauigkeit zu erzielen).

32. Wenden Sie die Methode der Lie-Reihen auf das Problem des freien Falls unter Berücksichtigung des Luftwiderstandes an!

$$\ddot{r} = -g + q \cdot \dot{r}^2$$

Erstellen Sie die Lie-Reihe bis zur sechsten Ordnung in t mit folgenden Anfangsbedingungen:

$$r_0 = h$$
$$\dot{r}_0 = v_0 = 0$$

33. Approximieren Sie die Lösung für folgendes System von symmetrisch gekoppelten Differentialgleichungen zweiter Ordnung mit Liereihen bis zur 5. Ordnung im Parameter r:

$$\sigma'' = \frac{e^{i(\chi+\sigma)} + e^{-i(\chi+\sigma)}}{2}$$
$$\chi'' = \frac{e^{i(\sigma+\chi)} - e^{-i(\sigma+\chi)}}{2i}$$

mit $\phi, \psi = \phi(r), \psi(r)$; i ist die imaginäre Einheit.

34. Zeigen Sie, dass die Lengendre-Polynome P_n ein Orhogonal(Orthonormal?)-System bezüglich des Standard Skalar Produktes bilden:

$$< P_m | P_n >= \int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx$$

*Tipp:*Benutzen Sie dabei die Rekursionsrelation

$$P_{n-1}(x) = xP_n(x) - \frac{x^2-1}{n}\frac{d}{dx}P_n(x)$$

35. Haben Sie tatsächlich auf den ersten Blick erkannt, dass es sich bei der Operation

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx$$

um ein Skalarprodukt handelt? Falls nein, zeigen Sie's. Falls ja, zeigen Sie's trotzdem!

36. Assoziierte Legendre Polynome spielen eine Entscheidende Rolle in der Quantenmechanik, indem sie integrale Bestandteile von Kugelflächenfunktionen darstellen, die ihrerseits Lösungen von Eigenwertproblemen verkörpern. Ziel dieser Formulierung von physikalischen Problemen ist es, analog zu experimentellen Beobachtungen sogenannten "Eigenfunktionen" von Operatoren diskrete Werte zuzuordnen,
entsprechend den Resultaten von Energie-, Drehimpuls- oder Spinmessungen von Elektron-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, wie sie etwa in der Schrödingergleichung zu finden sind, ohne dabei die Funktion selbst zu verändern. Assoziierte Legendre Polynome können aus den bereits bekannten Legendre Polynomen über folgende Relation gewonnen werden:

$$P_{l,m}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

wobei die Indices l und m nun als Drehimpuls und Magnetquantenzahl interpretiert werden können. Zeigen Sie, dass die Kugelflächenfunktionen

$$\Psi_{l,m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_{l,m}(Cos(\theta)) e^{im\phi}$$

für Quantenzahlen $l = 2, m = 0$, bzw. $l = 2, m = 1$ Lösungen der Eigenwertgleichung

$$-\Delta\Psi(\theta, \phi) = l(l+1)\Psi(\theta, \phi)$$

darstellen.
Tipp: Der von r unabhängige Laplaceoperator Δ lässt sich in sphärischen Koordinaten wie folgt schrieben:

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial\theta^2} + Cot(\theta)\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + 1/Sin^2(\theta)\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2}$$