

# Thuisopdracht 3

## Moleculaire Modelling & Wiskunde

- ★ Deadline voor het inleveren van deze thuisopdracht:  
**vrijdag 11 januari 2013 om 11:00** (aan het einde van het college).
- ★ Vergeet niet je naam en studentnummer te vermelden.
- ★ Iedere student levert zijn/haar eigen uitwerkingen in.
- ★ Inzendingen via email worden **niet** geaccepteerd.

### De opdracht

Beschouw de differentiaalvergelijking (DV) die de ongedempte mathematische slinger beschrijft voor kleine hoeken  $x$  waarvoor  $\sin(x) \approx x$  (zie ook handout, pag. 20 e.v.):

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -x \end{cases} \quad (1)$$

met startwaarden  $x(0) = 1$  en  $y(0) = 0$ .

a) Schrijf de formules op voor de volgende vier benaderingsmethoden van deze DV met stapgrootte  $\Delta t$ : 1) Euler-Forward (EF), 2) Euler-Backward (EB), 3) Symplectic-Euler (SY), 4) de impliciete midpuntmethode (MP).

NB. Bij de methoden EB en MP moet je het algoritme eerst naar een handige vorm herschrijven voordat je het in onderdeel b) kunt gaan gebruiken!

b) Bereken met stapgrootte  $\Delta t = 0.1$  en eindtijd  $T = 2\pi$  de numerieke oplossing voor  $t = 0.0, 0.1, 0.2, \dots, T$ <sup>1</sup> voor de vier methoden uit onderdeel a). Maak een tabel met uitkomsten voor de numerieke oplossing op  $t = T$ .

c) Plot in één figuur met  $x$  op de  $x$ -as en  $y$  op de  $y$ -as (faseplaatje) zowel de numerieke oplossingen uit b) voor de genoemde tijdstippen als de exacte oplossing (een cirkel met straal 1 en middelpunt  $(0,0)$ ). Maak in een tweede figuur een plot van de energie  $E = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2$  als functie van de tijd op het interval  $t \in [0, T]$  (neem hiervoor  $t$  op de  $x$ -as en  $E$  op de  $y$ -as). Uit de DV volgt dat  $\dot{E} = 0$ , d.w.z.  $E$  is constant in de tijd. Geldt dit ook voor de numerieke oplossingen? Geef ook commentaar op de kwaliteit van de verkregen oplossingen in beide figuren.

NB. Geef in de figuren uit onderdeel c) duidelijk aan welke oplossing bij welke methode hoort!

---

<sup>1</sup> $T = 2\pi$  wordt natuurlijk niet precies bereikt door  $\Delta t = 0.1$  te nemen. Kies dus een geschikte  $T \approx 2\pi$