Numerische Methoden der Physik

SoSe 2021 – Prof. Marc Wagner

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

Aufgabenblatt 6

Wird besprochen am 01.06, 02.06[1] *und 08.06, 09.06*[2]

Aufgabe 1 [*Die Poisson Gleichung*] (1+3+5+8+3+10+2=32 Pkt.)

Betrachte ein ruhendes geladenes Teilchen mit negativer Ladung $Q = -q$ in einem d-dimensionalen Raum, welches sich im Zentrum einer geerdeten Kugel mit Radius R befindet. Das elektrostatische Potential ϕ, das durch das Teilchen erzeugt wird, kann durch Lösen der Poisson Gleichung

$$\Delta\,\phi(\mathbf{r}) = \frac{q}{\varepsilon_0}\,\delta(\mathbf{r}),$$

mit den Randbedingungen $\phi(\mathbf{r}) = 0$ für $|\mathbf{r}| \geqslant R$, berechnet werden (hier ist ε_0 die elektrische Feldkonstante).

Erster Teil

(i) Schreibe die Poisson Gleichung in d Raumdimensionen so um, dass sie nur noch dimensionslose Größen enthält.

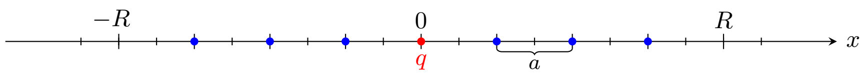
(ii) Berechne das Potential $\phi(\mathbf{r})$ für $d = 1$ und $d = 2$ analytisch. (*Hinweis: Die Oberfläche einer 1-dimensionalen Kugel sind zwei Punkte bei $x = \pm R$.*)

(iii) Betrachte nun das Problem in einer Dimension. Eine Möglichkeit es numerisch zu lösen ist den Bereich der Lösung (im 1-dimensionalen Fall das Interval $I \equiv [-R, R]$) mit einem Gitter zu diskretisieren und die Ableitungen mit Differenzenquotienten zu approximieren. Dies führt dazu, dass die Differentialgleichung auf ein lineares Gleichungssystem abgebildet wird, welches mit den Standardtechniken aus der Vorlesung gelöst werden kann.

Zunächst führen wir ein Raumgitter

$$x \to x_j = j\,a \qquad \text{mit} \qquad j = -n+1, -n+2, \ldots, n-2, n-1 \qquad \text{und} \qquad a = \frac{R}{n}$$

ein, welches aus $2n-1$ Gitterpunkten besteht. An den Rändern des Gitters müssen die Randbedingungen $\phi(x_{\pm n}) = 0$ gefordert werden.



Schreibe nun die Poisson Gleichung in die Form

$$A_{ij}\phi_j = b_i$$

um, mit $\phi_j \equiv \phi(x_j)$ als dem unbekannten diskretisierten Potential des Problems (es ist nun ein Vektor mit $2n-1$ Komponenten), A eine Matrix und $\mathbf{b}$ ein Vektor (für $A, \mathbf{b}$ muss ein geeigneter Ausdruck vor der numerischen Implementation gefunden werden). Verwende die Approximation

$$\frac{\partial^2\,\phi_j}{\partial\,x^2} \approx \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{a^2}$$

und überlege wie du die δ-Funktion korrekt behandelst und implementierst.

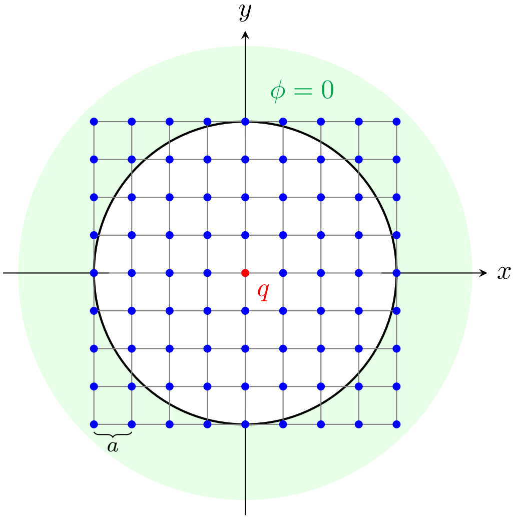
[1] Der erste Teil von Aufgabe 1 wird an diesen Tagen besprochen.
[2] Der zweite Teil von Aufgabe 1 und Aufgabe 2 werden an diesen Tagen besprochen.

(iv) Löse das so erhaltene lineare Gleichungssystem mit einer der numerischen Methoden, die in der Vorlesung behandelt wurden (z.B. LU-Zerlegung) und erhalte so das elektrostatische Potential $\phi(x)$. Untersuche wie das Ergebnis vom Parameter n abhängt und vergleiche deine Lösung mit der analytischen Lösung.

(v) Platziere das geladene Teilchen nun an die Stelle $x = R/2$. Löse die Poisson Gleichung erneut analytisch und numerisch.

ZWEITER TEIL

(vi) Nun betrachten wir das Problem in zwei Raumdimensionen mit dem Teilchen zunächst wieder im Zentrum der Kugel. Wiederhole die Teilaufgaben (iii) und (iv) nun mit einem zwei dimensionalen Gitter.



(vii) Platziere nun das Teilchen an die Position $(x, y) = (R/2, 0)$ analog zu Teilaufgabe (v) und löse die Poisson Gleichung numerisch.

Aufgabe 2 [*LU-Zerlegung*] (8 Pkt.)

Schreibe ein Programm, welches ein lineares Gleichungssystem der Form

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} ,$$

mit der in der Vorlesung besprochenen LU-Zerlegung löst. Hierbei ist A eine $N \times N$ Matrix mit reellen Einträgen und $\mathbf{x}$, $\mathbf{b}$ sind Vektoren mit N-Komponenten. Implementiere nun die Teilpivotisierung. Im Folgenden sollen die Vorteile dieser Methode untersucht werden, wenn die Einträge der Matrix A und des Vektors b entweder

(i) gleichmäßig zufällig verteilt im Intervall [-1,1] sind

oder

(ii) die Form e^x haben, wobei x eine gleichmäßig zufällig verteilte Zahl im Intervall $[-5, 5]$ ist.

Um im Detail zu verstehen was passiert, löse das lineare System mit und ohne Teilpivotisierung für $10 \leqslant N \leqslant 400$ und plotte den Fehler $|A \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}|$ als Funktion von N.