

NUMERISCHE METHODEN DER PHYSIK

SoSe 2021 – PROF. MARC WAGNER

LASSE MÜLLER: lmueller@itp.uni-frankfurt.de
LAURIN PANNULLO: pannullo@itp.uni-frankfurt.de

Aufgabenblatt 7

Wird besprochen am 22.06 und 16.06

Aufgabe 1 [Die Poisson Gleichung II]

(2+7+4+1=14 Pkt.)

Wir betrachten ein ruhendes, elektrisch geladenes Teilchen mit negativer Ladung $-q$ in einem d -dimensionalen Raum, welches sich im Zentrum eines geerdeten *kubischen Volumens* befindet. Von Aufgabenblatt 6 ist bekannt, dass die Poisson Gleichung

$$\hat{\Delta} \hat{\phi}(\mathbf{r}) = \hat{\delta}(\mathbf{r})$$

(in dimensionslosen Größen) mit Hilfe eines auf ein System linearer Gleichungen $A_{ij} \hat{\phi}_j = b_i$ abgebildet werden kann.

- (i) Argumentiere, dass die Matrix A dünn besetzt (sparse), symmetrisch und negativ definit ist.
- (ii) Implementiere die iterative Methode der konjugierten Gradienten (CG-Methode), welche in der Vorlesung besprochen wurde, und benutze sie, um die Poisson-Gleichung in $d = 1$ Dimension zu lösen. Vergleiche mit dem analytischen Ergebnis von Aufgabenblatt 6. (Beachte, dass in 1D kein Unterschied zwischen einer Kugel und einem Würfel besteht.)
- (iii) Betrachte nun $d = 2$, also ein Quadrat mit Seitenlänge $2R$. Berechne das elektrostatische Potential $\hat{\phi}$ auf einem Gitter mit 100 Punkten in jeder Richtung mit der CG-Methode und einer Präzision von $|A \cdot \hat{\phi} - \mathbf{b}| \leq 10^{-10}$. Wiederhole die Simulation mit der doppelten Anzahl an Punkten in jeder Richtung.
- (iv) Wie viele Iterationen und wie viel Zeit braucht dein Algorithmus, um zur Lösung zu konvergieren? Schätze wie viel Speicher dein Programm in beiden Fällen in etwa brauchen würde, wenn du eine direkte Methode zur Lösung des linearen Gleichungssystem verwenden würdest? Wie viel Speicher hast du stattdessen benutzt? Bestimme die theoretisch maximale Anzahl von Punkten in jeder Richtung, die auf deinem Computer für die direkte bzw. iterative Methode möglich ist.

Aufgabe 2 [Volumen der Einheitskugel in d Dimensionen]

(6 Pkt.)

Betrachte die d -dimensionale Einheitskugel für $d \in \{2, 3, 10\}$ und berechne ihr Volumen V_d mithilfe der Monte-Carlo-Integration. Berechne das Integral

$$V_d \equiv \int_{-1}^{+1} dx_1 \int_{-1}^{+1} dx_2 \cdots \int_{-1}^{+1} dx_d \Theta(1 - x_1^2 - x_2^2 - \dots - x_d^2)$$

mit $d \in \{2, 3, 10\}$.

Nutze jeweils $N_1 = 10^6$ und $N_2 = 10^8$ zufällig gewählte Abtastpunkte zur Berechnung des Integrals. Vergleiche mit dem analytischen Ergebnis und begründe, warum der statistische Fehler sowohl von N_i als auch d abhängt.