Numerische Methoden der Physik – Aufgabenblatt 05

Marc Wagner – Christopher Czaban – Joshua Berlin
Institut für Theoretische Physik – Goethe-Universität Frankfurt am Main

21. Mai 2014 (Besprechung Aufgabe 08, Aufgabe 09 (a) bis (c) am 4. Juni 2014, (d) bis (e) am 11. Juni 2014)

Aufgabe 08

Implementieren Sie den in der Vorlesung besprochenen Gauß-Jordan-Algorithmus mit Rückwärtssubstitution zur numerischen Lösung eines linearen Gleichungssystems der Form $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ (A: $N \times N$-Matrix; $\mathbf{x}$, $\mathbf{b}$: N-komponentige Vektoren). Sehen Sie dabei drei Pivotstrategien vor:

(1) Keine Pivotisierung.

(2) Teilpivotisierung.

(3) Skalierte Teilpivotisierung.

Generieren Sie nun zufällige Matrizen A und Vektoren $\mathbf{b}$ im Bereich $10 \leq N \leq 400$ und untersuchen Sie den numerischen Fehler $\delta = |A\mathbf{x} - b|$ in Abhängigkeit von der Problemgröße N und den drei implementierten Pivotstrategien. Verwenden Sie zunächst uniform verteilte Einträge in $[-1, +1]$, dann Einträge e^x, wobei x uniform in $[-5, +5]$ verteilt ist. Beschreiben und interpretieren Sie Ihre Ergebnisse.

Aufgabe 09

Betrachten Sie ein elektrisch geladenes Teilchen mit Ladung q in d Raumdimensionen, welches sich zentriert und in Ruhe innerhalb einer geerdeten Kugel mit Radius R befindet. Das von dem Teilchen erzeugte elektrostatische Potential ϕ wird durch die Poisson-Gleichung

$$\triangle\phi(\mathbf{r}) \quad = \quad q\delta(\mathbf{r})$$

und die Randbedingung $\phi(\mathbf{r}) = 0$ falls $|\mathbf{r}| \geq R$ beschrieben.

(a) Schreiben Sie die Poisson-Gleichung und die Randbedingungen so um, dass ausschließlich dimensionslose Größen auftreten.

(b) Bestimmen Sie ϕ analytisch für $d = 1$ (die "Kugel" besteht aus zwei Punkten $x = \pm R$) und $d = 2$ (die "Kugel" entspricht einem Kreis mit Radius R).

(c) Eine Möglichkeit[1], eine lineare partielle Differentialgleichung numerisch zu lösen, besteht darin, den Definitionsbereich der gesuchten Funktion mit einem Gitter zu diskretisieren und die Funktion auf die Funktionswerte an diesen Gitterpunkten zu reduzieren. Im obigen $d = 1$-Fall könnte man zum Beispiel durch die Vorschrift

$$x \to x_j = j \times a \quad , \quad j = -(n+1), -n, \ldots, +n, +(n+1) \quad , \quad a = \frac{2R}{2n+2}$$

ein Gitter einführen, welches aus $2n+3$ Gitterplätzen besteht. An den beiden Randgitterpunkten muss ϕ aufgrund der Randbedingungen verschwinden, d.h. $\phi_{\pm(n+1)} = \phi(x_{\pm(n+1)}) = 0$. Alle anderen $\phi_j = \phi(x_j)$ werden durch ein lineares Gleichungssystem bestimmt, welches durch Diskretisierung der Ableitungen (z.B.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x_j) \quad \to \quad \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{a^2}$$

) und der δ-Funktion aus der Poisson-Gleichung hervorgeht. Überlegen Sie sich, wie dieses lineare Gleichungssystem in den Fällen $d = 1$ und $d = 2$ aussieht.

(d) Lösen Sie die von Ihnen in (c) aufgestellten linearen Gleichungssysteme mit einem numerischen Verfahren Ihrer Wahl, z.B. der LU-Zerlegung, und bestimmen Sie damit die entsprechenden elektrostatischen Potentiale ϕ. Studieren Sie die Abhängigkeit Ihrer Ergebnisse von der Anzahl der verwendeten Gitterpunkte und vergleichen Sie mit den in (b) gewonnenen analytischen Ausdrücken.

(e) Verschieben Sie die Ladungen für $d = 1$ nach $x = R/2$ und für $d = 2$ nach $(x, y) = (R/2, 0)$ und bestimmen Sie die elektrostatischen Potentiale ϕ erneut (im $d = 1$-Fall ist auch hier eine einfache analytische Lösung möglich, nicht jedoch im $d = 2$-Fall).

[1] Ein solches Vorgehen ist allerdings nicht sehr effizient. Bessere Verfahren sind in der Literatur zu finden.