Computational Physics

Übungsblatt 4

Miriam Simm
miriam.simm@tu-dortmund.de

Katrin Bolsmann
katrin.bolsmann@tu-dortmund.de

Mario Alex Hollberg
mario-alex.hollberg@tu-dortmund.de

Abgabe: 22. Mai 2020

Aufgabe 1: Eindimensionale Integration

Ziel der Aufgabe ist die numerische Berechung der folgenden Integrale mit einer der Integrationsroutinen, die bereits auf dem letzten Übungsblatt implementiert wurden:

$$I_1 = \fint_{-1}^{1} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{e}^t}{t}$$
$$I_2 = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}}$$
$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \frac{\sin(t)}{t}$$

a) Da es sich bei diesem Integral um ein Hauptwertintegral handelt, sollte nicht direkt integriert werden. Stattdessen wird das Integral wie folgt aufgeteilt:

$$I_1 = \fint_{-1}^{1} \mathrm{d}t\, \frac{\mathrm{e}^t}{t} = \underbrace{\int_{-1}^{-\Delta} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t + \int_{\Delta}^{1} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t}_{\text{Numerische Berechnung}} + \underbrace{\int_{-\Delta}^{\Delta} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t}_{I'}$$

$$\begin{aligned}
I' &= \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\int_{-\Delta}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t + \underbrace{\int_{\varepsilon}^{\Delta} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t}_{I''}\right) \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\left(\int_{-\Delta}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t + \int_{-\varepsilon}^{-\Delta} \frac{\mathrm{e}^{-t}}{(-t)}\,\mathrm{d}(-t)\right) \\
&= \underbrace{\lim_{\varepsilon\to 0}\left(\int_{-\Delta}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^t - \mathrm{e}^{-t}}{t}\,\mathrm{d}t\right)}_{\text{hebbare Singularität}} \\
&= \int_{-\Delta}^{0} \frac{\mathrm{e}^t - \mathrm{e}^{-t}}{t}\,\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

mit

$$\lim_{t\to 0} \frac{\mathrm{e}^t - \mathrm{e}^{-t}}{t} = \lim_{t\to 0} \frac{\mathrm{e}^t + \mathrm{e}^{-t}}{1} = 2$$

2.1

b) Bei diesem Integral wird bis zu einer oberen Grenze $x_{\max} = 100000$ ingetriert,

$$
\begin{aligned}
I_2 &= \int_0^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}} \\
&= \underbrace{\int_0^{x_{\max}} \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}}}_{I'} - \boxed{\underbrace{\int_{x_{\max}}^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}}}_{\text{Fehler}}} \quad \text{3.1} \\
I' &= \int_0^{x_{\max}} \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}} \\
&= \int_0^{\Delta x} \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}} + \int_{\Delta x}^{x_{\max}} \mathrm{d}t \, \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}}
\end{aligned}
$$

wobei die erste Integration für ein sehr kleines Δx vernachlässigt werden kann.

c) Bei diesem Integral wird ausgenutzt, dass die zu integrierende Funktion symmetrisch ist:

$$
\begin{aligned}
I_3 &= \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\sin(t)}{t} \\
&= 2 \int_0^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\sin(t)}{t} \\
&= 2 \int_0^1 \mathrm{d}t \, \frac{\sin(t)}{t} + 2 \underbrace{\int_1^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\sin(t)}{t}}_{I'}
\end{aligned}
$$

Das erste Integral hat bei $t = 0$ eine hebbare Singularität. Für I' wird eine Substition mit $t = \frac{1}{x}$ durchgeführt.

$$
\begin{aligned}
I' &= \int_1^\infty \mathrm{d}t \, \frac{\sin(t)}{t} \\
&= \int_1^0 \left(-\frac{\mathrm{d}x}{x^2} \right) \frac{\sin(\frac{1}{x})}{\frac{1}{x}} \\
&= \int_0^1 \mathrm{d}x \, \frac{\sin(\frac{1}{x})}{x}
\end{aligned}
$$

Mit diesen Umformungen wird die Integration nun implementiert. Die Ergebnisse unter Angabe der verwendeten Integrationsmethode befinden sich in der folgenden Tabelle.

Tabelle 1: Ergebnisse der Berechnung der einzelen Integrale.

	Ergbnis	Methode
I_1	2.1132	Simpsonregel
I_2	1.77034	Mittelpunktsregel
I_3	3.14159	Mittelpunktsregel

Aufgabenteil c) wird außerdem analytisch berechnet. Das Integral hat, wie oben bereits erwähnt, eine hebbare Singularität bei $t = 0$, wozu die Regel von de l'Hospital angewandt wird:

$$\lim_{t \to 0} \frac{\sin(t)}{t} \overset{\text{"}\frac{0}{0}\text{"}}{=} \lim_{t \to 0} \cos(t) = 1$$

Der Sinus wird dargestellt durch

$$\sin(t) = \frac{1}{2i} \left(\mathrm{e}^{it} - \mathrm{e}^{-it} \right)$$

Zur Lösung des Integrals wird nun der Cauchy-Hauptwert verwendet und das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{it}}{t} \, \mathrm{d}t$ betrachtet:

$$\begin{aligned}
\text{CH} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \mathrm{d}x &= \boxed{\lim_{r \to 0} \left(\int_{-r}^{0} f(x) \mathrm{d}x + \int_{0}^{r} f(x) \mathrm{d}x \right)} \\
\text{CH} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{it}}{t} \, \mathrm{d}t &= \lim_{R \to \infty, \varepsilon \to 0} \left(\int_{-R}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^{i\omega t}}{t} \, \mathrm{d}t + \int_{\varepsilon}^{R} \frac{\mathrm{e}^{i\omega t}}{t} \, \mathrm{d}t \right) \\
&\boxed{= \begin{cases} i\pi & \text{für } \omega > 0 \\ -i\pi & \text{für } \omega < 0 \end{cases}}
\end{aligned}$$

Diese Ergebnisse werden nun für das hier vorliegende Integral verwendet.

$$\begin{aligned}
\text{CH} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(t)}{t} \mathrm{d}t &= \lim_{R \to \infty, \varepsilon \to 0} \frac{1}{2i} \left(\int_{-R}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^{it}}{t} \, \mathrm{d}t + \int_{\varepsilon}^{R} \frac{\mathrm{e}^{it}}{t} \, \mathrm{d}t - \int_{-R}^{-\varepsilon} \frac{\mathrm{e}^{-it}}{t} \, \mathrm{d}t - \int_{\varepsilon}^{R} \frac{\mathrm{e}^{-it}}{t} \, \mathrm{d}t \right) \\
&= \frac{1}{2i} \left(i\pi - (-i\pi) \right) \\
&= \pi
\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis stimmt, unter Betrachtung eines gewissen Fehlers, mit dem Resultat aus der numerischen Berechnung in 1 überein.

Aufgabe 2: Mehrdimensionale Integration in der Elektrostatik

Das elektrostatische Potential entlang der x-Achse:

$$\phi(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \mathrm{d}x' \int \mathrm{d}y' \int \mathrm{d}z' \frac{\rho\left(x', y', z'\right)}{\left[\left(x - x'\right)^2 + y'^2 + z'^2\right]^{1/2}}$$

für zwei Ladungsverteilungen in einem Würfel der Kantenlänge $2a$ ist zu bestimmen.

a)

$$\rho(x, y, z) = \begin{cases} \rho_0, & |x| < a, |y| < a, |z| < a \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

(1)

Das Integral wird folgendermaßen einheitenlos gemacht. Dabei wird a gleich Eins gesetzt.

$$x' \to \frac{x}{a} \quad \phi' \to \phi \frac{4\pi\epsilon_0}{\rho_0 a^2}$$

(2) +(3)

Das Integral wird mit der Mittelpunktsregel außerhalb des Würfels für x-Werte $x/a = 0.1n$ mit $n \in \{11, 12, \ldots, 80\}$ ausgewertet. Die Asymptotik des Potentials für große x-Werte wird mit einer Multipolentwicklung bis zur ersten nicht-verschwindenden Ordnung abgeschätzt:

$$\text{Monopolmoment:} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} dx dy dz \overset{\text{y=z=0}}{=} \frac{8}{x}$$

und ist zusammen mit der Integral-Auswertung in Abbildung 1 abgebildet.

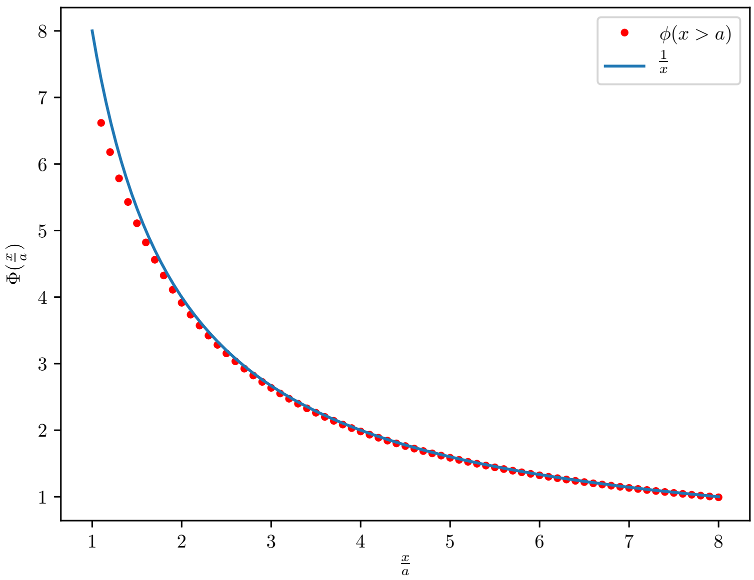

Abbildung 1: x-Werte außerhalb des Potentials

(4)

Nun wird das Potential für x-Wert innerhalb des Würfels: $x/a = 0.1n$ mit $n \in \{0, 1, \dots, 10\}$ ausgewertet und in Abbildung 2 dargestellt. Singularitäten können hier zu Probleme führen, weshalb die Schrittweite h in allen drei Integrationen auf eine irrationale Zahl $\frac{1}{30\pi}$ gesetzt wird. Es ist nun sehr unwahrscheinlich, dass x gleich x', und somit $(x - x')^2$ (und damit möglicherweise auch der ganze Nenner) Null wird.

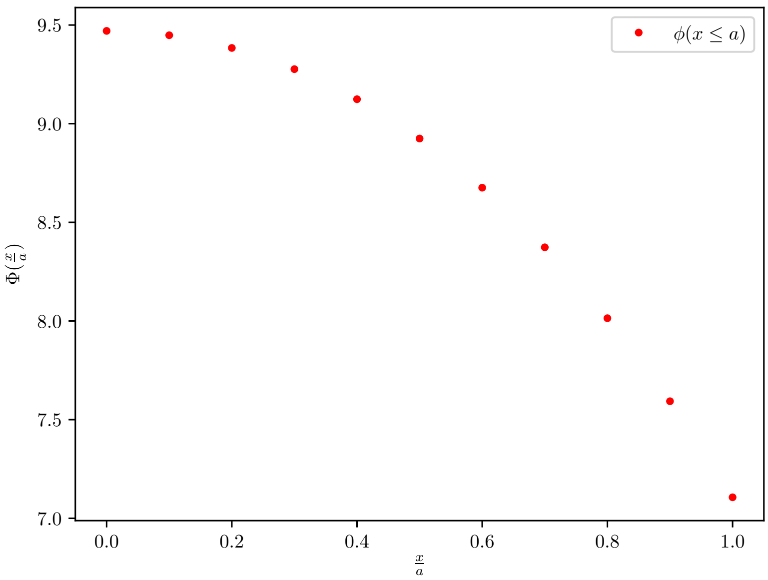

Abbildung 2: x-Werte innerhalb des Potentials

b)

$$\rho(x,y,z) = \begin{cases} \rho_0 \frac{x}{a}, & |x| < a, |y| < a, |z| < a \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{1}$$

(1)

Analog zu a)

(2)+(3)

Multipolentwicklung bis zu ersten nicht-verschwindenden Ordnung:

$$\text{Dipolmoment:} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}^3} \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} x^2 dxdydz \overset{\text{y=z=0}}{=} \frac{8}{3x^2}$$

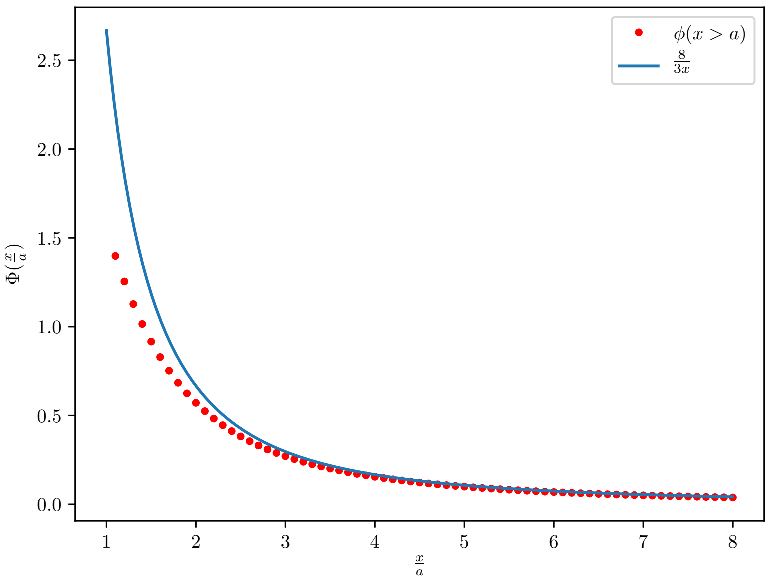

Abbildung 3: x-Werte außerhalb des Potentials

(4)

Analog zu a)

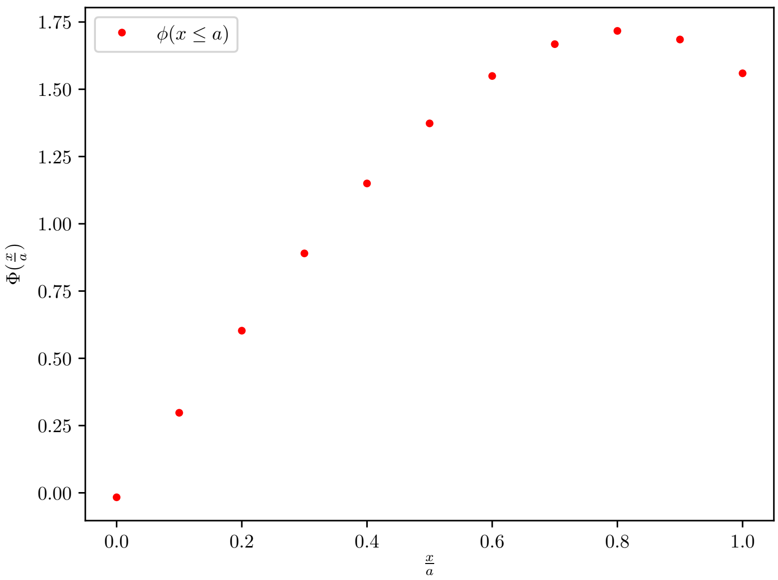

Abbildung 4: x-Werte innerhalb des Potentials

Index der Kommentare

2.1 Hier könnt ihr ein Wort dazu schreiben, wie ihr darauf kommt.

3.1 Könnt ihr den Fehler auch für euer konkretes xMax quantifizieren? (-1)

4.1 Hier habt ihr euch wohl bei den Grenzen und Limes vertippt.

4.2 Das fällt hier sehr plötzlich vom Himmel. (-1)