

Computational Physics

Übungsblatt 1

Ausgabe: 21.04.2017

Abgabe: 28.04.2017 bis 10:00 Uhr

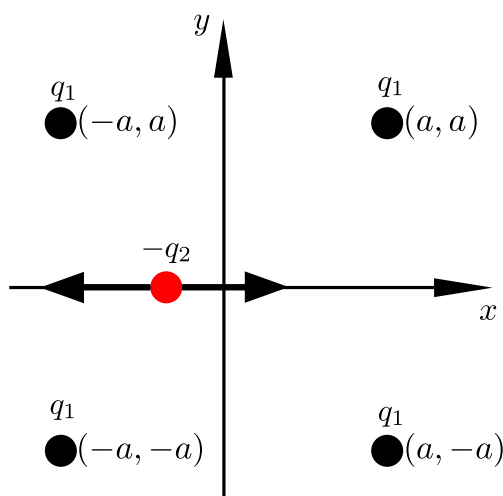
Senden Sie Ihre Abgaben (Antworten auf Fragestellungen, Plots, Datensätze und Quellcode) als gepacktes Archiv (z.B. als zip-File) per E-Mail an Ihre Übungsgruppenleiter.

Verständnisfragen

- Wie gehen Sie in numerischen Rechnungen mit einheitenbehafteten Größen um?
- Auf welche Art würden Sie numerisch Ableitungen und Integrale berechnen? Worin sehen Sie wesentliche Unterschiede in den Methoden? Wie entscheiden Sie ob ihr Ergebnis präzise genug ist?
- Worin sehen Sie beim numerischen Integrieren und Differenzieren die größten Fallen?

Aufgabe 1. Punktladungen (10 P.)

Wir betrachten ein zweidimensionales System aus vier unbeweglichen Punktladungen q_1 mit den Koordinaten (a, a) , $(a, -a)$, $(-a, a)$ und $(-a, -a)$. Eine weitere Punktladung $-q_2$ kann sich auf der x -Achse bewegen. ($q_1, q_2 > 0$)



- a) Stellen Sie die Coulomb-Energie $E(x)$ der Punktladung $-q_2$ in Abhängigkeit von deren Position auf der x -Achse auf. Berechnen Sie analytisch die auf die Punktladung $-q_2$ wirkende Kraft in x -Richtung als Ableitung der Energie ($F(x) = -\frac{\partial E}{\partial x}$).

Abgabe: analytisches Ergebnis für $E(x)$ und $F(x)$

- b) Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung von $E(x)$. Plotten Sie damit $E(x)$ im Bereich $-3a \leq x \leq 3a$.

Hinweis: Überlegen Sie sich die natürlichen Einheiten des Systems für Ort und Energie.

Abgabe: einen Datensatz mit zwei Spalten x und $E(x)$, den zugehörigen Plot und den Quellcode

- c) Berechnen Sie $F(x)$ numerisch aus $E(x)$ mit der symmetrischen 2-Punkt-Formel für $h = 0.3a, 10^{-4}a, 10^{-15}a$.

Abgabe: drei Datensätze mit jeweils drei Spalten x , $F_{\text{num}}(x)$ und $F_{\text{an}}(x)$, die zugehörigen Plots und den Quellcode

- d) Berechnen Sie die relative Abweichung der numerischen Ergebnisse von $F(x)$ für $h = 0.3a, 10^{-4}a, 10^{-15}a$ von der analytischen Lösung. Wie entstehen die Abweichungen und wann sind sie besonders groß?

Abgabe: drei Datensätze mit jeweils zwei Spalten x , $(F_{\text{num}}(x) - F_{\text{an}}(x))/F_{\text{an}}(x)$, die zugehörigen Plots und den Quellcode

Aufgabe 2. Integrationsroutinen

(10 P.)

Gegeben sind die beiden folgenden Integrale

$$I_1 = \int_1^{100} dx \frac{\exp(-x)}{x} \quad (1)$$

$$I_2 = \int_0^1 dx x \sin\left(\frac{1}{x}\right) \quad (2)$$

(zur Kontrolle: $I_1 \simeq 0.219\,384$ und $I_2 \simeq 0.378\,530$).

Berechnen Sie diese, indem Sie Integrationsroutinen für die

- Trapezregel,
- Mittelpunktsregel,
- Simpsonregel

schreiben. Die Integrationsroutinen sollen jeweils die folgenden Argumente übergeben bekommen:

- Integrand $f(x)$,
- untere Integrationsgrenze a ,
- obere Integrationsgrenze b ,
- Integrationsintervallbreite h oder Anzahl der Integrationsintervalle N (bei der Simpsonregel sollte N gerade sein).

Halbieren Sie die Intervallbreite h bis die relative Änderung des Ergebnisses kleiner als 10^{-4} wird und plotten Sie für beide Integrale die Ergebnisse der drei Integrationsroutinen in Abhängigkeit von der Intervallzahl N .

Hinweis: Zur Übergabe des Integranden an Ihre Integrationsroutine kann der C++11 Header `<functional>` hilfreich sein.

Abgabe: kompilierbaren Quellcode und für jedes Integral einen Plot mit den Ergebnissen der drei Integrationsroutinen