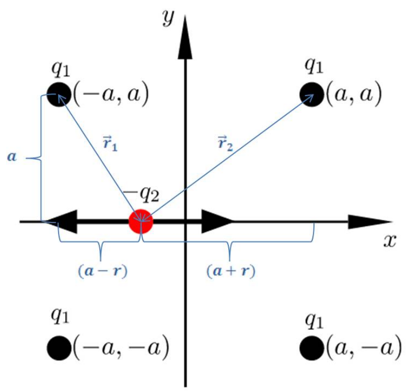
Computational Physics, Aufgabenblatt 1

Kevin Sedlaczek, Mona Kalthoff

27. April 2017

1 Punktladungen



Die Energie ist lediglich abhängig von dem Abstand der beweglichen Ladung zu den vier anderen Ladungen. Da der Abstand zu den beiden linken Ladungen und zu den beiden rechten Ladungen immer gleich ist brauchen diese nur jeweils einmal berechnet zu werden. Sei der Abstand zu den linken Ladungen $r_1(r)$ und zu den rechten Ladungen $r_2(r)$, dann ist die Energie mit dem Satz des Pythagoras gegeben durch

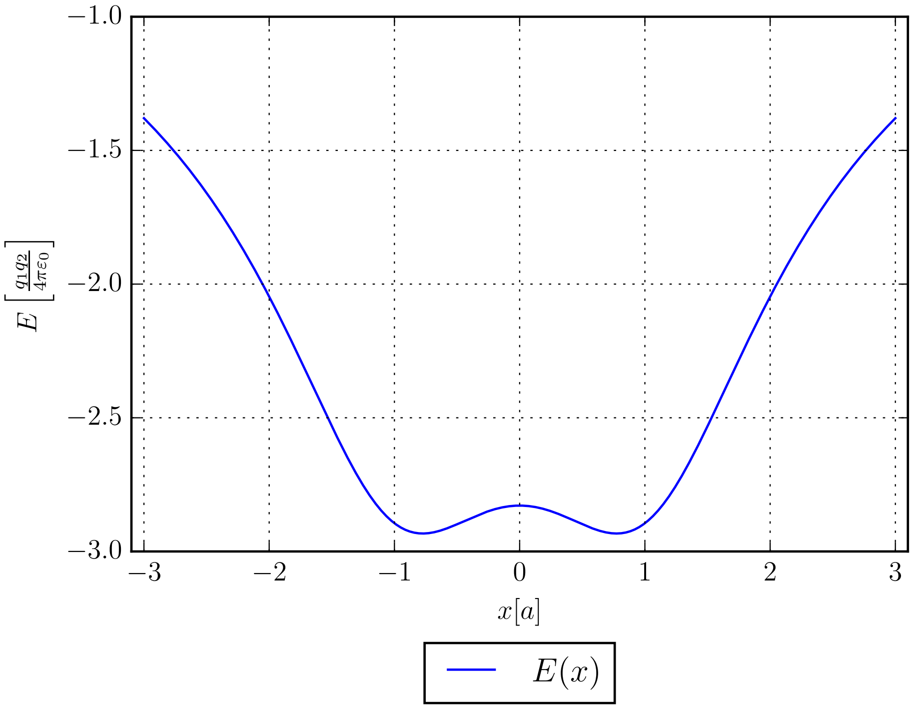
$$E(r) = -\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{r_1(r)} + \frac{1}{r_2(r)} \right) \tag{1a}$$

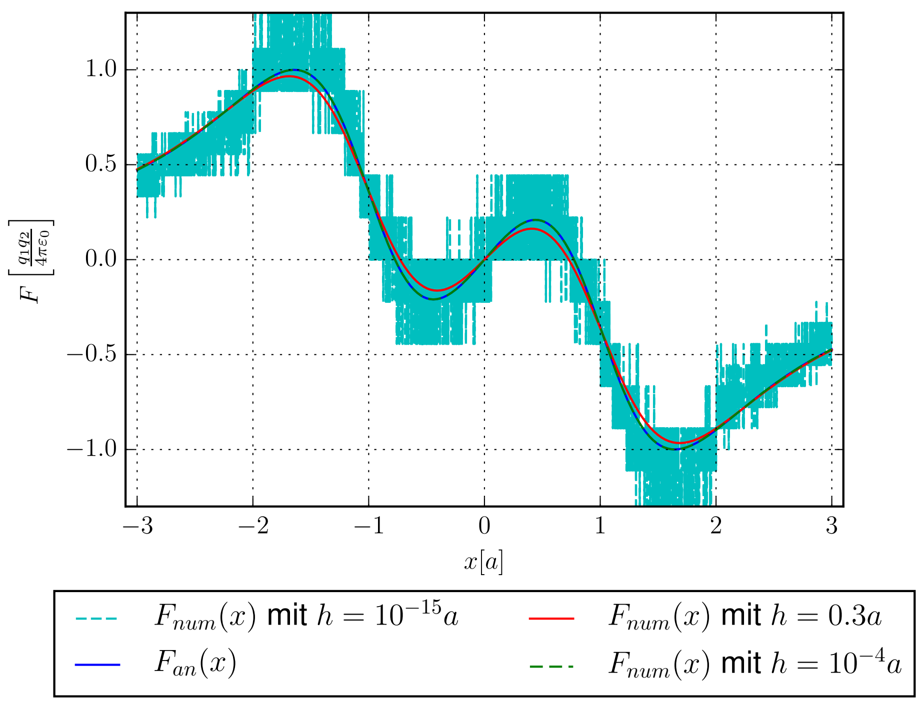
$$= -\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{(a-r)^2 + a^2}} + \frac{1}{\sqrt{(a+r)^2 + a^2}} \right) \tag{1b}$$

$$= -\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot 2 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2a^2 - 2ar + r^2}} + \frac{1}{\sqrt{2a^2 + 2ar + r^2}} \right) . \tag{1c}$$

Daraus ergibt sich für die Kraft auf die bewegliche Punktladung:

$$F(r) = -\frac{\partial E(r)}{\partial r} = -\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \left(\frac{-2a + 2r}{(2a^2 - 2ar + r^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{2a + 2r}{(2a^2 + 2ar + r^2)^{\frac{3}{2}}} \right) \tag{2}$$


-1.0
-1.5
-2.0
-2.5
-3.0
$E\left[\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0}\right]$
-3 -2 -1 0 1 2 3
$x[a]$
$E(x)$


1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
$F\left[\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0}\right]$
-3 -2 -1 0 1 2 3
$x[a]$
$F_{num}(x)$ mit $h = 10^{-15}a$
$F_{num}(x)$ mit $h = 0.3a$
$F_{an}(x)$
$F_{num}(x)$ mit $h = 10^{-4}a$

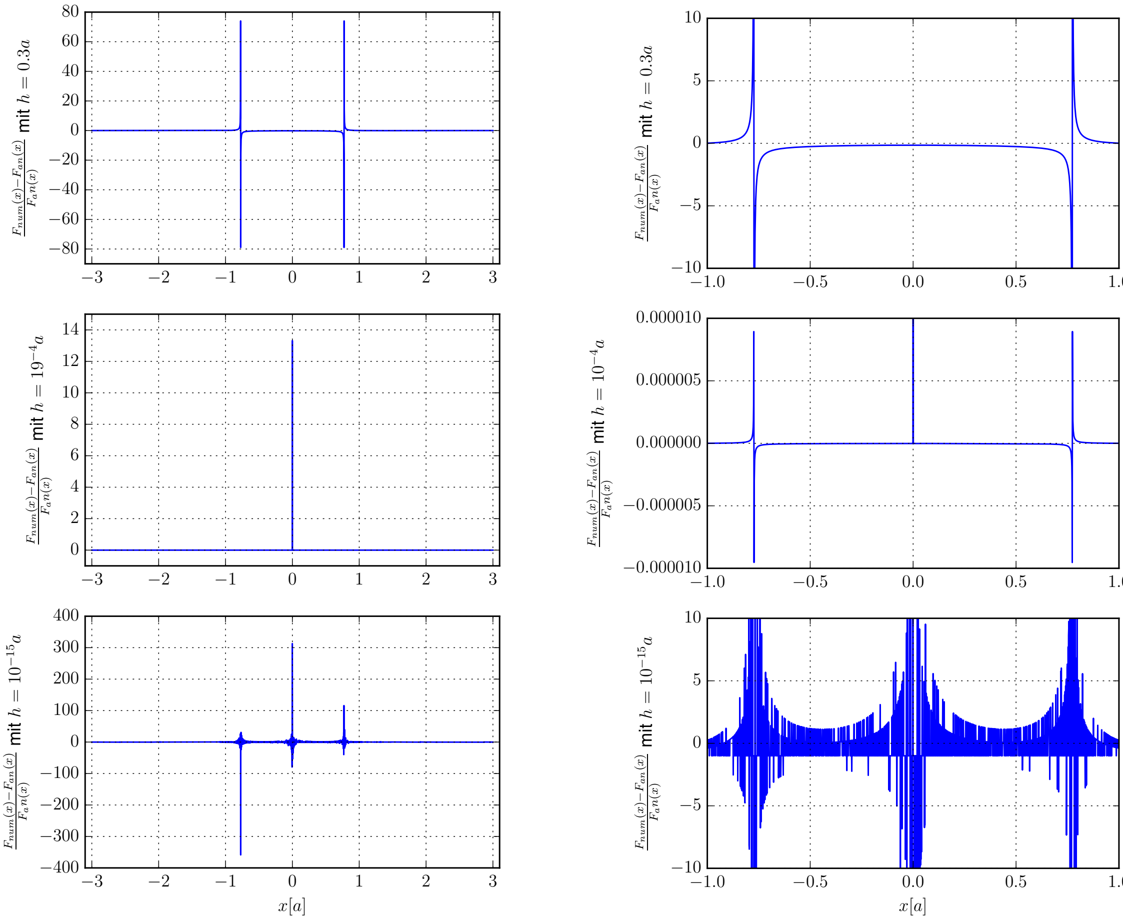


Abbildung 1: Relative Feler in verschiedenen Vergrößerungen

Zur numerischen Berechnung der Ableitung wurde die symmetrische Zweipunktformel verwendet:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}\,, \tag{3}$$

außerdem werden Kraft und Energie jeweils in Einheiten von $\frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0}$ und Längen in Einheiten von a angegeben. Bei der Betrachtung des relativen Fehlers

$$F_{rel} = \frac{F_{num}(x) - F_{an}(x)}{F_{an}(x)} \tag{4}$$

ist auffällig, dass der Fehler dort am größten ist wo die Kraft Nullstellen hat. Diese Nullstellen sind gegeben durch

$$r = 0 \tag{5}$$
$$r \approx \pm -0{,}77348a\,, \tag{6}$$

wobei die beiden Nullstellen bei $r \approx \pm - 0{,}77348a$ einen sehr kleinen Imaginärteil in der Größenordnung $10^{-16}a$ aufweisen. An diesen Stellen kommt es zur Auslöschung und in Gleichung 4 wird durch Null geteilt. Für sehr kleine Diskretisierungen h ist diese Auslöschung besonders gravierend. Ist die Diskretisierung zu grob ist der Abbruchfehler besonders groß. Daher ist der relative Fehler bei der mittleren Diskretisierung $h = 10^{-4}a$ am kleinsten.

2 Integrationsroutinen

Die Trapezregel ist gegeben durch

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h \cdot (f(a+h) + f(a+2h) + ... + f(b-h)) + \frac{h}{2}\,(f(a) + f(b)) \tag{7a}$$

$$\text{mit} \quad h = \frac{b-a}{N}\,, \tag{7b}$$

die Mittelpunktsregel approximiert das Integral durch

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\left[f\left(a + \frac{h}{2}\right) + f\left(a + \frac{3h}{2}\right) + ... + f\left(b - \frac{3h}{2}\right) + f\left(b - \frac{h}{2}\right)\right], \tag{8}$$

und die Simpsonregel lautet

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \quad = \quad \frac{h}{3}\,[f(a) + f(b)] \tag{9}$$

$$+h\left[\frac{4}{3}f(a+h) + \frac{2}{3}f(a+2h) + \frac{4}{3}f(a+3h) + ... + + \frac{4}{3}f(b-h)\right] \tag{10}$$

Die auszuwertenden Integrale sind

$$I_1 = \int_1^{100} \frac{e^{-x}}{x}\,\mathrm{d}x \tag{11}$$

$$I_2 = \int_0^1 x\sin(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{12}$$

Dabei sind die Werte für die Anzahl der Integrationsintervalle N bei deren Wahl die relative Änderung der Ergebnisse kleiner wird als 10^{-4} für beide Integrale, sowie der für diese Anzahl berechnete Wert des Integrals für alle drei Verfahren in Tabelle 1 angegeben.

Tabelle 1: Anzahl der Integrationsintervalle N und zugehöriger Wert der Integrale I für drei Approximationsverfahren

	N_1	I_1	N_2	I_2
Trapezregel	8192	0.2193928888	1024	0.3785269433
Mittelpunktsregel	4096	0.2193660277	1024	0.3785657765
Simpsonregel	1024	0.219386729	2048	0.3785528321

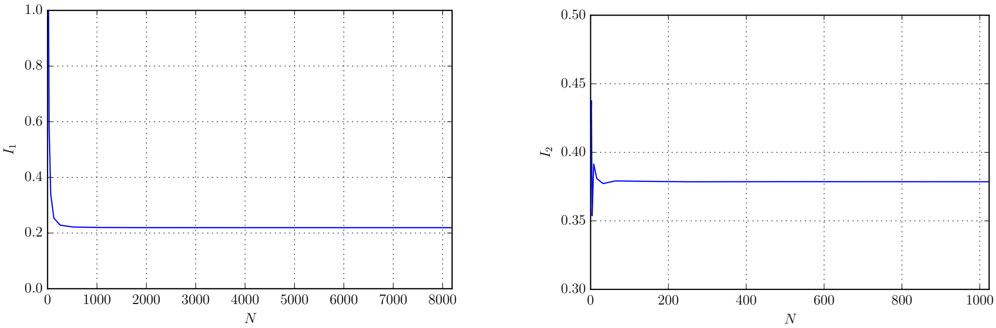


Abbildung 2: Approximierter Wert für I_1 und I_2 in Abhängigkeit der Anzahl der Intervalle N, berechnet mit der Trapezregel

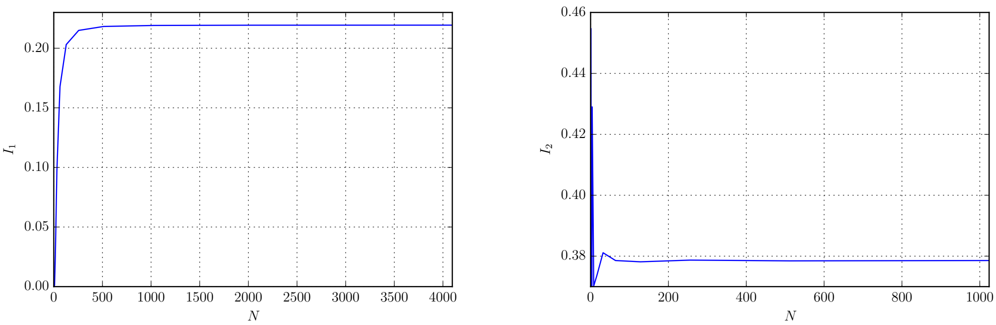


Abbildung 3: Approximierter Wert für I_1 und I_2 in Abhängigkeit der Anzahl der Intervalle N, berechnet mit der Mittelpunktsregel

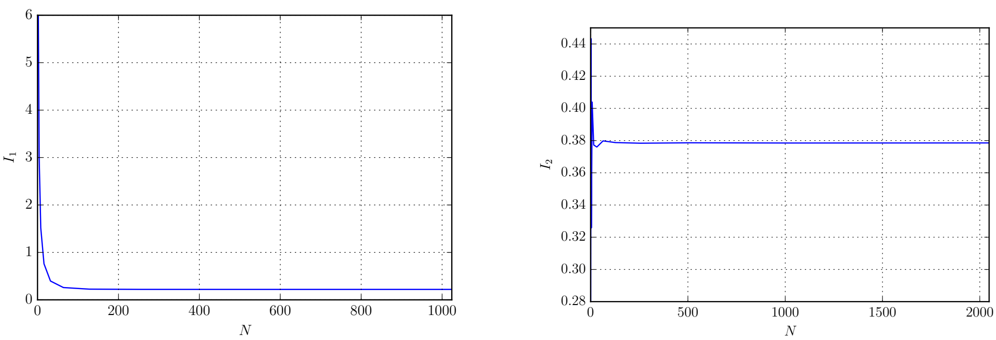


Abbildung 4: Approximierter Wert für I_1 und I_2 in Abhängigkeit der Anzahl der Intervalle N, berechnet mit der Simpsonregel