

Theoretische Physik 3

Aufgabe 9.4

Lars Kühmichel, Elisa Winkes, Amelie Wüllner

5. Januar 2020

Inhaltsverzeichnis

Aufgabenstellung	2
1 Lösung	3
1.1 Teilaufgabe a)	3
1.2 Teilaufgabe b)	4
1.2.1 Beispiel	5
1.3 Teilaufgabe c)	6
A Plots	9

4. Aufgabe [15* Punkte]: Bonusaufgabe: Numerische Lösung der Poisson-Gleichung in 1D

Betrachten Sie die Poissongleichung $\Delta\phi = -4\pi\rho(x)$ in einer Dimension auf dem Intervall $[0, L]$ mit Dirichlet-Randbedingung $\phi = 0$ am Rand.

- (a) Diskretisieren Sie das Potential als ϕ_i auf äquidistanten Gitterpunkten i mit Abstand h . Zeigen Sie mit Hilfe der Taylor-Entwicklung in einer kleinen Gitterkonstante h , dass die zweite Ableitung diskretisiert werden kann als $(\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i)/h^2$. [3P]
- (b) Benutzen Sie dieses Ergebnis, um zu zeigen, daß sich die Poisson-Gleichung in Matrixform schreiben lässt: $A_{ij}p_j = b_i$, wobei $p_i = \phi(x_i)$, $i = 1, \dots, N-1$ die Diskretisierung des Potentials darstellt. Wie lauten die Einträge der Matrix A und des Vektors b , der die Ladungsdichte enthält?

HINWEIS: Die Randbedingungen sind extra zu behandeln.

Vergleichen Sie die Matrix A mit ihrer LU -Zerlegung, $A = L \cdot U$ mit

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \dots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{N-1} & \alpha_{N-1} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_1 & 0 & \ddots \\ 0 & 1 & \gamma_2 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \gamma_{N-2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

und erhalten Sie so einen Algorithmus zur Lösung der Matrixgleichung. [5P]

- (c) Implementieren Sie den Algorithmus (z.B. in *C* oder *python*) und lösen Sie die Poisson-Gleichung für $L = 1$ und $\rho(x) = (1-x)/(4\pi)$. Berechnen Sie die analytische Lösung und zeigen Sie die Übereinstimmung mit Ihrer numerischen Lösung. Wieviele Stützpunkte sind nötig für eine gute Übereinstimmung? [7P]

1 Lösung

1.1 Teilaufgabe a)

Wir nehmen eine Diskretisierung des Potentials vor:

$$\phi_i \equiv \phi(x_i), \quad x_i \equiv i \cdot h, \quad i \in \{0, 1, 2, \dots\} \quad (1.1)$$

Die Ableitung des diskreten Potentials wird über die Taylorentwicklung definiert:

$$\phi(x+h) \approx T[\phi, h](x) = \phi(x) + \phi'(x) \cdot h \quad (1.2)$$

$$\phi(x-h) \approx T[\phi, -h](x) = \phi(x) - \phi'(x) \cdot h \quad (1.3)$$

Es folgt der Differenzenquotient:

$$\frac{\phi(x+h) - \phi(x-h)}{2h} \approx \frac{\phi(x) + h\phi'(x) - \phi(x) + h\phi'(x)}{2h} = \phi'(x) \quad (1.4)$$

Führt man nun noch die Diskretisierung durch so erhält man den **Zentral-differenzenquotienten**:

$$\phi'_i = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2h} \quad (1.5)$$

Durch Substitution erhält man die zweite Ableitung:

$$\phi''_i = \frac{\phi'_{i+1} - \phi'_{i-1}}{2h} \quad (1.6)$$

Um einen genaueren Wert zu erhalten führen wir noch die **Vorwärtsdifferenz**

$$\phi'_{i,v} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} \quad (1.7)$$

und die **Rückwärtsdifferenz**

$$\phi'_{i,r} = \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \quad (1.8)$$

ein. Die Näherung aus Gleichung 1.6 wird dann verbessert, indem man die Ableitungswerte einsetzt, die dem Punkt am nächsten liegen, d.h. $\phi'_{i+1} \rightarrow \phi'_{i,v}$ und $\phi'_{i-1} \rightarrow \phi'_{i,r}$, der Abstand dieser beträgt jetzt nur noch h statt wie vorher $2h$:

$$\phi''_i = \frac{\phi'_{i,v} - \phi'_{i,r}}{h} = \frac{\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h}}{h} = \frac{\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i}{h^2} \quad (1.9)$$

1.2 Teilaufgabe b)

Mit der Diskretisierung von ϕ lässt sich dieses auch analog zur Quantenmechanik als Vektor (Zustand) auffassen, wobei ϕ_i der i -te Eintrag des Vektors ϕ sei. Es folgt damit direkt, dass die Poissongleichung $\Delta\phi = -4\pi\rho$ mithilfe eines Operators, also einer Matrix, anstelle von Δ beschrieben werden kann. Es sei also $\hat{a} = \Delta$ und a die Matrixdarstellung zu \hat{a} . Die Poissongleichung wird dann zu:

$$\Delta\phi = \hat{a}\phi = a\phi = -4\pi\rho \quad (1.10)$$

Bzw. für die i -te Komponente:

$$\sum_{j=0}^N a_{ij}\phi_j = -4\pi\rho_i \quad (1.11)$$

Mit Gleichung 1.6 folgt dann für a zunächst für $i \in \{1, \dots, N-1\}$:

$$a_{ij} = \frac{1}{h^2} \begin{cases} 1, & \text{für } j = i \pm 1 \\ -2, & \text{für } j = i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (1.12)$$

Die Randbedingungen werden separat behandelt. Beispielsweise bietet es sich an, ρ am Rand verschwinden zu lassen. Hierzu muss der umschlossene Raum in der Regel nur groß genug gewählt werden. Damit ergibt sich

$$a_{0j} = a_{Nj} = 0 \quad (1.13)$$

Es sei b die skalierte, quadratische Untermatrix ohne Randbedingungen zu a , d.h. dass Gleichung 1.12 für alle Elemente aus $\frac{1}{h^2}b$ gültig sei:

$$b = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

Die LU -Zerlegung entsprechend der Aufgabenstellung von b lässt sich durch Ausprobieren leicht erkennen:

$$\alpha_i = -\frac{i+1}{i} \quad (1.15)$$

$$\beta_i = 1 \quad (1.16)$$

$$\gamma_i = \frac{1}{\alpha_i} \quad (1.17)$$

Gegeben eine Ladungsverteilung ρ lässt sich die Poisson-Gleichung dann lösen indem man die Inversen zu L und R bestimmt:

$$\phi = R^{-1}L^{-1}LR\phi = -4\pi R^{-1}L^{-1}\rho \quad (1.18)$$

Die Zerlegung kann die Berechnung verschnellern, da L und R jeweils Dreiecksmatrizen sind, anders als a .

1.2.1 Beispiel

Für ein vierstufiges Potential ist:

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Und a ergibt sich zu:

$$a = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt dann:

$$a\phi = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 0 \\ \phi_2 - 2\phi_1 \\ \phi_1 - 2\phi_2 \\ 0 \end{pmatrix} = -4\pi \begin{pmatrix} 0 \\ \rho_1 \\ \rho_2 \\ 0 \end{pmatrix} = -4\pi\rho$$

Wobei $\phi_2 - 2\phi_1 = \phi_0 + \phi_2 - 2\phi_1 = h^2\Delta\phi_1$ ist (analog für $\Delta\phi_2$). Die LU -Zerlegung ist dann gegeben durch:

$$L = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{5}{4} \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

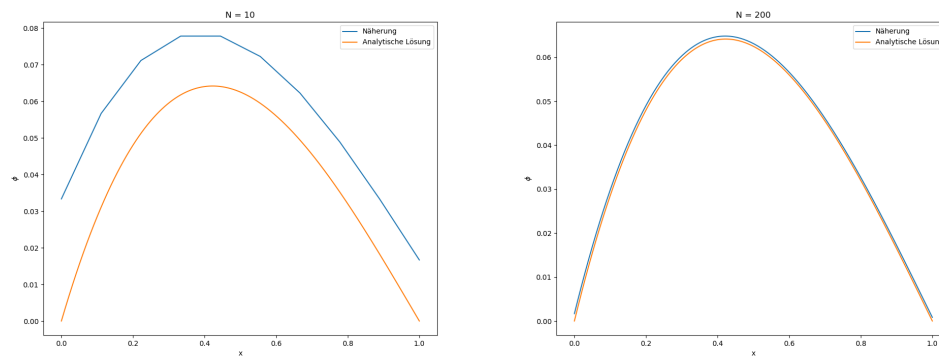
1.3 Teilaufgabe c)

Der Code, Plots und Wertelisten sind verfügbar auf https://github.com/LarsKue/Theo3/tree/master/Uebung_9.

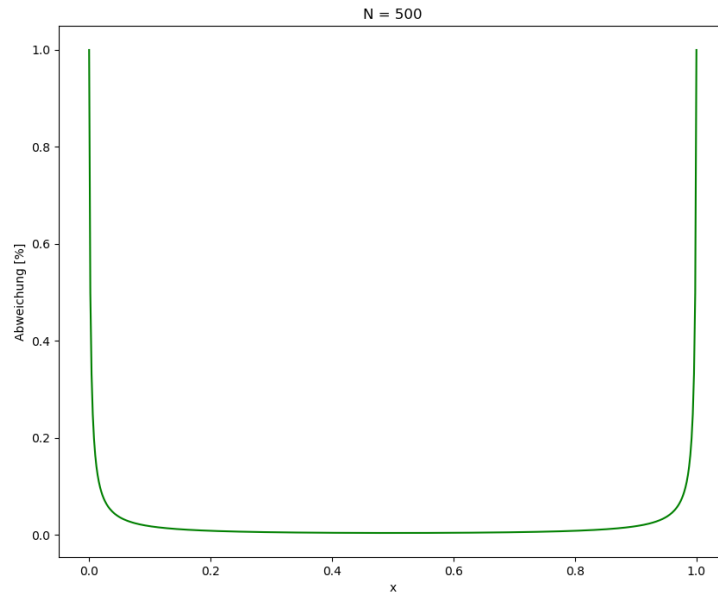
Die analytische Lösung ergibt sich durch zweifache Integration:

$$\phi = \frac{1}{6}x^3 - \frac{1}{2}x^2 + Cx + D \quad (1.19)$$

Wobei mit Randbedingungen $D = 0$ und $C = \frac{1}{2}L - \frac{1}{6}L^2$ berechnet werden kann. Hier sind einige Plots für die Berechnung bei verschiedenen N (eine vollständige Liste ist in Anhang A zu finden):



Die Abweichung hat dabei stets folgende Form:



Die Näherung ist also am Rand am ungenauesten, erreicht jedoch schnell sehr genaue Werte. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Näherung die Randbedingung $\phi = 0$ nie exakt erreichen wird, es entsteht also eine Abweichung von 100%. Es ist leicht sichtbar, dass $N = 200$ für eine gute Näherung ausreicht.

A Plots

