Computational Physics — SoSe 2022
2. Übungsblatt

Ausgabe: 14.04.2022 — Prof. H. Jelger Risselada
Abgabe: 21.04.2022 20 Uhr

Aufgabe 0: Verständnisfragen — 0 Punkte

1) Was versteht man unter symplektischen Integrationsverfahren? Welche Vorteile bieten sie?

2) Was versteht man unter Hauptwertintegralen?

Aufgabe 1: Numerische Integration — 6 Punkte

Auf dem letzten Zettel haben Sie bereits mehrere Verfahren zur numerischen Integration implementiert. In dieser Augabe sollen Sie nun zwei Integrale mit Singularitäten betrachten und diese zunächst analytisch bearbeiten und anschließend mit Hilfe einer Integrationsroutine Ihrer Wahl berechnen. Sie können dazu Codefragmente vom letzten Zettel recyclen.

1. Berechnen Sie folgendes Hauptwertintegral numerisch:

$$I_1 = \mathcal{P}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}t \frac{\mathrm{e}^t}{t} \tag{1}$$

(Kontrolle: $I_1 \simeq 2.114\,501\,8$).

2. Berechnen Sie folgendes Integral numerisch mit einem relativen Fehler $\epsilon \leq 10^{-5}$:

$$I_2 = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{t}} \tag{2}$$

(Kontrolle: $I_2 \simeq 1.772\,453\,85$). Berechnen Sie zum Vergleich das Integral auch analytisch.

Aufgabe 2: Zweikörperproblem - Drei Integratoren im Vergleich — 14 Punkte

In dieser Aufgabe sollen Sie die numerische Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen anhand des Euler-, Verlett- und Vierte-Ordnung-Runge-Kutta-Verfahrens aus der Vorlesung miteinander vergleichen.

Betrachten Sie zwei Massen m_1,m_2 mit Ortsvektoren $\vec{r}_1$, $\vec{r}_2$ und Geschwindigkeiten $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ unter Einfluss des Newtonschen Gravitationsgesetzes

$$\vec{F}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -G\frac{m_1 m_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\,, \tag{3}$$

wobei $\vec{F}$ auf die Masse m_1 und dementsprechend $-\vec{F}$ auf die Masse m_2 wirkt. Setzen Sie (durch Wahl geeigneter Einheiten) die Gravitationskonstante auf 1 und betrachten Sie nur die Bewegung in der Bahnebene. Verwenden Sie als Anfangsbedingungen $m_1 = 1$, $m_2 = 2$, $\vec{r}_1(0) = (0, 1)^T$, $\vec{r}_2(0) = (0, -0.5)^T$, $\vec{v}_1(0) = (0.8, 0)^T$, $\vec{v}_2(0) = (-0.4, 0)^T$ und integrieren Sie mindestens bis zu Zeit $T = 100$.

a) Implementieren Sie die drei genannten Integrationsverfahren. Wählen Sie für jeden Algorithmus jeweils eine gute und eine zu grobe Schrittweite und stellen Sie die zugehörigen Bahnkurven $\{(x, y)\}$ im Vergleich zueinander graphisch dar.

b) Wählen Sie für jedes Verfahren eine vertrauenswürdige Schrittweite und vergleichen Sie die resultierenden Laufzeiten miteinander.

c) Kehren Sie nach der Integration bis $T = 100$ die Zeit um (negative Schrittweite) und entwickeln Sie die Lösung zurück bis $T = 0$. Kommentieren Sie die Ergebnisse für die verschiedenen Integratoren.

d) Stellen Sie nun die Observablen

- Gesamtenergie
- Gesamtimpuls
- Schwerpunkt
- Gesamtdrehimpuls

für die verschiedenen Integratoren im Intervall $t \in [0, 100]$ graphisch dar, einschließlich einer Umkehr der Zeitrichtung. Wählen Sie eine Schrittweite, die grob genug ist, um systematische Fehler der Algorithmen aufzuzeigen.