Számítógépes fizika

Bartha Ferenc*
(http://www.jate.u-szeged.hu/~barthaf/oktatas.htm)

1. GYAKORLÓ FELADATOK

Gyakorló feladat 1 *Számítsuk ki numerikusan az*

$$I = \int_0^3 \sqrt{1+t}\ dt = \frac{14}{3} \tag{1.1}$$

integrált. [Koonin]

Előbb használjuk a Simpson-szabályt $h = 1.5$ beosztással.

Hasonlítsuk össze a Gauss-Legendre kvadratúrával kapható eredménnyel, miközben szintén csak három pontot használunk. Ehhez az integrált transzformálnunk kell a $[-1, 1]$ intervallumra majd használni az $N = 3$ esetre adott

$$\begin{array}{ll} x_1 = \sqrt{\frac{3}{5}} & \mathrm{w}_1 = 0.55555\ 55555\ 55556 \\ x_2 = 0 & \mathrm{w}_2 = 0.88888\ 88888\ 88889 \\ x_3 = -x_1 & \mathrm{w}_3 = \mathrm{w}_1 \end{array} \tag{1.2}$$

zéróhelyeket és súlyokat.

Gyakorló feladat 2 *Számítsuk ki numerikusan az*

$$I = \int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2}\ dt = \frac{\pi}{2} \tag{1.3}$$

integrált. [Koonin]

Vizsgáljuk meg, hogy a klasszikus integrálási módszerek pontossága hogyan alakul a beosztás finomításával.
Számoljuk ki Gauss-Legendre kvadratúrával is.
Figyeljük meg, hogy a Gauss-Csebisev(II) kvadratúrával:

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2}\ f(t)\ dt = \sum_{n=1}^{N} w_n f(t_n) \quad , \quad t_n = cos\left(\frac{n}{N+1}\pi\right) \quad w_n = \frac{\pi}{N+1} sin^2\left(\frac{n}{N+1}\pi\right) \tag{1.4}$$

az integrált egyetlen pontból egzaktul megkapjuk. Ebben a kvadratúra típusban az

$$U_n(cos(\vartheta)) = \frac{sin(((n+1)\vartheta)}{sin(\vartheta)} \tag{1.5}$$

másodfajú Csebisev-polinomokat használtuk $t = cos(\vartheta)$ helyettesítéssel.

Gyakorló feladat 3 *Írjuk fel az*

$$f(x) = e^{-x^2} \quad -1 \le x \le 1 \tag{1.6}$$

függvény Csebisev-sorát. Vizsgáljuk meg, hogy hány tagot kell figyelembe venni ahhoz, hogy a függvény, annak deriváltja és az integrálja előírt pontosságot elérjen.

*Electronic address: barthaf@physx.u-szeged.hu

Gyakorló feladat 4 *Írjuk fel a*

$$\frac{dy}{dt} + \frac{\alpha}{y} = 0 \tag{1.7}$$

ODE Euler-féle diszkrét változatát. Vizsgáljuk meg az eljárás stabilitását. Pár soros programmal ellenőrizzük, hogy hogy a satbilitás ténylegesen hogyan függ a választott az α paramétertől, az $y_0 = y(t = 0)$ kezdőfeltételtől és a választott $h = \delta t$ lépésköztől. [MacKinnon]

Gyakorló feladat 5 *Vizsgáljuk egy elhanyagolható tömegű rugóra erősített tömegpont függőleges síkbeli mozgását. Legyen a rugó nyugalmi hossza $L = 1$ m, a test tömege $m = 0.1$ kg, rugóállandónak három értéket is próbáljunk ki, legyen $k = \{7.0,\ 7.5,\ 100000\}$ N/m. A testet a rugó nyújtatlan vízszintes helyzetéből elengedjük. Ábrázoljuk a test pályáját, és a teljes energiát az idő függvényében. [Carleton]*

Gyakorló feladat 6 *A*

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}) \quad , \quad \rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi} e^{-r} \tag{1.8}$$

Poisson-egyenlet gömbszimmetrikus megoldásaira a

$$\frac{d^2}{dr^2}\varphi(r) = -4\pi r\rho(r) \quad , \quad \Phi(\mathbf{r}) = \frac{\varphi(r)}{r} \tag{1.9}$$

közönséges differenciálegyeletet írhatjuk fel. A

$$\varphi(0) = 0 \quad , \quad \varphi(\infty) = 1 \tag{1.10}$$

peremfeltételhez tartozó egzakt megoldás

$$\varphi(r) = 1 - \frac{1}{2}(r+2)\, e^{-r} \tag{1.11}$$

(Miért választjuk ezt a peremfeltételt?)
A Numerov-eljárással állítsuk elő a numerikus megoldást a $0 \le r \le 20$ tartományon. Integráljunk $r = 0$-tól kifelé. A eljáráshoz szükségünk a $\varphi_1 = \varphi(\delta r)$ induló értékekre amit vegyük ez egzakt megoldásból. Vizsgáljuk meg, hogy mennyire száll el a megoldás, ha elrontjuk φ_1 értékét. [Koonin]

Gyakorló feladat 7 *Az előbbi feladatot oldjuk meg pusztán a peremfeltétel használatával a lövöldözős módszerrel. Integráljunk az intervallum két végpontjából egy értelmesen választott belső pontig és ott illesszük a megoldásokat. Newton-módszerrel törekedjünk a pontos illesztésre.*

Gyakorló feladat 8 *Az előző két feladatban vázolt Poisson-egyenlettel kapcsolatos peremérték-problémát oldjuk meg diszkretizálással kapott tridiagonális egyenletrendszer előre-hátra megoldásával.*

Gyakorló feladat 9 *Egy diffúziós problémát az órán feldolgoztunk az FTCS módszerrel. Írjunk egy* ***teljesen implicit*** *programt ugyanezen feladat megoldására. A tridiagonális egyenletrendszert előre-hátra helyettesítéssel oldjuk meg. Vizsgáljuk meg a megoldás pontoságát és stabilitását különböző időlépéseknél. [Koonin]*