Übungen zur Vorlesung „Physik auf dem Computer"
Sommersemester 2018

Übungsgruppenleiter:
Robin Bardakcioglu – `rhb@itp1.uni-stuttgart.de; Do. 14:00 - 15:30 Uhr, 5.331`
Johannes Reiff – `jreiff@itp1.uni-stuttgart.de; Di. 14:00 - 15:30 Uhr, 4.141`
Matthias Feldmaier – `fem@itp1.uni-stuttgart.de; Do. 14:00 - 15:30 Uhr, 4.141`

Übungsblatt 4 Ausgabe: 02. Mai 2018

Dienstagsübung: Besprechung 15.05.18
Donnerstagsübungen: Besprechung 17.05.18
Achtung: Die Freitagsvorlesung vom 11.05.18 wird auf den 18.05.18 verlegt. Ab dem 01.06.18 findet die Freitagsvorlesung wieder regelmäßig 14-tägl. statt.

Aufgabe 10: Numerisches Differenzieren

a) Berechnen Sie die erste Ableitung $\mathrm{d}f(x)/\mathrm{d}x$ der Funktion

$$f(x) = \sin(10x)\mathrm{e}^{-x}$$

im Intervall $0 < x < 3$ mit der Schrittweite $h = 0{,}06$. Vergleichen Sie die Ergebnisse der Vorwärts-, Rückwärts- und zentralen Ableitung mit der exakten analytischen Lösung.

ToDo: Tragen Sie alle Lösungen in einem Diagramm auf.

(3 Punkt(e), Votier)

b) Berechnen Sie die zweite Ableitung $\mathrm{d}^2f(x)/\mathrm{d}x^2$ nach der Drei-Punkte-Formel aus der Vorlesung mit den gleichen Parametern wie in Aufgabenteil a). Vergleichen Sie auch hier Ihre numerische Lösung mit der exakten analytischen.

ToDo: Erstellen Sie erneut ein Diagramm.

(2 Punkt(e), Votier)

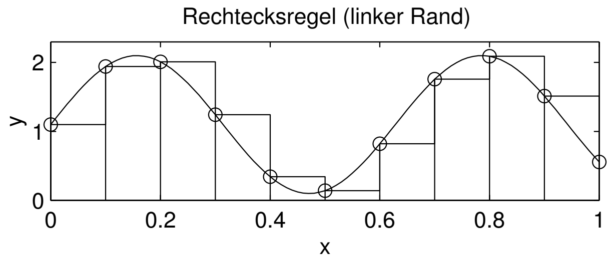
c) Überlegen Sie sich eine Vier-Punkte-Formel für die zweite Ableitung. Von welcher Ordnung ist sie? Implementieren Sie auch diese Formel.

ToDo: Tragen Sie das Ergebnis mit den identischen Parametern wie in Teil b) zusammen mit der exakten Lösung in einem Diagramm auf. Kommentieren Sie den Vergleich beider Ableitungsformeln.

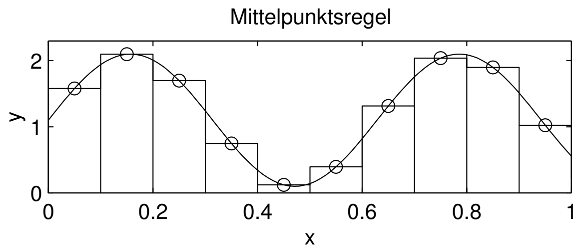
(4 Punkt(e), Votier)

Aufgabe 11: Numerisches Integrieren

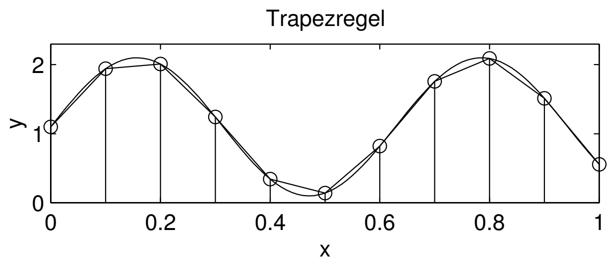
Für die numerische Integration lassen sich die folgenden diskretisierten Verfahren finden, die auch in der Vorlesung bereits angesprochen wurden.



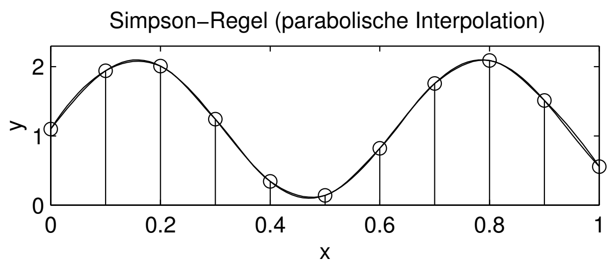
$$R(f) = \sum_{i=1}^{n} h_i f(x_i)$$



$$M(f) = \sum_{i=1}^{n} h_i f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$$



$$T(f) = \sum_{i=1}^{n} \frac{h_i}{2} \left\{ f(x_i) + f(x_{i+1}) \right\}$$



$$S(f) = \sum_{i=1}^{n} \frac{h_i}{6} \left\{ f(x_i) + 4f(x_m) + f(x_{i+1}) \right\}$$

$$x_m = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$$

a) Stellen Sie die Funktionen

$$f(x) = \frac{1}{4 - \sin(16\,\pi\,x)}\ , \quad 2 \le x \le 4\ ,$$

$$g(x) = \sin(1/x)\ , \quad 1 \le x \le 2$$

grafisch auf dem Bildschirm dar und überlegen Sie sich, wie empfindlich die einzelnen Algorithmen auf den Kurvenverlauf reagieren werden.

Für eine der Funktionen müssen Sie ausreichend Punkte in die Darstellung einbeziehen. Falls Sie z.B. `gnuplot` verwenden, können Sie das mit

```
set samples 500
```

erreichen.

b) Berechnen Sie das Integral

$$I_g = \int_1^2 \mathrm{d}x\, g(x)$$

mit Hilfe der Rechteck-, Mittelpunkts- und Trapezregel für 2^n ($1 \leq n \leq 10$) Stützstellen. Ermitteln Sie die Abweichung des berechneten Wertes von dem auf 15 Stellen genauen Wert 0,632568094108090.

ToDo: Stellen Sie für alle drei Verfahren den Integralwert über n zusammen mit dem genauen Wert in einem Diagramm dar.

(5 Punkt(e), Votier)

Falls Sie sich mit dem Konzept der Funktionenzeiger des letzten Übungsblattes ausreichend vertraut fühlen und es für diese Aufgabe anwenden möchten, können Sie dies gerne tun. Bei geschickter Herangehensweise, kann es Ihr Programm sehr vereinfachen, da Sie mehrfach dieselbe Funktion integrieren müssen.

c) Wiederholen Sie die Übung für die Funktion $f(x)$ im Intervall $2 \leq x \leq 4$. Der analytische Wert dieses Integrals beträgt $2/\sqrt{15}$.

ToDo: Tragen Sie erneut den Wert des Integrals über n zusammen mit dem genauen Wert auf.

(2 Punkt(e), Votier)

d) Was fällt Ihnen bei der Lösung auf?

ToDo: Stellen Sie Vermutungen darüber an, warum die Konvergenz im Fall der Funktion $f(x)$ deutlich schneller als im Fall von $g(x)$ ist.

(2 Punkt(e), Votier)

e) Implementieren Sie die Simpson-Regel für beide Funktionen entweder direkt oder über den Zusammenhang

$$S(f) = \frac{2}{3}M(f) + \frac{1}{3}T(f)\ .$$

f) Fertigen Sie für beide Funktionen jeweils ein sogenanntes *Work-Precision*-Diagramm an. In diesem trägt man die relative Genauigkeit

$$G = \left|\frac{I_{\text{numerisch}} - I_{\text{exakt}}}{I_{\text{exakt}}}\right|$$

(einfach-)logarithmisch über der Zahl der tatsächlichen Funktionsauswertungen, die zur Berechnung dieses Ergebnisses benötigt wurden, auf. Überlegen Sie sich dazu, wie oft die Funktion im Integralkern in den einzelnen Algorithmen aufgerufen wird.

Ziel dieser Auftragung ist, herauszufinden, welche Algorithmen beim geringsten Aufwand die notwendige Genauigkeit erzielen. Alternativ wird oft statt der Zahl der Funktionsauswertungen die Laufzeit des Programms verwendet.

ToDo: Präsentieren und Diskutieren Sie ihr Diagramm.

(3 Punkt(e), Votier)

Aufgabe 12: Gauß-Quadratur

Die Idee der Gauß-Quadratur besteht darin, die Stützstellen x_n und die Gewichte w_i für ein numerisches Integral

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} f(x_i) w_i.$$

so anzupassen, dass sie ein Polynom des Grades $2n-1$ exakt integrieren. In der Gauß-Legendre-Integration verwendet man Legendre-Polynome. Die Stellen x_i entsprechen genau den Nullstellen des Legendre-Polynoms der Ordnung n im Intervall $-1 \leq x \leq 1$.

a) Laden Sie das Programmpaket zu Aufgabe 12 aus dem Webangebot zur Vorlesung. Sie finden darin ein Programm, das das Legendre-Polynom

$$P_4 = \frac{1}{8}\left(35x^4 - 30x^2 + 3\right)$$

mit der Gauß-Legendre-Quadratur verschiedener Ordnungen im Intervall $-1 \leq x \leq 1$ integriert. Überzeugen Sie sich, dass ab $n = 3$ das exakte Ergebnis $I = 0$ herauskommt.

Machen Sie sich damit vertraut, wie das Programm die Werte x_i und w_i der zweiten Ordnung aus der Datei `GL-Tabelle.dat` ausliest und anschließend die Gauß-Legendre-Integration durchführt.

b) Eine Funktion $f(x)$ auf dem Intervall $-1 \leq x \leq 1$ lässt sich immer über eine Variablensubstitution auf das Intervall $-1 \leq x \leq 1$ zurückführen:

$$\int_a^b f(t)\,\mathrm{d}t = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b+a}{2} - \frac{b-a}{2}x\right)\mathrm{d}x$$

ToDo: Legen Sie eine neue Kopie des Programms an und schreiben Sie diese so um, dass es die Funktion $f(x)$ aus Aufgabe 11 nacheinander mit den Gauß-Legendre-Quadraturen der Ordnungen 4, 8, 12, 24 integriert. Erstellen Sie ein *Work-Precision*-Diagramm analog der vorherigen Aufgabe. Welches Integrationsverfahren (Trapez/Simpson/Gauß) liefert die höchste Genauigkeit bei gleicher Zahl der Funktionsauswertungen?

(5 Punkt(e), Votier)

c) In welchen Fällen (Funktionen oder Eigenschaften von Funktionen) halten Sie die Gauß-Quadratur für ungeeignet?

ToDo: Nennen Sie mindestens drei ungeeignete Fälle für die Gauß-Quadratur

(2 Punkt(e), Votier)