

1)

a) 'mfunktion.f90' ist ein Modul, dass die Verwendung von mathematische Funktionen ermoglicht. 'base_operations.inc' und 'dx_operations.inc' sind grundlegende Sammlungen von functions, die in das Modul 'mfunktion' eingebunden sind. 'rechnung.f90' ist das Main-Program. Für $h=0.01$ zu 0.001 nimmt der Fehler ab, da der zu h proportionale Naeherungsfehler mehr abnimmt als der antiproportionale Rundungsfehler steigt. Bei $h=0.0001$ tritt der inverse Fall auf. Folglich liegt das optimierte h vermutlich zwischen 0.001 und 0.0001 .

b) Das optimierte h ist gegeben durch $h_{opt}=\sqrt{2 \text{ em}/f''(x)}$. em ist die Maschinenungenauigkeit. Im Fall $f=x^2$ und $\text{em}=10^{-7}$ betraegt $f''(2)=2$. Es folgt ein h_{opt} von $10^{-3.5}$. Im Program rechnung wird einmal das theoretisch berechnete h_{opt_calc} mit h_{opt_bi} verglichen, welches durch das Bisektions-Verfahren bestimmt wurde. Es zeigt sich, dass der h Wert des Bisektions-Verfahren einen kleineren Fehler liefert, dennoch ist die Groeßenordnung der h -Werte gleich. Dies liegt daran, dass in der Vorlesung lediglich der Fehler fuer den Worst-Case optimiert wurde. Außerdem treten moeglicherweise zusaetzliche Rundungsfehler bei den Zwischenschritten im Modul 'mfunktion' auf. (Des Weiteren kann die Maschinengenauigkeit em abweichen)

2)

a) $\text{er}=\sqrt{N}*\text{em}+(b-a)^5*f''''/f/N^4$ ist die Formel fuer den gesamten Fehler. Es kann nach e nach N abgeleitet und gleich Null gesetzt werden und nach N umgeformt werden, um das optimale N zu bestimmen. f''''/f betraegt for $f(x)=e^x$ immer 1. Also ist $\text{der}/dN = \text{em}/\sqrt{N}/2 - (b-a)^5/N^5*4 = 0 \Rightarrow N^{4.5} = (b-a)^5/\text{em}*8$. $a=0$ $b=0.1 \Rightarrow N=4.417 \sim 5$.

b) Der exakte Wert des Integrals ist $e^{0.1}-1 = 0.105170918$. Folglich ist die Abweichung $5e-9$.

c) Die Formel fuer er ist in 2)a) gegeben. Mit $N=5$ erhaelt man $\text{er}=2.4e-7$.

d) Analog zu 2)a) mit $\text{er} = \sqrt{N}*\text{em}+(b-a)^3*f''/f/N^2$. Es ergibt sich ein $N=69.3144 \sim 70$

e) Einsetzten von $N=70$ in die Formel von 2)d) liefert $\text{er}=1.041e-6$

f) Das Simpson-Verfahren ist schneller, da weniger Stuetzpunkte verwendet werden und somit die Funktion weniger oft aufgerufen/ausgerechnet werden muss. Zusaetzlich zeigte sich bei den theoretischen Fehlerabschaetzungen, dass das Trapez-Verfahren ungenauer ist.

Die auf meinem PC erhaltenen Ausgaben sind in output.txt gespeichert.

Zum Modul 'mfunktion':

Es wird ein `type(function)` definiert, welcher `function-pointer` hat, welche auf `functions` verweisen, die ausgefuehrt werden sollen durch Operatoren `+`, `-`, `*`, `/`, `**`. (`function` meint im folgenden eine Fortran function und `funktion` eine `type(function)` objekt)

Es wird drei funktionen `d`, `x`, `dx` zur Verfuegung gestellt. Diese lassen sich durch Operatoren mit anderen funktionen oder Reals verknuepfen.

Eine Funktion kann mittels `%get(x)` and der Stelle `x` ausgewertet werden.

Eine Division durch `dx` fuehrt dazu, dass das Vorwaertsdifferenz-Verfahren auf den Zaehler angewendet wird.

Eine Multiplikation mit `dx` fuehrt dazu, dass das Simpson-Verfahren auf die funktion vor `dx` angewendet wird. `%get(x)` fuehrt nun zu einem Error wenn man einen real uebergibt, stattdessen wird eine real array uebergeben, welches zuerst die obere und dann die untere Grenze des Integrals definiert.

Die Ausfuehrungen funktionen der funktion `dx` sind in `dx_operations.inc` enthalten.

Es lassen sich beliebige functions als funktion definieren, insofern diese dem interface `func` genuegen. Dann kann mittels `create_funktion(f)` eine funktion erzeugt werden.

Fuer die jeweiligen function pointer wurden abstracte interface angelegt, die definieren wie eine solche function aussieht.

Die Parameter der Verfahren `N`, `eps`, `h` sind als Variablen des Moduls gegeben.

Da ein funktion pointer array allocated wird sollte zum Schluss die Subroutine dealloc aufgerufen werden, welche die funktionen in dem pointer array recursiv deallocated.

Um auch funktionen zu haben die nicht von x abhaengen gibt es functions die dem interface func genuegen muessen, jedoch die x Variable nicht benutzen. Dies fuehrt zur Compiler Warnung unused-dummy-argument.