Übungen zur Computerphysik
SS 2020

T. Luu, A. Nogga, M. Petschlies, A. Wirzba

Übungsblatt 2 **16. - 22. April 2020**

A.2: Grundlegende mathematische Operationen in der Numerik

Wir entwickeln unser Repertoire numerischer Verfahren: diese werden dann (in Kombination) den Schlüssel zum Lösen vielfältiger physikalischer Problemstellungen bilden. Wir beginnen mit je einem Beispiel zur numerischen Ableitung, Nullstellensuche und Integration.

1. Numerische Ableitung

   (a) Geben Sie die Berechnungsvorschrift für die symmetrische 1., 2. und 3. numerische Ableitung. Als Anwendung betrachten Sie die Ableitungen der Funktion

   $$f(x) = \log(x) \tag{1}$$

   bei $x_0 = 3$.

   (b) Welche maximale Genauigkeit erreichen Sie dabei für die Berechnung in einfacher, doppelter (*optional:* vierfacher) Genauigkeit ?

   (c) Und übrigens: Welches ist die größte Zahl ϵ mit $1 + \epsilon = 1$ in einfacher, doppelter (*optional:* vierfacher) Genauigkeit ? Bestimmen Sie den Wert analytisch und demonstrieren Sie numerisch.
   (Hinweis: einfache / doppelte / vierfache Genauigkeit mit 23 / 52 / 112 Bit Mantisse; vierfache Genauigkeit mit gcc z.B. über quadmath-Bibliothek mit Datentyp __float128)

2. Approximative Nullstellenbestimmung
   Nullstellensuche ist ein Allerweltsproblem; in vielen Formen zur Lösung nicht-linearer Gleichungen, für Optimierungsprobleme, ...
   Im Beispiel hier betrachten wir ein Extremalwertproblem.

   (a) Benutzen Sie Ihre Implementation aus 1. und das Sekanten-Verfahren zur Bestimmung der Stelle des Extremums der Funktion

   $$f(x) = \log(x)^{\frac{1}{x}} \tag{2}$$

   im Intervall [1 , 6].
   (Hinweis: *optional* Cross-check durch Auffinden des Maximums mit z.B. Bisektion)

3. Integration
   Wir wollen das Trapez-Verfahren für die numerische Integration benutzen, und zwar mit adaptiver Schrittweite.

(a) Das Ziel ist die näherungsweise Berechnung der Eulerschen Gammafunktion aus der Integraldarstellung

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty dt \exp(-t)\, t^{z-1} \tag{3}$$

für reelles, nicht-negatives z.
Implementieren Sie die Trapez-Integration. Iterieren Sie die Integration für Schrittweiten h, $h/2$, $h/4$, $\ldots$ bis zum Unterschreiten einer vorgegebenen absoluten / relativen Änderung der approximierten Integralwerte.
(Hinweis: Nutzen Sie auch die Eigenschaften der Gammafunktion aus.)

(b) Was wird im Allgemeinen der numerisch teuerste Teil dieser Berechnung sein? Versuchen Sie, diesen Posten in der Iteration zu minimieren.