Übungen zur Computerphysik
SS 2020

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

Übungsblatt 4 **30. April - 07. Mai 2020**

A.4: Ausflug in höhere Dimensionen

Als Abschlußübung zur numerischen Integration schauen wir ein Beispiel zur mehrdimensionalen Integration an. Wie jeder im Folgenden leicht feststellen wird, stößt die numerische Integration in höheren Dimensionen sehr schnell an die Grenzen der Rechnerleistung. Wir schauen hier eine einfache Variante an, aber es gilt auch im Allgemeinen "the curse of high dimensionality". Auf dieses zentrale Problem werden wir später im Rahmen der Einführung in Monte-Carlo-Methoden in der VL noch zurückkommen.

1. Numerische Integration in d Dimensionen
   Wir betrachten den Einheitswürfel $W = [0,\, 1]^d$ und Funktionen

   $$f\ :\ W \to \mathbb{R}\,.$$

   Auf dem Wüfel geben wir eine äquidistante Partitionierung vor in jeder Raumrichtung mit Schrittweite $h_i\,,\quad i = 1, \ldots, d$. Wir erhalten damit ein d-dimensionales Gitter (= grid-based integration). Wir benutzen der Einfachheit halber $h_1 = \ldots h_d = h$.

   (a) Verallgemeinern Sie das für den eindimensionalen Fall bekannte Trapez-Integrationsschema auf $d \geq 2$ Dimensionen.
   (Hinweis: Welche Punkte im Gitter bekommen welches Gewicht bei der Integrationssumme?)

   (b) Implementieren Sie das Schema.
   (Hinweis: Ordnen Sie die Gitterpunkte sogenannt "lexikographisch" an, d.h. in der Folge $(0, \ldots, 0)$, $(0, \ldots, 0, 1), \ldots, (0, \ldots, 0, 1, 0)$, $\ldots, (N, \ldots, N)$.)

   (c) Betrachten Sie als erstes Testbeispiel die Funktion

   $$f(x) = \prod_{i=1}^{d} x_i\,.$$

   Was ist der analytische Wert des Integrals über den Einheitswürfel ? Mit welcher Genauigkeit können Sie das Integral über den Einheitswürfel mit der Trapez-Methode in d Dimensionen für dieses einfache Beispiel ausrechnen ? Führen Sie die numerische Integration für $d = 1, 2, 3, 4$ durch.

   (d) Als zweites Testbeispiel betrachten Sie die Funktion

   $$f(x) = \left(\prod_{i=1}^{d} x_i\right)^{1/d}$$

   Welche Schrittweite benötigen Sie für 2,3,4 Stellen Genauigkeit (Vergleich mit exaktem Wert) in $d = 1, 2, 3, 4$?

(e) Messen Sie die Laufzeit für Ihre Integrationsroutine und stellen Sie die Messung für die Parametersets aus (d) graphisch dar.
(Hinweis: Zur Zeitmessung ("wallclock time") verwenden Sie z.B. gettimeofday (&ta, (struct timezone *)NULL); wobei ta vom Typ struct timeval ist; benötigt sys/time.h. Für die Darstellung ist es hilfreich, aus den Ergebnissen der Zeitmessung die Laufzeit in Form einer Gleitkommazahl zu ermitteln.)

Beispielcode für Zeitmessung mit gettimeofday

```
...

#include <sys/time.h>

...

  struct timeval ta, te;

  /* Zeitmarker Anfang */
  gettimeofday ( &ta, (struct timezone *)NULL );

  /* Aufruf der Integrationsroutine */
  ...

  /* Zeitmarker Ende */
  gettimeofday ( &te, (struct timezone *)NULL );

  /* Berechung der elapsed walltime, Differenz der Sekunden und Mikrosekunden */
  long int seconds =  te.tv_sec  - ta.tv_sec;
  long int useconds = te.tv_usec - ta.tv_usec;
  if ( useconds < 0 ) {
    useconds += 1000000;
    seconds--;
  }
  fprintf ( stdout, "time for Integrationsroutine = %ld sec %ld usec\n",
      seconds, useconds );

  ...
```