# Übungen zur Computerphysik
# SS 2020

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

**Übungsblatt 3** **23.- 29. April 2020**

---

## A.3: Gauß-Integration

Wir wollen das Thema Numerische Integration mit der Anwendung der Gauß-Quadratur auf eine nicht ganz so einfache Funktion abschliessen.
Der grundlegende C-Code für dieses Verfahren ist in der Vorlesung-04-2020-04-29 vorgestellt, basierend auf der GNU Scientific Library ( GSL ), und ist als Beispiel-Code verfügbar.
(Zur Erinnerung: Zum Übersetzen von Programmen mit GSL ist das Hinzufügen von #include <gsl/gsl_integration.h> im Code selbst und der Zusatz -lgsl -lblas beim Linken notwendig. Evtl. mit -I/path/to/include/dir und -L/path/to/lib/dir die Pfade zur Header-Datei und Bibliothek angeben, falls nicht in Standardverzeichnissen.)

1. Numerische Integration einer fiesen Funktion
   Das Ziel ist die numerische Bestimmung des Ausdrucks

$$I = \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\epsilon}^{1} \frac{\cos\left(\log(x)/x\right)}{x}\, dx \tag{1}$$

   Der Wert $I$ ist bis auf mehr als 10000 Stellen bekannt:

$$I = 0.3233674316777787613993700879521704466510466257254696616810364 43\ldots \tag{2}$$

   (a) Implementieren Sie die Gauß-Legendre-Integration und wenden Sie Ihr Programm auf den Fall in Gl. (1) an.

   (b) Welche Abweichung vom Wert in Gl. (2) finden Sie für $\epsilon = 0.1, 0.01, 0.001, \ldots$ ?

   (c) Begründen Sie (heuristisch an dieser Stelle), warum diese Integration problematisch ist.

2. Nochmal, aber besser
   Mit Umformung des Integrals läßt sich hier viel erreichen.

   (a) Zeigen Sie zunächst, dass

$$I = \int_{1}^{\infty} \frac{\cos\left(x \log(x)\right)}{x}\, dx \tag{3}$$

   (b) Vergewissern Sie sich, dass sich die Relation

$$x\,\log(x) = y \tag{4}$$

für $x > 1$ umkehren lässt als $x = x(y)$, und dass dann gilt

$$I = \int_0^\infty \frac{\cos(y)}{y + x(y)}\, dy\,. \tag{5}$$

(c) Das Integral kann als Reihe geschrieben werden. Zeigen Sie, dass gilt:

$$\sigma_n = \int_0^{\pi/2} \frac{\cos(z)}{z + x(z)}\, dz + \sum_{k=1}^{n} (-1)^k \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\cos(z)}{z + k\pi + x(z + k\pi)}\, dz \tag{6}$$

$$I = \lim_{n\to\infty} \sigma_n \tag{7}$$

($\{\sigma_n\}$ Folge der Partialsummen). Erläutern Sie (heuristisch), warum $I$ so einfacher zu bestimmen ist. (Hinweis: Leibniz-Reihe)

(d) Implementieren Sie die Funktion $x(y)$ mit Hilfe des Newton-Verfahrens. Zeigen Sie für die Iterationsvorschrift:

$$x_{n+1} = \frac{x_n + y}{\log(x_n) + 1} \tag{8}$$

Iterieren Sie bis auf 15 Stellen Genauigkeit und benutzen Sie für die Bestimmung des Startwertes die Funktion

$$\begin{aligned} x_0(y) = {} & 1.0125 + 0.8577\, y - 0.129013\, y^2 \\ & + 0.0208645\, y^3 - 0.00176148\, y^4 + 0.000057941\, y^5 \end{aligned} \tag{9}$$

für $0 \le y \le 10$ (z.B. Horner-Schema) und

$$x_0(y) = y/\log(y) \times [\,1 - \log(\log(y))/\,(1 + \log(y))\,]^{-1} \tag{10}$$

für $y > 10$.

(e) Implementieren Sie die numerische Berechnung der Terme in Gl. (6) mittels Gauß-Legendre-Integration und stellen Sie das Konvergenz-Verhalten mit $k$ graphisch dar.

3. *Optional:* Noch besser, mit der Magie der Konvergenzbeschleunigung
Mit dem epsilon-Algorithmus kann die Konvergenz der Reihe der Partialsummen $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ in Gl. (6) beschleunigt werden. Dazu wird das Feld $E$ konstruiert mit

$$\begin{aligned} E_{m,0} &= E_{m,1} = 0\,, \quad m = 1, \ldots, n \\ E_{m,2} &= \sigma_m\,, \quad m = 1, \ldots, n \\ E_{m,k} &= E_{m+1,k-2} + [E_{m+1,k-1} - E_{m,k-1}]^{-1} \end{aligned} \tag{11}$$

(a) Integrieren Sie die Einzelsummanden auf 15 Stellen Genauigkeit und für Partialsummen im Bereich $n = 10 \sim 30$ betrachten Sie die Einträge $E_{n-2k-2,\,2k}$ für k=1,2,...,(n+1)/2.