Computational Physics

Übungsblatt 5

Miriam Simm
miriam.simm@tu-dortmund.de

Katrin Bolsmann
katrin.bolsmann@tu-dortmund.de

Mario Alex Hollberg
mario-alex.hollberg@tu-dortmund.de

Abgabe: 29. Mai 2020

Aufgabe 1: Fouriertransformation

Ziel der Aufgabe ist die Berechnung und Implementierung der schnellen Fouriertransformation (FFT). Die Fouriertransformation ist hier definiert als

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \mathrm{e}^{ikx}\, \mathrm{d}x$$

1. Zuerst wird die diskrete Fouriertransformation (DFT) als schnelle Fouriertransformation implementiert. Verwendet werden $N = 2^m$ Diskretisierungspunkte.

   $$F_j = \sum_{l=0}^{N-1} \Omega_N^{j,l} f_l$$

   Zur Überprüng des Algrorithmus mit $m \in \{3, 4\}$ und

   $$f_l = \sqrt{(1+l)}$$

   wird die Berechnung zusätzlich direkt implementiert. Bei beiden Werten von m ergeben sich die gleichen Ergebnisse.

2. Der Ergebnisvektor $\vec{F}$ der in Teil 1 berechnet wird, muss noch verändert werden um die Ergebnisse der Fouriertransformation zu enthalten. Dazu werden die Elemente des Vektors verschoben und mit einem Phasenfaktor multipliziert

   $$F'_j = F_j \cdot \frac{\Delta x}{2\pi} \exp\left(-2\pi i x_{\text{min}} \frac{j}{L}\right)$$

   Die Implementierung wird nun mit der Funktion

   $$f(x) = \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}$$

   auf dem Intervall $x \in [-10, 10]$ mit $m = 7$ getestet. Zum Vergleich wird zudem die analytische Lösung berechnet

   $$\begin{aligned}
   \mathcal{F}[f](k) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}} \mathrm{e}^{-ikx}\, \mathrm{d}x \\
   &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2} - ikx}\, \mathrm{d}x \\
   &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x^2 + 2ik - k^2) - \frac{k^2}{2}}\, \mathrm{d}x \\
   &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x+ik)^2 - \frac{k^2}{2}}\, \mathrm{d}x \\
   &= \frac{\mathrm{e}^{-\frac{k^2}{2}}}{\sqrt{2\ \pi}},
   \end{aligned}$$

wozu im letzten Schritt das Gauß-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-a(x+b)^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

verwendet wurde. Zum besseren Vergleich sind die Ergebnisse außerdem in Abbildung 1 dargestellt. Man sieht deutlich, dass es sich bei der Fouriertransformierten der Gaußfunktion wieder um eine Gaußfunktion handelt, wie auch die analytische Lösung zeigt.

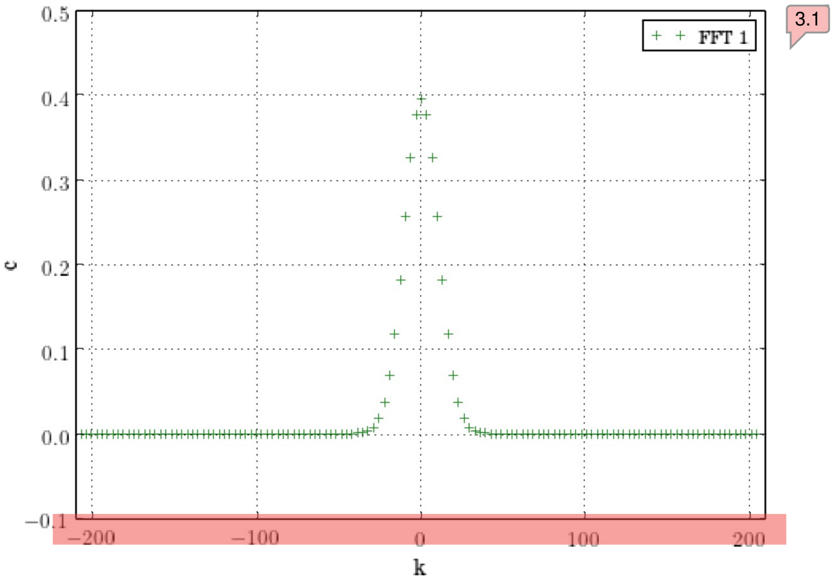

Abbildung 1: Fouriertransformierte der Gaußfunktion.

3. Die Implementierung wird nun zusätzlich mit der Rechteckschwingung verglichen

$$f(x) = \begin{cases} -1, & x \in [-\pi, 0] \\ 1, & x \in (0, \pi) \end{cases}$$

die 2π-periodisch ist. Die schelle Fouriertransformation wird nun verwendet, umd die komplexen Fourierkoeffizienten c_k von $f(x)$ zu berechnen. In Abbildung 2 ist der Absolutbetrag der Koeffizienten grafisch dargestellt.

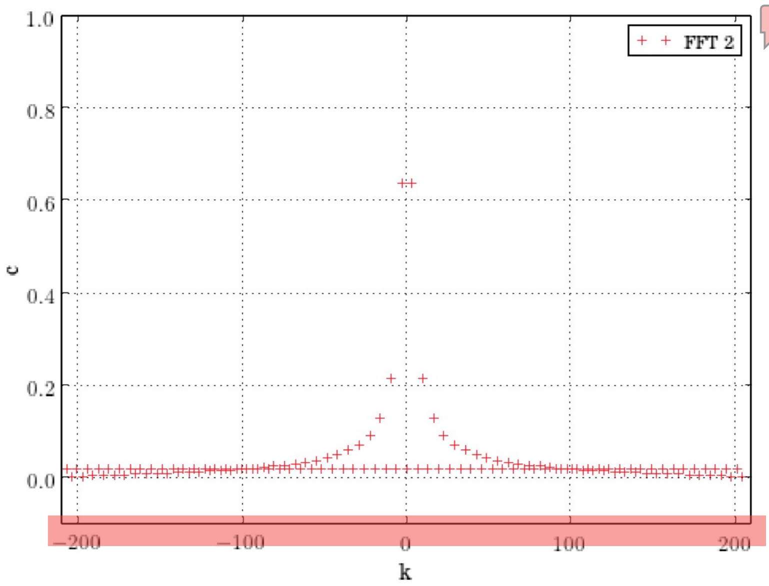

Abbildung 2: Komplexe Fourierkoeffizienten der Rechteckschwingung, berechnet mit schneller Fouriertransformation.

Zum Vergleich der Ergebnisse wird außerdem die analytische Berechung durchgeführt

$$\begin{aligned}
c_k &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\,\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{0} -1\,\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x + \frac{1}{2\pi}\int_{0}^{\pi} 1\,\mathrm{e}^{-ikx}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{2\pi}\left[\frac{1}{ik}\mathrm{e}^{-ikx}\right]_{-\pi}^{0} + \frac{1}{2\pi}\left[-\frac{1}{ik}\mathrm{e}^{-ikx}\right]_{0}^{-\pi} \\
&= \frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{ik} - \frac{1}{ik}\mathrm{e}^{-ik\pi} - \frac{1}{ik}\mathrm{e}^{ik\pi} + \frac{1}{ik}\right) \\
&= \frac{i}{\pi k}\left(\cos(k\pi) - 1\right) \\
&= \begin{cases} -\frac{2i}{\pi k}, & k\,\text{ungerade} \\ 0, & k\,\text{gerade} \end{cases}
\end{aligned}$$

In Abbildung 3 ist der Verlauf der analytisch berechneten Kurve dargestellt. Auch hier zeigt sich, dass die Implementierung im Rahmen einer gewissen Ungenauigkeit korrekte Ergebnisse erzeugt, da beide Kurven den gleichen Verlauf haben.

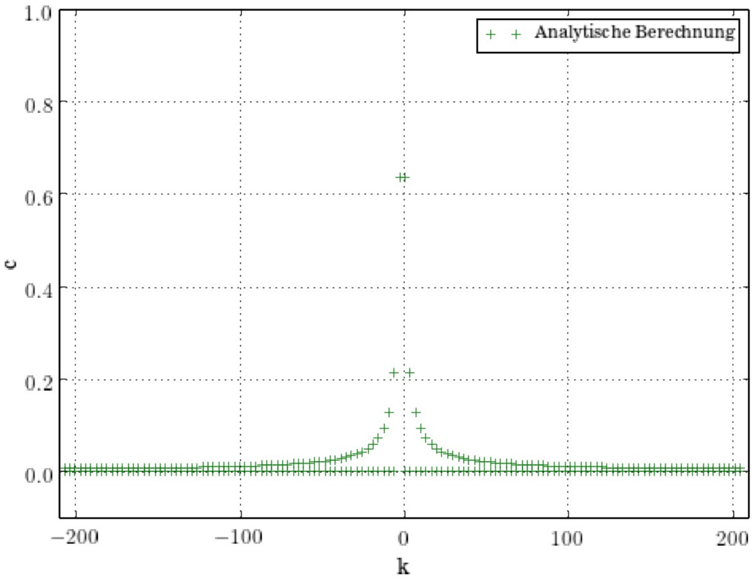

Abbildung 3: Analytisch berechnete komplexe Fourierkoeffizienten der Rechteckschwingung.

Aufgabe 2: Eindimensionale Minimierungsverfahren

Mittels zweier unterschiedlicher Verfahren sollen das Minima der Funktion

$$f(x) = x^2 - 2$$

gefunden werden. Die dabei benötigten Iterationsschritte werden in Tabelle 1 wiedergeben.

Verfahren	Intervallhalbierung	Newton
Iterationsschritte	61	2

Tabelle 1: Die Genauigkeitsschranke liegt bei $x_\mathrm{c} = 10^{-9}$.

Es wird deutlich, dass das Newton-Verfahren wenseltich weniger Iterationsschritte benötigt als das Intervallhalbierungs-Verfahren. Somit ist dies (für den Startwert von $x_0 = 1$) das effizientere Verfahren.

Index der Kommentare

2.1 Die Ergebnisse könnten ihr hier auch tabellarisch aufführen/plotten.

3.1 Die Skalierung der k-Achse ist nicht korrekt. Außerdem wäre es für einen analytischen Vergleich sinnvoll, beide Datensätze in einem Plot darzustellen.

4.1 - k-Skalierung passt wieder nicht
- Bei solchen Sprüngen kann es sich lohnen, die Punkte zu verbinden
- Ich würde wieder analytisches und numerisches Ergebnis in einen Plot packen

4.2 Eigentlich verwenden wir hier die Definition der FT mit einem Pluszeichen im Exponenten, wodurch sich das Vorzeichen aller Terme mit einem k umdreht