



Übungen zur Vorlesung Computergestütztes Wissenschaftliches Rechnen

Blatt 3

Lernziele dieses Übungsblattes

- Numerische näherungsweise Berechnung einer Ableitung.
- Nulltsellensuche und Eigenschaften der verschiedenen Verfahren.

Aufgabe 1 *Source-Code Formatierung und Editoren*

- (a) Benutzen Sie einen Internet-Suchdienst Ihrer Wahl und suchen Sie nach Webseiten, die sich mit Code-Einrückung befassen (C/C++ indentation guidelines). Nutzen Sie das terminalbasierte Programm `indent` auf ihrem Rechner, um ein C-Programm der vergangenen Woche umzuformatieren. Erkennen Sie die Unterschiede?
- (b) Probieren Sie verschiedene Texteditoren aus, die auf den Rechnern des CIPs verfügbar sind. Prüfen Sie, inwiefern diese ihnen bei Befehlen, Einrückungen und Syntax behilflich sein können. Manche übernehmen auch das Kompilieren von Programmen per Tastendruck.

Beispiele:

Editoren mit grafischer Oberfläche: `atom`, `geany`, `gedit`, `Kate`

Kommandozeileneditoren: `emacs`, `pico`, `vim`

Entwicklungsumgebungen: `Eclipse`, `QT-Creator`

Fragen Sie auch ihre Tutoren oder Sitznachbarn nach deren Editor-Vorlieben. Versuchen Sie den Editor zu finden, mit dem Sie persönlich schnell und effektiv arbeiten können.

Aufgabe 2 *Numerische Differentiation*

Gegeben sind zwei Funktionen

$$f(x) = \tanh(5x) - \frac{5e^{-x^2+6x-9}}{4} \quad (1)$$

und

$$f(x) = \begin{pmatrix} x < 1 : & x \\ x \geq 1 : & x^3 - 4x^2 + 4 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

- a) Berechnen Sie die erste Ableitung der zwei Funktionen analytisch.
- b) Schreiben Sie ein Programm, das die numerische Ableitung $f'_{\text{numerisch}}$ der zwei Funktionen mittels Vorwärtsdifferenzen, Rückwärtsdifferenzen und Stirlingformel im Intervall $x = [-10, 10]$ bestimmt. Nutzen Sie dafür verschiedene Werte von Δx : $[1.0, 0.1, 0.01, 0.001]$.

- c) Stellen Sie die Ableitungen zusammen mit den analytisch bestimmten Funktionen mittels gnuplot dar.
- d) Berechnen Sie die mittlere quadratische Abweichung von der analytisch berechneten Lösung als Funktion der Differenzen-Methode und des Δx . Dazu summieren Sie die quadrierten Abweichungen auf und normieren mit der Anzahl N der Beiträge

$$\text{MSD} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N (f'_{\text{numerisch}}(x_n) - f'_{\text{analytisch}}(x_n))^2. \quad (3)$$

Aufgabe 3 Nullstellensuche

In dieser Aufgabe geht es um die Bestimmung von Nullstellen.

- a) Schreiben Sie ein Programm, dass im Intervall $x = [-10, 10]$ zählt, wie viele Nullstellen es gibt und die Bereiche der beiden Funktionen (1) und (2) aus Aufgabe 1) ausgibt, die Nullstellen enthalten.
- b) Wählen Sie eine der in der Vorlesung vorgestellten Methoden (Newton-Raphson, das Sekanten-Verfahren, Bisektion, Regula Falsi) und erweitern Sie das Programm, um die Position der Nullstellen so exakt wie möglich zu bestimmen.
- c) Stellen Sie die Ergebnisse mittels gnuplot dar.

Selbsttest

- Welche Formeln gibt es zur numerischen Berechnung der 1. und 2. Ableitung?
- Was ist Ihrer Meinung nach das beste Verfahren zur Nullstellensuche?