Computerphysik WS 2013/2014

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 2: Ableitung und Nullstellenberechnung

Klaus Rinne

31. Oktober 2013

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 3.11., 24:00 Uhr.**

Aufgabe 2.1: Auslöschung (2 Punkte)

Erkläre in eigenen Worten welche numerischen Probleme bei der Berechnung der Funktion

$$f(x) = 1 - \sin^2(x), \tag{1}$$

auftreten können. Für welche x-Werte sind die Fehler am größten? Durch welche trigonometrische Funktion sollte die Funktion f ersetzt werden? (Bei dieser Aufgabe ist kein Programm zu schreiben.)

Aufgabe 2.2: Differenzenquotient (6 Punkte)

Numerisch lässt sich die Ableitung einer Funktion $f(x)$ über den Differenzenquotienten nähern:

$$f'(x_n) \approx \frac{f(x_{n+1}) - f(x_{n-1})}{x_{n+1} - x_{n-1}} = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{x_{n+1} - x_{n-1}} \tag{2}$$

Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung der ersten Ableitung welches für zwei gegebene Arrays $\{x_0, x_1, ..., x_N, x_{N+1}\}$ und $\{y_0, y_1, ..., y_N, y_{N+1}\}$ die erste Ableitung an den Stellen $\{x_1, x_2, ..., x_{N-1}, x_N\}$ ausgibt.

Schätzen Sie ab bis zu welchem Gitterabstand $\Delta x = x_{n+1} - x_n$ bei der Berechnung der ersten Ableitung von $f(x) = \cos(x)$ der absolute Fehler kleiner als 0.01 ist. Wählen Sie für $\Delta x = 2\pi/2^k$ das geeignete k.

Verwenden Sie Ihr Programm um die erste und zweite Ableitung von $f(x) = \cos(x)$ auf dem Intervall $[-\pi, \pi]$ zu berechnen und plotten Sie Ihre Ergebnisse sowie $f(x)$ und $-f(x)$. Vergessen Sie bei Ihrer Grafik die Legende nicht.

Aufgabe 2.3: Nullstellenberechnung (12 Punkte)

- 2.3.1 (6 Punkte): Programmieren Sie folgende Algorithmen zur Berechnung von Nullstellen einer Funktion $f(x) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$:

  Bisektionsverfahren, Fixpunktverfahren, Newtonverfahren

  Für die Berechnung der Ableitung einer Funktion können Sie scipy.misc.derivative() verwenden.

- 2.3.2 (4 Punkte): Finden Sie mit den drei Verfahren die Nullstelle folgender Funktionen im Intervall $[-1; 1]$ mit der Genauigkeit Δ:

$$f(x) = \cos(x)^2 - x + 0.2 \tag{3}$$

$$g(x) = x^2 - x - 0.2 \tag{4}$$

  Verwenden Sie als Startwert für Fixpunkt- und Newtonverfahren $x_0 = 0$ und für die Bisektion die Intervallgrenzen.

  Wieviele Interationsschritte n benötigen Sie um Genauigkeiten $\Delta = [2^{-1}, 2^{-2}, ..., 2^{-20}]$ zu erreichen?

  Plotten Sie $n(\Delta)$ für alle Verfahren in je einem doppellogarithmischen Graphen für $f(x)$ und $g(x)$.

- 2.3.3 (2 Punkte): Erklären Sie warum sich das Fixpunktverfahren für $g(x)$ deutlich besser verhält als für $f(x)$.