Computerphysik WS 2013/2014

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 7: Numerische Differantiation und Integration

Alexander Schlaich, Matej Kanduč
6. Dezember 2013

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 08.12., 24:00 Uhr.**

Aufgabe 7.1 Numerische Differentiation (8 Punkte)

Bei der numerischen Differentiation wird die Ableitung einer Funktion als Grenzwert eines Differenzenquotienten bestimmt, z.B.

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \sim \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h) \equiv D_1 f(x_0, h) + \mathcal{O}(h) \tag{1}$$

für kleine h. Eine bessere Differenzenformel für die erste Ableitung kann aus der Differenz der Taylorentwicklungen

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + h f'(x_0) + \frac{1}{2} h^2 f''(x_0) + \frac{1}{6} h^3 f'''(x_0) + \mathcal{O}(h^4) \tag{2}$$

und

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - h f'(x_0) + \frac{1}{2} h^2 f''(x_0) - \frac{1}{6} h^3 f'''(x_0) + \mathcal{O}(h^4) \tag{3}$$

erhalten werden:

$$Df(x_0, h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \tag{4}$$

- 7.1.1 (1 Punkt): Leiten Sie aus der Differenz der ersten Ableitungen mit der Differenzenformel (4) eine Differenzenformel für die 2. Ableitung her.
- 7.1.2 (1 Punkt): Implementieren Sie die numerische erste Ableitung unter Benutzung der Differenzenformeln (1) und (4).
- 7.1.3 (2 Punkte): Berechnen Sie mit beiden Implementierungen die Ableitung der Funktion

  $$f(x) = \frac{1}{2 + \cos(x)}.$$

  Stellen Sie dazu die Ableitungen für beide Verfahren für $x = [0, 2\pi]$ und $h = 2^{-i}$ mit $i = 0, 1, 2, \ldots, 5$ in einem Plot dar. Plotten Sie ebenfalls die analytische Ableitung.
  Hinweis: Achten Sie auf ussagekräftige Graphen und die Beschriftung der Achsen und Kurven.

Man kann die Fehlerordnung der Ableitungen durch ein iteratives Verfahren gemäß folgendem Algorithmus verbessern (h–Extrapolation):

$$D_{i0} = Df(\frac{h}{2^i}) \qquad \text{für } i = 0, 1, \ldots, n \tag{5}$$

$$D_{ik} = D_{i+1,k-1} + \frac{D_{i+1,k-1} - D_{i,k-1}}{2^k - 1} \qquad \text{für } k = k_0, \ldots, n \text{ und } i = 0, 1, \ldots, n-k, \tag{6}$$

wobei $k_0 = 1$ für Verfahren mit linearer Fehlerordnung und $k_0 = 2$ für die Simpsonregel gilt. Dann ist durch D_{0n} eine Ableitung der Fehlerordnung $n + 1$ gegeben.

- 7.1.4 (2 Punkte): Implementieren Sie dieses Verfahren für die Fehlerordnung $n + 1$ für die Vorwärts-Differenzenformel (1) und plotten Sie die Ableitung im Intervall $[0, 2\pi]$ für $n = 1, \ldots, 6$. Vergleichen Sie auch hier mit dem analytischen Ergebnis.
- 7.1.5 (2 Punkte): Berechnen Sie für alle Verfahren die summierte absolute Abweichung von der analytischen Lösung im betrachteten Intervall:

  $$\sum_x |Df(x,h) - f'(x)| \tag{7}$$

  Vergleichen Sie in einem semi-logarithmischen Plot die Abweichungen für $h = 2^{-k}$ mit $k = 0, \ldots, 10$ und vergleichen Sie das Resultat mit Ihren Erwartungen.

Aufgabe 7.2 Numerische Integration (12 Punkte)

Zur numerischen Integration gibt es mehrere Verfahren. Beispielsweise kann für lineare Fehlerordnung die Rechteckregel oder die Trapezregel verwendet werden. Die summierte Simpsonregel für mehrere Stützstellen im Intervall $[a, b]$ folgt als

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big]. \tag{8}$$

- 7.2.1 (1 Punkt:) Zeigen Sie dass die summierte Simpsonregel aus der Simpsonregel für ein Intervall $[a, b]$ wie in der Vorlesung gezeigt folgt.
- 7.2.2 (4 Punkte): Implementieren Sie die folgenden Verfahren zur numerischen Integration: Rechteckregel, Trapezregel, Simpsonregel. Bestimmen Sie mit diesen Verfahren das Integral

  $$I = \int_0^{x_0} \frac{1}{2 + \cos(x)}\mathrm{d}x = \begin{cases} \frac{\pi}{3\sqrt{3}} & \text{für} \quad x_0 = \frac{\pi}{2}, \\ \frac{\pi}{\sqrt{3}} & \text{für} \quad x_0 = \pi \end{cases} \tag{9}$$

  für $n = 20$ Intervalle (für die Simpsonregel muss eine gerade Anzahl an Intervallen verwendet werden).

Man kann auch die Integration iterativ durch h–Extrapolation verbessern (Romberg-Folgen),

$$I_{i,k} = I_{i,k-1} + \frac{I_{i,k-1} - I_{i-1,k-1}}{4^k - 1} \tag{10}$$

Dabei gibt i die Anzahl der Halbierungen des Intervalls $[a, b]$ an und k steht für die Iterationsordnung. Verwenden Sie in diesem Aufgabenteil $h = x_0/4 \cdot 2^{-i}$ und die Trapezregel für $I_{i,0}$ am Beginn der iterativen Verbesserung. Haben Sie eine Idee warum Gleichung (6) und (10) unterschiedlich sind? Wie auch schon beim Differenzieren ergibt sich ein Dreiecksschema:

$$
\begin{array}{ccccccccc}
I_{0,0} & & & & & & & & \\
 & \searrow & & & & & & & \\
I_{1,0} & \rightarrow & I_{1,1} & & & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & & & & \\
I_{2,0} & \rightarrow & I_{2,1} & \rightarrow & I_{2,2} & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & & & \\
I_{3,0} & \rightarrow & I_{3,1} & \rightarrow & I_{3,2} & \rightarrow & I_{3,3} & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\
I_{4,0} & \rightarrow & I_{4,1} & \rightarrow & I_{4,2} & \rightarrow & I_{4,3} & \rightarrow & I_{4,4}
\end{array}
$$

- 7.2.3 (2,5 Punkte): Implementieren Sie das Romberg-Schema. Erstellen Sie einen semi-logarithmischen Plot, in welchem Sie die Abweichung der Werte des Integrals für $x_0 = \pi/2$ entlang der Spalte $I_{i,1}$ und der Diagonalen $I_{i,i}$ sowie der Ergebnisse der Simpsonregel von der exakten Lösung $\pi/3\sqrt{3}$ vergleichen.

Bei der Gaußquadratur n-ter Ordnung werden die Stützstellen x_i und Gewichte a_i so gewählt, dass die Fehlerordung der Quadraturformeln

$$Qf = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i) \tag{11}$$

möglichst hoch ist. Um die optimalen x_i und a_i zu finden, muss dabei im allgemeinen ein nichtlineares Gleichungssystem für $2n$ Unbekannte gelöst werden. Man kann jedoch zeigen, dass die n Stützstellen für das Einheitsintegral $\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x$ durch die Nullstellen des Legendre-Polynomes n-ten Grades

$$p_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(x^2-1\right)^n \tag{12}$$

gegeben sind. Um das Integral auf einem beliebigen Intervall $[a, b]$ auszuwerten, wählt man üblicherweise eine Transformationsfunktion

$$x(u) = \frac{b-a}{2}u + \frac{b+a}{2}, \qquad x(-1) = a \quad \text{und} \quad x(1) = b \tag{13}$$

so dass die Auswertung direkt erfolgen kann:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(x(u)\right)\,\mathrm{d}u \tag{14}$$

- 7.2.4(2 Punkte): Implementieren Sie eine Gaußquadratur. Verwenden Sie dabei zur Berechnung der Nullstellen die Methode `scipy.special.orthogonal.p_roots(n)`. Konsultieren Sie die Dokumentaion um nachzuvollziehen wie dabei die Nullstellen der Legendre-Polynome und die entsprechenden Gewichte berechnet werden. Wie beurteilen Sie die Effizienz der Gaußquadratur?
- 7.2.5 (2,5 Punkte): Berechnen Sie für die Trapezregel, die Simpsonregel, die h–Extrapolation und die Gaußquadratur den Fehler $E = |I - I_0|$ mit $I_0 = \{\pi/3\sqrt{3}, \pi/\sqrt{3}\}$ für $x_0 = \{\pi/2, \pi\}$. Verwenden Sie dabei $N = 2l, l = 1, \ldots, 20$ Teilintervalle und plotten Sie ihr Resultat jeweils semi-logarithmisch in Abhängigkeit von N. Wie erklären Sie Ihre Beobachtungen?