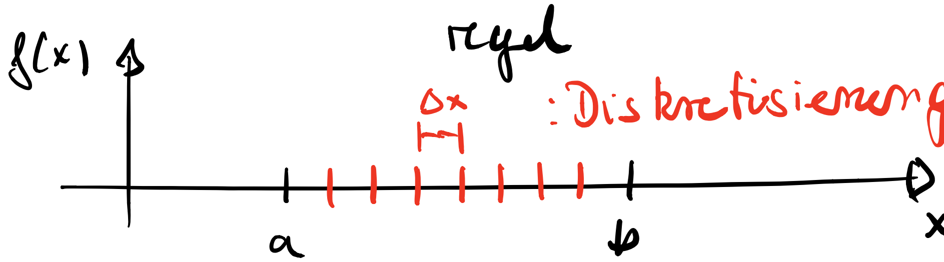
VL 2

Start Recording! ✓

Fragen?

Recap: Numerische Analysis

- Integration: Riemann, Trapez, Simpson-regel



: Diskretisierung

$I \sim R_f(\Delta x)$

Δx_n

Was erzeugen die Programme zur Berechnung von Integralen?

-> Folgen M_i; T_i; S_i!

$n \to a_n$

$n \to \Delta x_n \to R_f(\Delta x_n)$

-> Konvergenz von Folgen! $|R_f(\Delta x_n) - I| = ?$

Bemerkungen:

- Es gibt Fehlerabschätzungen (= obere Schranke)

z.B.

Simpson: $\underbrace{\Delta S_{a,b}}_{=|S_{a,b}-I|} \leq const \, \frac{(b-a)^5}{180 N^4}$; N: Anzahl Intervalle

$$const = \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

$\Rightarrow$ so kann N gewählt werden!

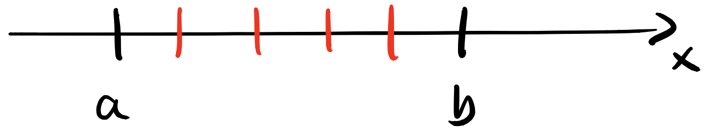
(Herleitung siehe Literatur)

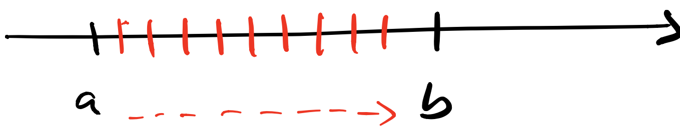
- Variationen: angepasste Intervallbreite

$\Delta x_i \neq \Delta x_j \rightarrow$ i-te Unter-intervall

"Black box"

$$\Delta x_n = \frac{b-a}{N_n}$$





	i
$N_n = 5$	1
$N_n = 10$	2

i durchzählen $\Rightarrow R_f(\Delta x_n)$

Beachte: $[x_i, x_{i+1}] \to S_i ; M_i ; T_i$

$$\sum_i S_i = S(\Delta x)$$

Themen heute:

- Numerische Differentiation
- Numerische Genauigkeit (Kap. 2)
- Nullstellensuche.

1.2) Differentiation

Ziel: Ersetze $f'(x);\ f''(x), \ldots$

durch geeignete Differenzen

+ Fehlerabschätzung

Ausgangspunkt: Taylorreihe um $x = x_0$:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x-x_0)^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)(x-x_0)^3 + \ldots$$

Taylorpolynom links u. rechts von x_0:

$$x = x_0 \pm \delta \quad ; \quad \delta = x - x_0 \ ; \ \delta > 0$$

$$f(x_0+\delta) = f(x_0) + f'(x_0)\,\delta + \frac{1}{2!} f''(x_0)\,\delta^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \ldots$$

$$f(x_0-\delta) = f(x_0) - f'(x_0)\,\delta + \frac{1}{2!} f''(x_0)\,\delta^2 - \frac{1}{3!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \ldots$$

$\rightarrow$ alternierendes VZ in $f(x_0 - \delta)$

Vorwärts-/Rückwärtsdifferenzen

$$f(x_0 \pm \delta) - f(x_0) = \pm f'(x_0)\,\delta + \mathcal{O}(\delta^2)$$

$$\Rightarrow f'(x_0) \approx \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{f(x_0+\delta) - f(x_0)}{\delta} \\[2ex] \dfrac{f(x_0) - f(x_0-\delta)}{\delta} \end{array} \right] + \boxed{\mathcal{O}(\delta)}$$

$\Rightarrow$ Korrektur $\propto \mathcal{O}(\delta)$

Bessere Ausdrücke?

Betrachte:

$$f(x_0+\delta) - f(x_0-\delta) = 2f'(x_0)\cdot\delta + \frac{2}{3!} f'''(x_0)\,\delta^3 + \dots$$

$$\boxed{\Rightarrow f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+\delta) - f(x_0-\delta)}{2\delta} + \boxed{\mathcal{O}(\delta^2)}}$$

→ um eine Ordnung besser als Vorwärts-/ Rückwärts differenz

1. Ableitungen in der Physik:

- Geschwindigkeit $\vec{v} = \dot{\vec{r}}$
- zeitabh. Schrödinger

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

- Wärmeleitungsglg.
- Extremalbestimmung (→ Stat. Physik)
- Generalisierte Koordinaten

  ⇝ 1. Abl. in BWG2.

- Reibung $|\vec{F}| \propto \dot{v}$
- konservative Kräfte $\vec{F} = -\nabla V$

- Radioaktiver Zerfall: DGL 1. Ordnung

Physik: Grundgleichungen DGL 2. Ordnung:

- Newton II
- SG (Schrödingergleichung) der Wellenmechanik (zeitunabhängig)
- Wellengleichungen $\Delta - \frac{1}{c^2}\partial_t^2$

Betrachte:

$$f(x_0+\delta) + f(x_0-\delta) = 2f(x_0) + \boxed{f''(x_0)}\cdot\delta^2 + \frac{2}{4!}f^{(IV)}(x_0)\,\delta^4 + \dots$$

$$\Rightarrow \boxed{f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+\delta)+f(x_0-\delta)-2f(x_0)}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^2)}$$

Bem: Genauere Ausdrücke möglich!

höhere Abl: → Literatur

Pause: 9:05 am

Start Recording

Einschub:

2) Numerische Genauigkeit

Fehlerquellen

- systematische Fehler eines Algorithmus

  etwa Trapezregel

  $$I - T \propto (\Delta x)^2$$

  ⇝ Physik

- Spezialfall: statistische Fehler

  (Monte Carlo) = Würfeln auf dem Computer
  Zufallszahlen

- Numerische Fehler aufgrund endlicher Genauigkeit (machine precision)

2.1) Ganze Zahlen

C: Datentyp integer : int zähler;

Darstellung von Integer:

Binärsystem
- 10^n: Dezimal.
- 2^n

$$4 = 2^2 \;\hat{=}\; \begin{array}{ccccc} 2^4 & 2^3 & 2^2 & 2^1 & 2^0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

bit = 0,1

$$7 \hat{=} 4+2+1 = 2^2+2^1+2^0$$

$$\hat{=} \quad \ldots 000111$$

C: 32 bits; (incl. Vz)

$\Rightarrow \boxed{-2\cdot 10^9 \leq \text{int} \leq 2\cdot 10^9}$

Es gibt eine obere u. untere Schranke!

Größere Zahlen: bedeutungslos!

Vorsicht mit großen Zahlen!

$\sim \exp(a\, i)$

64 bit möglich → Speicherbedarf relevant.

(long int

→ nachschauen)

2.2) Gleitkommazahlen

C: float

Double ←

→ definiert durch Anzahl signifikanter Stellen!

C: Standard: mindestens

- float: 10^{-6}
- double: 10^{-10}

1022347,111111

Darstellung von Gleitkommazahl g:

$$\boxed{g = \pm a \cdot 10^{b}} \; ; \quad a, b \in \mathbb{Z}$$

VZ

Float: 32 bits

- 1 bit: VZ
- 23 bits : a
- 8 : b

$\Rightarrow a \leq 2^{23} \sim 10^{7} \qquad a = 0, 1, 2, \ldots$

→ Anzahl signifikanter Stellen

$b \leq 2^{8} = 254$ Werte

$2^{-126}, \ldots, 2^{0}, \ldots, 2^{127}$

$\approx \downarrow \qquad \downarrow \approx$

$10^{-38}, \ldots, 10^{38}$

→ Gleitkommazahlen haben wieder ein $|g|_{max}$

$-|g|_{max} \leq g \leq |g|_{max}$

→ $\boxed{\text{0 ist nicht exakt dargestellt !}}$

float: $\sim 10^{-6}$

$0,\underline{000000}\,0123470s \quad 0,1 \cdot 10^{-7}$

$= 0,00000000001777958$

$0,1234567\ 1\ 1\ 1$ → Differenz zwischen Zahlen

$0,1234567\ 2\ 2\ 2$

Double: 64 bits

a: 52

b: 11 ⇒ Wertebereiche

UE

Vz: 1

2.3) Praktische Relevanz

- Fehler pflanzen sich fort!

- Differenz zweier großer Zahlen

$$z = 10^{14}(y-x)$$

$$x = 1$$
$$y = (1+\sqrt{2}) \cdot 10^{-14}$$

-> Exakt:

$$z = \sqrt{2} = 1{,}414214\ldots$$

Numerisch:

$$z = 1.421085\ldots$$

- Überschreiten des Wertebereichs:

Beisp.: Mittelwerte

$$\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_i x_i \; ; \quad N = \text{Anzahl}$$

Besser:

$$\langle x \rangle = \sum_i \underbrace{\frac{x_i}{N}}_{\sim \mathcal{O}(1)}$$

- <u>Gleichheit zweier float/double</u>:

double a,b;

<u>if (a == b)</u> Nie!

$$\text{Wenn } |a-b| < \underbrace{1e-8}_{\text{gewählte Schranke}}$$

→ definiert numerische 0

⇝ <u>a = b numerisch</u>

- Beachte: Numerische 0 oft durch systematische Fehler limitiert
  (→ erreichte Genauigkeit der Methode ist schlechter als Maschinengenauigkeit)

- Division durch Null!

Unterscheide echte Null (integer)
→ NaN (not-a-number)
→ numerische Null (Gleitkommazahlen)