Computational Physics SoSe 2022
1. Übungsblatt

Ausgabe: 07.04.2022 Prof. H. Jelger Risselada
Abgabe: 14.04.2022 20 Uhr

Aufgabe 0: Verständnisfragen 0 Punkte

1) Welches der in Aufgabe 2) und 3) genannten Integrationsverfahren hat die höchste Genauigkeit? Welches ist am besten?

2) Welchen Grad darf ein Polynom maximal haben, um mit der Simpsonregel exakt integrierbar zu sein?

Aufgabe 1: Numerische Differentiation 8 Punkte

In der numerischen Physik müssen regelmäßig Ableitungen von Funktionen berechnet werden und präzise Differentiationsverfahren sollten sich im Repertoire eines jeden modernen Physikers befinden. In dieser Aufgabe sollen einfache Ableitungsverfahren noch einmal vertieft sowie ein Bewusstsein für die dabei entstehenden numerischen Fehler geschaffen werden.

Bestimmen Sie analytisch und numerisch die Ableitungen der Funktionen

$$f_1(x) = \sin(x) \tag{1}$$

$$f_2(x) = \begin{cases} 2 \cdot \left\lfloor \frac{x}{\pi} \right\rfloor - \cos\left(x \bmod \pi\right)) + 1 & \text{für} \quad x \geq 0 \\ 2 \cdot \left\lfloor \frac{x}{\pi} \right\rfloor + \cos\left(x \bmod \pi\right)) + 1 & \text{für} \quad x < 0 \end{cases} . \tag{2}$$

Der Ausdruck $\lfloor \ \rfloor$ steht hierbei für das Abrunden (Gaußklammer, *floor*).
Implementieren Sie hierzu die Zweipunktregel

$$f'_{\text{Zweipunkt}}(x,h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \tag{3}$$

sowie die Vierpunktregel

$$f'_{\text{Vierpunkt}}(x,h) = \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}. \tag{4}$$

Verwenden Sie als Genauigkeit in Ihrer Implementierung 32-bit Gleitkommazahlen (*single precision*), um numerische Fehler stärker hervortreten zu lassen.
Untersuchen Sie nun die numerische Konstitution der implementierten Verfahren. Gehen Sie hierzu wie folgt vor:

a) Berechnen Sie numerisch an geeigneter Stelle die erste Ableitung von $f_1(x)$ nach der Zweipunkt-Regel. Stellen Sie den Wert der Ableitung in Abhängigkeit von der Schrittweite h graphisch dar und treffen Sie eine geeignete Wahl für h. Stellen Sie den Fehler $\Delta f'_{1,\text{Zweipunkt}}(x)$ zum analytischen Resultat auf dem Intervall $[-\pi, +\pi]$ graphisch dar.

b) Berechnen Sie auch die zweite Ableitung $f''_{1,\text{Zweipunkt}}(x)$. Gehen Sie zur Bestimmung eines sinnvollen h analog zu Teilaufgabe a) vor. Stellen Sie auch hier den Fehler graphisch dar und vergleichen Sie mit der ersten Ableitung.

c) Berechnen Sie nun die Ableitung $f'_{1,\text{Vierpunkt}}(x)$ mit Hilfe der Vierpunktregel und vergleichen Sie den Fehler mit $\Delta f'_{1,\text{Zweipunkt}}(x)$.

d) Führen Sie den Vergleich zwischen Zwei- und Vierpunktregel anhand der ersten Ableitung von $f_2(x)$ in gleicher Weise fort.

Aufgabe 2: Integrationsroutine — 6 Punkte

Neben numerischer Differentiation ist auch numerische Integration essenziell für viele Aufgaben innerhalb der computergestützten Physik. Hier sollen nun drei klassische Integrationsverfahren als allgemein anwendbare Funktion implementiert werden.

Schreiben Sie eine Integrationsroutine für

a) Trapezregel,

b) Mittelpunktsregel,

c) Simpsonregel

an die jeweils folgende vier Argumente übergeben werden sollen:

1. Integrand $f(x)$,
2. untere Integrationsgrenze a,
3. obere Integrationsgrenze b,
4. Integrationsintervallbreite h oder Anzahl der Integrationsintervalle N (bei der Simpsonregel sollte N gerade sein).

Aufgabe 3: Eindimensionale Integrale — 6 Punkte

Nachdem in der letzten Aufgabe drei Verfahren zur numerischen Integration implementiert wurden, sollen nun zwei komplexere Integrale mit deren Hilfe gelöst werden. Hierbei wird der numerische Aufwand um eine bestimmte Genauigkeit zu erreichen in den Fokus gerückt.

Berechnen Sie die Integrale

a)

$$I_1 = \int_1^{100} \frac{\exp(-x)}{x} \mathrm{d}x \tag{5}$$

(Kontrolle: $I_1 \simeq 0.219\,384$)

b)

$$I_2 = \int_0^1 x \sin\left(\frac{1}{x}\right) \mathrm{d}x \tag{6}$$

(Kontrolle: $I_2 \simeq 0.378\,530$)

numerisch jeweils mittels

1. Trapezregel,
2. Mittelpunktsregel,
3. Simpsonregel.

Halbieren Sie hierbei die Intervallbreite h bis die relative Änderung des Ergebnisses kleiner als 10^{-4} wird.