Computerphysik WS 2016/2017

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

Übungsblatt 6: Interpolation und Lineare Ausgleichsrechnung

25. November 2016

Achten Sie bei allen Plots auf eine sinnvolle Darstellung und eine korrekte Beschriftung.

Aufgabe 6.1: Horner Schema (5 Punkte)

a) (2 Punkte) Implementieren Sie eine Funktion, die als Eingabe eine Liste mit den Koeffizienten des Polynoms und einen x-Wert akzeptiert, an dessen Stelle das Polynom ausgewertet wird. Die Funktion soll dann mittels Horner-Schema den Funktionswert an dieser Stelle ermitteln.

b) (2 Punkte)Implementieren Sie außerdem eine Methode, die mittels Horner-Schema den Funktionswert der n-ten Ableitung eines Polynoms an einer Stelle x auswertet. Die Funktion bekommt als Parameter die Koeffizienten, den x-Wert und n.

c) (1 Punkt) Benutzen Sie die Funktionen um den Funktionswert und die 1., 2.und 3. Ableitung folgender Polynome an der Stelle $x_0 = 3$ auszuwerten:

$$f_1(x) = 25x^5 - 3x^3 + 12x^2 - 16.$$
$$f_2(x) = 15x^{12} - 35x^7 + 11x^4 - 12x^2 + 2x - 9.$$

Aufgabe 6.2 Interpolation (8 Punkte)

Gegeben sind folgende Datenpunkte, welche die potentielle Energie (in μJ) eines Moleküls abhängig von einem internen Torsionswinkel (in Grad) darstellen.

Winkel/$\circ$	0.0	1.1	3.08	9.0	15.0	19.0	20.0	21.0
Energie/μJ	45.0	25.6	10.0	1.0	7.0	11.0	25.0	48.0

Plotten Sie alle Interpolationspolynome sowie die gegebenen Datenpunkte in einen Plot im Intervall $x \in [0., 22.]$. *Die können die Funktionswete des Polynoms "direkt" oder über dase in Aufgabe 6.1 implementierte Horner-Schema berechnen.*

a) (1 Punkt) Finden Sie ein geeignetes Polynom, welches die Datenpunkte wiedergibt, indem Sie ein lineares Gleichungssystem lösen.

b) (2 Punkte) Implementieren Sie die Newtonsche-Interpolationsmethode mittels "dividierter Differenzen":

$$p_{0,n}(x) = \sum_{i=0}^{n} f_{0,\ldots,i} \Pi_{k=0}^{i-1} (x - x_k) \tag{1}$$

mit

$$f_{l,\ldots l+m} = \frac{f_{l+1,\ldots l+m} - f_{l,\ldots l+m-1}}{x_{l+m} - x_l} \tag{2}$$

c) (1 Punkt) Bestimmen Sie mit Ihrer Funktion das Interpolationspolynom, welches die Datenpunkte wiedergibt und plotten Sie das Polynom.

d) (3 Punkte) Implementieren Sie eine Methode, welche mittels kubischer Splines Datenpunkte interpoliert nach

$$S(x) = m_i \frac{(x_{i+1} - x)^3}{6(x_{i+1} - x_i)} + m_{i+1} \frac{(x - x_i)^3}{6(x_{i+1} - x_i)} + A_i (x - x_i) + B_i \tag{3}$$

Hierin sind

$$A_i = \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{x_{i+1} - x_i}{6} (m_{i+1} - m_i) \tag{4}$$

und

$$B_i = x_i - m_i \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{6} \tag{5}$$

Die Krümmungen m_i bestimmen Sie mit

$$\begin{pmatrix} 2 & \alpha_0 & & & & \\ \beta_1 & 2 & \alpha_1 & & 0 & \\ & \beta_2 & \ddots & \dots & & \\ & & & \ddots & \alpha_{n-2} & \\ & 0 & & \beta_{n-1} & 2 & \alpha_{n-1} \\ & & & & \beta_n & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_0 \\ \delta_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix} \tag{6}$$

wobei $m_i = 2b_i$ sowie

$$\alpha_i = \frac{(x_{i+1} - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})} \tag{7}$$

$$\beta_i = \frac{(x_i - x_{i-1})}{(x_{i+1} - x_{i-1})} \tag{8}$$

$$\delta_i = \frac{3}{(x_{i+1} - x_{i-1})} \left(\frac{d_{i+1} - d_i}{(x_i - x_{i-1})} - \frac{d_i - d_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})} \right) \tag{9}$$

e) (1 Punkt) Machen Sie eine kubische Spline-interpolation der gegebenen Datenpunkte und plotten Sie diese zusammen mit den anderen Interpolationen.

Aufgabe 6.3 Lineare Ausgleichsprobleme (7 Punkte)

Die Datei `messdaten.txt` enthält Messwerte eines AFM-Experiments zur Bestimmung einer Kraft-Dehnungskruve. Die erste Spalte enthält die Auslenkung (Dehnung) (x_i in nm), die zweite die gemessene Kraft (y_i in pN)und die dritte Spalte den Messfehler. Zu diesen Daten soll durch lineare Ausgleichsrechung eine Funktion gefunden werden, welche die Daten gut beschreibt, d.h. das Fehlerfunktional

$$E(\{a_j\}) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \sum_{j}^{m} a_j f_j(x) \right)^2 \tag{10}$$

bzw.

$$E(\{a_j\}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{a}\|_2^2 \tag{11}$$

minimiert.

Hierin sind a_j die Komponenten des Vektors $\mathbf{a}$ die Koeffizienten und f_j Ansatzfunktionen. Die Komponenten des Vektors $\mathbf{y}$ sind die gemessenen Kräfte y_i. Die Matrix ist

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ f_1(x_2) & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & \cdots & \cdots & f_m(x_n) \end{pmatrix} \tag{12}$$

a) (2 Punkte) Implementieren Sie eine Funktion, welche eine lineare Ausgleichsrechung zu den Messdaten duchführt. Die Funktion soll als Eingabewerte den Datensatz bekommen und ein Array, welches die Ansatzfunktionen f_j enthält. Rückgabewert ist der Vektor der Koeffizienten $\mathbf{a}$. Außerdem soll der Residualfehler, d.h. der verbleibende Wert des Fehlerfunktionals ausgegeben werden.

b) (2 Punkte) Wählen Sie als Ansatzfunktionen Polynome vom Grad $n = 1$ bis$n = 8$ und führen Sie die Ausgleichsrechnung für jede der n verschiedenen Polynomialen Ansatzfunktionen durch und bestimmen Sie jeweils den Restfehler. Was beobachten Sie?

c) (1 Punkt) Plotten Sie alle Polynom-Ausgleichsfunktionen im Intervall $x \in [0.5, 15]$, sowie die Messdaten mit Fehlerbalken in einen gemeinsamen Plot. *Hinweis: Fehlerbalken plotten Sie mit* texttt plt.errorbar(x,y,dy) *wobei* `dy` *die Fehler sind*

d) (2 Punkte) Führen Sie die lineare Ausgleichsrechnung erneut aus und verwenden Sie die Ansatzkunktionen $f_0(x) = 1$; $f_1(x) = log(x)$ und $f_2(x) = cos(x)$. Plotten Sie auch hier die resultierende Ausgleichsfunktion im Intervall $x \in [0.5, 15]$ zusammen mit den Messdaten. Welcher Fit beschreibt die Daten am besten?

Hinweis: Lineare Gleichungssysteme können Sie mit `numpy.linalg.solve` *lösen.*