Computerphysik WS 2015/2016

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 8: Numerische Differentiation und Integration

Alexander Schlaich, Markus Miettinen

9. Dezember 2015

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 13.12., 24:00 Uhr.**

Aufgabe 8.1 Numerische Differentiation (10 Punkte)

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

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

die eine Fehlerordnung 1 hat. Eine bessere Differenzenformel für die erste Ableitung kann aus der Differenz der Taylorentwicklungen

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

und

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

erhalten werden:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \equiv D_2 f(x_0,h) + \mathcal{O}(h^2). \tag{4}$$

Diese zentrale Differenz hat die Fehlerordnung 2.

Da bei der Taylorentwicklung die Fehlerterme analytisch berechnet werden können, kann durch Extrapolation auch der quadratische Fehlerterm eliminiert werden. Für die erste Ableitung bildet man bei der h-Extrapolation die Differenz aus den Termen

$$4f'(x_0) = 4D_2 f(x_0,h) + 4e_2 h^2 + 4e_4 h^4 + \dots \tag{5}$$

$$\text{und} \qquad \mathrm{f}'(\mathrm{x}_0) = D_2 f(x_0,2h) + 4e_2 h^2 + 16 e_4 h^4 + \dots, \tag{6}$$

wobei wir nun die die Restglieder e_i der Taylorentwicklung explizit ausgeschrieben haben. Verwendet man wieder die Landau-Schreibweise $\mathcal{O}$, erhält man

$$f'(x_0) = \frac{8\left[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)\right] - \left[f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h)\right]}{12h} + \mathcal{O}(h^4) \equiv D_4 f(x_0,h) + \mathcal{O}(h^4). \tag{7}$$

Diese Formel hat also die Fehlerordnung 4.

- 8.1.1 (2 Punkt): Implementieren Sie die durch die Differenzenformeln (1), (4) und (7) gegebenen numerischen ersten Ableitungen als Python-Funktionen.
- 8.1.2 (2 Punkte): Berechnen Sie mit den drei Implementierungen die Ableitung der Funktion

$$f(x) = \cos(x).$$

  Stellen Sie dazu die Ableitungen für alle Verfahren für $x \in [0{,}2\,\pi]$ und $h = 2^{-i}$ mit $i = 0{,}1{,}2{,}\ldots{,}5$ in je einem Plot pro Verfahren dar. Plotten Sie dazu ebenfalls die analytische Ableitung.
  Hinweis: Achten Sie auf aussagekräftige Beschriftung der Achsen und Kurven. Seien Sie sich bewusst, dass h von dem zum Plotten verwendeten Gitterabstand Δx unabhängig ist.
- 8.1.3 (3 Punkte): Um die Güte der numerischen Ableitungen abzuschätzen untersuchen wir nun für beide Implementierungen jeweils die summierte absolute Abweichung von der analytischen Lösung,

$$A_k(h) := \sum_x \left|D_k f(x{,}h) - f'(x)\right|, \tag{8}$$

  wobei die Summe über die Punkte einer Diskretisierung des Intervalls $[0{,}2\pi]$ erfolgt. Zum Plotten soll hier die konstante Schrittweite $\Delta x = 0.01$ benutzt werden.
  - Stellen Sie $A_k(h)$ für alle Implementierungen in einem gemeinsamen doppellogarithmischen Plot dar, der das Verhalten für $10^{-10} \leq h \leq 1$ zeigt.
  - In welcher Größenordnung würden Sie h für die jeweiligen Differenzenformeln wählen?
  - Entspricht der Verlauf der Funktionen für „große“ h ($10^{-5} < h < 1$) Ihren Erwartungen? Zur Beantwortung dieser Frage sollten Sie geeignete Funktionen $\propto h^\alpha$ in Ihren Plot einfügen.

Um die Qualität der numerischen Ableitung für kleine h zu verstehen, betrachtet man die beiden Fehlerquellen: den Diskretisierungsfehler entsprechend Gleichungen (1), (4) und (7), sowie numerische Rundungsfehler, welche gehen wie $\propto \frac{1}{h}$.

- 8.1.4 (2 Punkte): Leiten Sie durch Minimieren des Gesamtfehlers $\left(\frac{\varepsilon}{h} + h^k\right)$ für eine Fehlerordnung k den optimalen Wert für h her, wenn Sie annehmen, dass die Maschinengenauigkeit $\varepsilon = 10^{-16}$ beträgt.
- 8.1.5 (1 Punkt): Fügen Sie die entsprechenden Werte aus 8.1.4 Ihrem Plot aus 8.1.3 hinzu.

Aufgabe 8.2 Numerische Integration (10 Punkte)

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

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\Big]. \tag{9}$$

- 8.2.1 (2 Punkte) Zeigen Sie dass die summierte Simpsonregel aus der Simpsonregel für ein Intervall $[a,b]$ wie in der Vorlesung gezeigt folgt.

Im folgenden sollten Sie drei verschiedene Integrationsmethoden als Python-Funktionen implementieren. Verwenden Sie dabei die Funktion f, die Integrationsgrenzen (a,b) und die Anzahl der Teilintervalle n als Argumente.

Berechnen Sie damit jeweils das Integral

$$I = \int_0^{3\sqrt{\pi}} x \sin(x^2)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{10}$$

für $n = 100$ Teilintervalle.

- 8.2.2 (2 Punkte): Implementieren Sie die **Rechteckregel** zur numerischen Integration und berechnen Sie I. Welchen Wert erhalten Sie?
- 8.2.3 (2 Punkte): Implementieren Sie die **Trapezregel** und berechnen Sie I. Welchen Wert erhalten Sie?
- 8.2.4 (2 Punkte): Implementieren Sie die **Simpsonregel** und berechnen Sie I. Welchen Wert erhalten Sie?
- 8.2.5 (2 Punkte): Berechnen Sie die Abhängigkeit des numerischen Integrals von der Integrationsschrittweite. Variieren Sie dazu die Anzahl der Teilintervalle $n$so dass die Schrittweite $h = 3\sqrt{\pi}/n$ zwischen 1 und 10^{-6} liegt.

  Erstellen Sie einen Plot, in welchem Sie die absolute Abweichung des Integrals I von der analytischen Lösung (10) als Funktion von h darstellen. Entspricht der Verlauf der Funktionen für „große“ h ($10^{-5} < h < 1$) Ihren Erwartungen? Zeichnen Sie zur Beantwortung dieser Frage geeignete Funktionen $\propto h^\alpha$ in Ihren Plot ein

  Diskutieren Sie Ihre Beobachtungen. Ist die selbe Methode für alle Schrittweiten die Beste? Konvergiert der Wert des Integrals für hinreichend kleine h?