Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2016	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 7

7.1 Newton-Verfahren (Hausaufgabe + Email an die Tutoren, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung)

Das Newton-Raphson-Verfahren ist eine Iterationsmethode zur näherungsweisen Nullstellensuche bei differenzierbaren Funktionen f. Die Iterationsvorschrift lautet wie folgt:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \ . \tag{1}$$

1. Formulieren Sie auf dem Papier einen Algorithmus der die Nullstellen einer differenzierbaren Funktion f mit dem Newton-Verfahren näherungsweise berechnet. Die Algorithmus Eingaben sind $f(x), f'(x)$, Startwert x_0, und Genauigkeitsvorgabe ξ, wobei der Algorithmus terminiert wenn $|x_{n+1} - x_n| < \xi$.

2. Betrachten Sie die Funktion $f(x) = x^4 + 3x^3 - x - 10$. Führen Sie die ersten vier Iterationsschritte "per Hand" aus und schreiben Sie die Werte in eine Tabelle (x_n vs. $|x_{n+1} - x_n|$). Wählen Sie als Startwert $x_0 = 2$.

3. Entwickeln Sie ein kleines C Programm, welches dieses Verfahren implementiert. Geschickt wäre es, wenn Sie die Funktion und ihre Ableitung in ein Unterprogramm stecken. Dann bräuchten Sie nur das Unterprogramm zu wechseln, wenn Sie eine andere Funktion untersuchen wollen.

4. Finden Sie jetzt mit dem von Ihnen geschriebenen Programm die Nullstelle von $f(x) = \tan(x) - \sqrt{x}$ im Intervall $(0, 1.5]$.

7.2 Perigäum und Apogäum (Hausaufgabe + Vorstellen des Programms in der Übung)

Schreiben Sie ein Programm zur Bestimmung der Umkehrpunkte (r_{min} und r_{max}) der Bewegung einer Punktmasse im Zentralpotential mit konstanter Energie E. Dafür benötigen Sie (a) eine Funktion, die das äquivalente eindimensionale Potential V_{eff} in Abhängigkeit des Radius r berechnet (Theoretische Physik I) und (b) ein Unterprogramm, das die Nullstellen von $E - V_{\text{eff}}$ findet. Benutzen Sie hierfür das Bisektions-Verfahren oder die regula falsi.

Testen Sie Ihr Programm an dem folgenden Beispiel der Bewegung eines Satelliten im Schwerefeld der Erde: Das Gravitiationspotential ist gegeben durch $V(r) = GMm/r$. Aus messtechnischen Gründen ist GM genauer bekannt als die Einzelterme G (Gravitationskonstante) und M (Erdmasse); der genaue Zahlenwert ist $GM = 3.9860042 \cdot 10^{14}$ m^3 s^{-2}. Ein Satellit hat die Masse $m = 1000$ kg, den Drehimpuls $L = 68.8 \cdot 10^{12}$ kg m^2 s^{-1} und eine

Energie von $E = -1.2 \cdot 10^{10}$ J. Berechnen Sie nun sein Perigäum und Apogäum (den erdnächsten und erdfernsten Punkt). Was passiert mit dem Satelliten, wenn der Drehimpuls $L = 57.3 \cdot 10^{12}$ kg m^2 s^{-1} bzw. $L = 81.35 \cdot 10^{12}$ kg m^2 s^{-1} beträgt?

7.3 Vergleich unterschiedlicher Verfahren zur Nullstellensuche (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

Zuhause haben Sie schon die Nullstelle von $f(x) = \tan(x) - \sqrt{x}$ im Intervall $(0, 1.5]$ mit dem Newton-Raphson-Verfahren bestimmt.

1. Schreiben Sie jetzt ein Programm, das die Nullstelle mit dem Bisektions-Verfahren oder der regula falsi bestimmt und vergleichen Sie die Zahl der nötigen Schritte bei gleicher geforderter Genauigkeit des Ergebnisses. Benutzen Sie den Startwert $x_0 = 0.6$.

2. Benutzen sie nun den Van-Wijngaarden-Dekker-Brent-Algorithmus zur Bestimmung der Nullstelle. Hierzu benutzen Sie das Unterprogramm `zbrent.h`. Genauere Informationen finden sie in dem Dokument `Numerical_Recipes_Zbrent.pdf`. Hinweise: Die Funktion zbrent erwartet als erstes Argument einen Zeiger auf eine Funktion und kann damit für die Nullstellensuche beliebiger Funktionen benutzt werden. Die Funktion verwendet den Van-Wijngaarden-Dekker-Brent-Algorithmus, der sog. root bracketing, Bisektion und inverse quadratische Interpolation für die Bestimmung der Nullstellen kombiniert. Diese Methode hat in unproblematischen Fällen den Vorteil hoher Geschwindigkeit und garantiert auch in problematischen Fällen eine Kovergenz der Nullstellensuche.

3. Bestimmen Sie nun die ersten drei Nullstellen einer unbekannten Funktion, die bereits implementiert und übersetzt (compiliert) wurde. Sie können die Funktion aufrufen, indem Sie die Header-Datei `unknown_function.h` in Ihr Quellprogramm einbinden und die Objekt-Datei `unknown_function.o` beim Übersetzen Ihres Quellprogramms anhängen (d.h. verlinken). Fragen Sie eventuell die Tutoren wie dies funktioniert oder lesen Sie die man-pages des Compilers.

Alle nötigen Datein liegen auf dem server im Verzeichnis `/home/sfpshare`