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

Aufgabenblatt 9

9.1 Integrieren mit Trapezregel (Hausaufgabe + Email an die Tutoren, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung)

Berechnen Sie mit der Trapezregel das Integral

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{1 - z\ln(x)} \quad = \quad \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u}{1+uz} \tag{1}$$

für $z = 0.5, 1, 10, 20$.

1. Überzeugen Sie sich davon, dass die beiden Darstellungen des Integrals in (1) äquivalent sind. Plotten Sie den Integranden für die angegebenen z-Werte. Können Sie das Integral (mit Mathematica) analytisch lösen?

2. Wiederholen Sie, wie die Trapezregel funktioniert. Welche Abhängigkeit sollte der Fehler von h in etwa haben?

3. Berechnen Sie das Integral (1) in der linken Form (d.h. $a = 0$ und $b = 1$) mit Hilfe der Trapezregel für die Schrittweiten

   $$h_i \quad = \quad \frac{b-a}{n_i}\ ,\ n_i = 2^i\ ,\ i = 1, 2, \ldots, 10\ . \tag{2}$$

   Schreiben Sie dazu ein geeignetes Hauptprogramm und vergleichen Sie die erhaltenen Ergebnisse z.B. mit Mathematica oder gnuplot.

4. Stellen Sie die Approximationen des Integrals als Funktion von i graphisch dar. Verwenden Sie den ϵ-Algorithmus, um die Ergebnisse durch eine Extrapolation in der Schrittweite zu $h \to 0$ zu verbessern.

9.2 Numerisches Integrieren (Eintragen ins wiki in stud.ip)

Berechnen Sie das Integral

$$\int_{0.01}^{1.0} \sin\left(\frac{\pi}{x}\right) \mathrm{d}x \tag{3}$$

mit einer **selbst programmierten** Methode Ihrer Wahl, z.B. der Trapezmethode aus der vorigen Aufgabe, mit möglichst hoher Genauigkeit und posten Sie das Ergebnis im wiki auf stud.ip.

9.3 Integrieren mit Gauß-Legendre und Gauß-Laguerre (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

Berechnen Sie das Integral

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{1 - z\ln(x)} = \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u}{1 + uz} \tag{4}$$

für $z = 0.5, 1, 10, 20$.

1. Informieren Sie sich über die Gauß-Integration. Worin unterscheidet sich diese von Verfahren wie der Trapezregel? Für welche Integrationsgrenzen und welche Gewichtsfunktion werden Legendre- bzw. Laguerre-Polynome verwendet?

2. Berechnen Sie das Integral (4) in der linken Form mit dem Gauß-Legendre-Algorithmus für die angegebenen z-Werte und N Stützstellen, wobei $N = 2^{(2+n)}$ mit $n = 0, 1, \ldots, 8$ und vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus d.

   Für die Gauß-Legendre-Integration steht die Unterfunktion `gaussLegendre.h` zur Verfügung, die (unabhängig vom Integranden) für vorgegebene Intervallgrenzen die benötigten Stützstellen und Gewichte berechnet (siehe "Numerical Recipes in C", 2nd edition, Kapitel 4.5).

3. Berechnen Sie das Integral (4) in der rechten Form mit dem Gauß-Laguerre-Verfahren für die angegebenen z-Werte und N Stützstellen, wobei hier $N = 2, 4, \ldots, 40$. Achten Sie darauf, die Gewichtsfunktion e^{-x} korrekt zu berücksichtigen und vergleichen Sie mit den vorherigen Ergebnissen.

   Mit `gaussLaguerre.h` steht wieder ein Unterprogramm zur Verfügung, welches die Stützstellen und Gewichte berechnet. Die Integrationsgrenzen sind hier fest und können nicht gewählt werden. Der für die Berechnung der Gewichte benötigte Logarithmus der Gamma-Funktion wird von der Hilfsfunktion `lngamma.h` geliefert (siehe Numerical Recipes in C, 2nd edition, Kapitel 6.1).

   Die nötigen Unterprogramme finden Sie in stud.ip.

9.4 Conjugate Gradient (Hausaufgabe + Bearbeiten in den Übungen)

Verändern Sie das Mathematica-Notebook über die Newton-Methode so, dass Sie damit die Methode konjugierter Gradienten anwenden können. Diskutieren Sie qualitativ, wie nahe Sie am wirklichen Minimum sein müssen, damit die Methode funktioniert.