Universität Bielefeld	Computerphysik	Prof. Dr. Jürgen Schnack
Fakultät für Physik	SS 2023	jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 8

8.1 Selbststudium openMP (Dienstag, 30.05.2023 und Abgabe Montag 05.06.2023, Zusatzpunkte)

Jeder moderne Rechner hat heutzutage mehrere Rechenkerne (cores). Aus diesem Grunde ist es sinnvoll, Programme zu parallelisieren. Eine sehr einfache Möglichkeit ist mittels des Standards openMP gegeben.
Informieren Sie sich über openMP und darüber, wie man diese Art der Parallelisierung in Python einsetzen könnte.
Untersuchen Sie die Laufzeiten für die folgenden einfachen Matrix-Vektoroperationen auf einem Rechner Ihrer Wahl: Matrixinversion, Eigenwerte und Matrix-Vektormultiplikation einer reell symmetrischen Matrix z.B. mittels der Routinen np.linalg.pinv, np.linalg.eigvalsh, np.dot. Erzeugen Sie die reell symmetrischen Matrizen und die reellen Vektoren mit np.random.random zufällig.
Überprüfen Sie, wie sich die Laufzeit in Abhängigkeit von der Dimension des Problems sowie der Zahl der threads verhält.
Erläutern Sie kurz die Begriffe `core` und `thread`.
Bei Fragen wenden Sie sich bitte an die Tutoren.

8.2 Integrieren mit Trapezregel (Abgabe 05.06.2023)

Berechnen Sie mit der Trapezregel das Integral

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

für $z = 0.5, 1, 10, 20$.

a. 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?

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

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

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

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

d. 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. Alternativ Romberg-Verfahren.

e. Sie wollen noch etwas zu Romberg erfahren? Es gibt mindestens zwei interessante Rombergs; beide hatten es schwer und haben trotzdem viel erreicht. Werner Romberg (Mathematiker und Physiker, Jude im Nationalsozialismus) war der Entwickler des Rombergverfahrens, siehe
https://de.wikipedia.org/wiki/Werner_Romberg
und Walter Romberg (Mathematiker und Physiker, Christ in der DDR) war ein wichtiger Mitgestalter der deutschen Einheit, siehe
https://de.wikipedia.org/wiki/Walter_Romberg_(Politiker).

8.3 Integrieren mit Gauß-Legendre und Gauß-Laguerre

Berechnen Sie das Integral

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{1 - z\ln(x)} \quad = \quad \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-u}\mathrm{d}u}{1 + uz} \tag{3}$$

für $z = 0.5, 1, 10, 20$.

a. 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?

b. Berechnen Sie das Integral (3) 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 8.2.

c. Berechnen Sie das Integral (3) 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.

Für die Gauß-Legendre-Integration sowie das Gauß-Laguerre-Verfahren steht ein Jupyter-Notebook zur Verfügung, das zeigt, wie man die Stützstellen generiert.