Computerphysik WS 2016/2017

Prof. Dr. Petra Imhof, FU Berlin

Übungsblatt 7: Nichtlineare Ausgleichsrechnung, Numerische Differentiation und Integration

2. Dezember 2016

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

Aufgabe 7.1: Nicht-lineare Ausgleichsrechnung (7 Punkte)

Eine Wasserstoffbrücke (H-Brücke) zwischen einem Donor-Akzeptor-Paar in einem molekularen System kann über geometrische Kriterien definiert werden. In der Simulation eines molekularen Systems wurden solche Geometrien über einen Zeitraum bestimmt und damit festgestellt, welche H-Brücken zum "Messzeitpunkt" vorlagen. Aus den Messdaten lässt sich ein zeitabhängiger Zusammenhang konstruieren

$$C(t) = \frac{\Sigma_{i,j} S_{ij}(t_0) S_{ij}(t_0 + t)}{\Sigma_{i,j} S_{ij}(t_0)} \tag{1}$$

wobei $S_{ij}(t)$ die Existenz einer H-Brücke zum Zeitpunkt t bezeichnet, mit $S_{ij}(t) = 1$ wenn eine H-Brücke zwischen Molekül i und Molekül j zum Zeitpunkt t vorliegt und $S_{ij}(t) = 0$ wenn nicht. $C(t)$ gibt dabei an wie häufig eine zum Zeitpunkt t_0 vorhandenen H-Brücke zum Zeiptunkt $t_0 + t$ ebenfalls vorhanden ist. Der Verlauf von $C(t)$ kann durch die Summe von zwei Exponentialfunktionen ausgedrückt werden:

$$C(t) \propto A_1 exp(-t/\tau_1) + A_2 exp(-t/\tau_2) \tag{2}$$

wobei $1/\tau_1$ und $1/\tau_2$ jeweils die Kurzzeit- und Langzeitrelaxation bezeichnen.

a) (1 Punkt) Die Dateien ACF1.txt und ACF2.txt enthalten die bereits die aus den Messwerten in 2 ps Abständen ermittelten Datenpunkte von $C(t)$ für zwei verschiedene H-Brücken, HB1 und HB2. Plotten Sie diese für HB1 und HB2.

b) (3 Punkte) Implementieren Sie eine Funktion, welche den Verlauf von $C(t)$ der beiden H-Brücken an die Summe zweier Exponentialfunktionen anpasst (eq. 2).

c) (2 Punkte) Berechnen Sie anhand der gegebenen Datensätze die kurzen und langen Lebensdauern, τ_1 und τ_2. *Hinweis: Die Datensätze sind recht groß. Verwenden Sie für die Fits nur jeden 100. Datenpunkt.*

d) (1 Punkt) Geben Sie den Restfehler Ihrer Fits an. Wie ändert sich dieser, wenn Sie die Datenpunkte nicht gleichmäßig auswählen, sondern z.B. mehr Punkte bei kurzen Zeiten wählen?

Aufgabe 7.2 Numerische Differentiation (8 Punkte)

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

$$f'(x_0) = \lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \mathcal{O}(h) \equiv D_1 f(x_0, h) + \mathcal{O}(h) \tag{3}$$

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

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

und

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) - \frac{1}{6}h^3 f'''(x_0) + \mathcal{O}(h^4) \tag{5}$$

erhalten werden:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \equiv D_2 f(x_0, h) + \mathcal{O}(h^2). \tag{6}$$

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

$$4f'(x_0) = 4D_2 f(x_0, h) + 4e_2 h^2 + 4e_4 h^4 + \ldots \tag{7}$$

$$\text{und} \qquad \mathrm{f}'(\mathrm{x}_0) = D_2 f(x_0, 2h) + 4e_2 h^2 + 16 e_4 h^4 + \ldots, \tag{8}$$

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

$$f'(x_0) = \frac{8\left[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)\right] - \left[f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h)\right]}{12h} + \mathcal{O}(h^4) \equiv D_4 f(x_0, h) + \mathcal{O}(h^4). \tag{9}$$

Diese Formel hat also die Fehlerordnung 4.

a) (2 Punkte): Implementieren Sie die durch die Differenzenformeln (1), (4) und (7) gegebenen numerischen ersten Ableitungen als Python-Funktionen.

b) (2 Punkte): Berechnen Sie mit den drei Implementierungen die Ableitung der Funktion

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

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.

c) (2 Punkte): Um die Güte der numerischen Ableitungen abzuschätzen untersuchen wir nun für alle Implementierungen jeweils die summierte absolute Abweichung von der analytischen Lösung,

$$A_k(h) := \sum_x \left| D_k f(x, h) - f'(x) \right|, \tag{10}$$

wobei die Summe über die Punkte des Intervalls $[0, 2\pi]$ mit $\Delta x = \dfrac{\pi}{100}$ gebildet werden soll.

- 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 Ch^k in Ihren Plot einfügen.

d) (2 Punkte): Implementieren Sie die durch die Differenzformel (9) gegebene zweite Ableitung als Python-Funktion

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0+h) + f(x_0-h) - 2f(x)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \equiv D_{2.2}f(x_0,h) + \mathcal{O}(h^2) \tag{11}$$

und berechnen Sie mit ihrer Implementierung die 2. Ableitung der Funktion

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

Stellen Sie dazu wie zuvor die Ableitung für $x \in [0, 2\,\pi]$ und $h = 2^{-i}$ mit $i = 0, 1, 2, \ldots, 5$ in einem Plot dar. Plotten Sie ebenfalls die analytische Ableitung.

Aufgabe 7.3: Integration (5 Punkte)

a) (1 Punkt) Implementieren Sie einen Algorithmus, der das Integral einer Funktion im Intervall (a, b) auswertet. Die Übergabeparameter sind die Intervallgrenzen und die Anzahl der Stützstellen n. Der Algorithmus soll hierbei die Funktion durch Rechtecke annähren, deren Grundseitenlänge immer $(b-a)/n$ ist.

b) (1 Punkt) Ermitteln Sie mit diesem Algorithmus den Wert folgendes Integrals mit $n = 5000$:

$$\int_{-3}^{3} x^3 - x^2 - 3x + 7\,\mathrm{d}x. \tag{12}$$

c) (2 Punkte) Implementieren Sie analog zu a) eine Funktion, die die Integration in zwei Dimensionen beherrscht (Die Annäherung erfolgt hier durch Quader). Hierbei sollen die Übergabeparameter die Intervallgrenzen in x (a_x, b_x), in y (a_b, b_y) und die Anzahl der Stützstellen auf der x-Achse n_x und auf der y-Achse n_y sein.

d) (1 Punkt) Berechnen Sie hiermit den Wert folgendes Integrals mit $n_x = 5000, n_y = 5000$:

$$\int_{-3}^{3} \mathrm{d}x \int_{-3}^{3} \mathrm{d}y\; x^2 + xy - y^2. \tag{13}$$