Rechnernutzung in der Physik

Institut für Experimentelle Teilchenphysik
Institut für Theoretische Teilchenphysik
Interfakultatives Institut für Anwendungen der Informatik

Dr. Th. Kuhr, Prof. Dr. M. Steinhauser, Prof. Dr. U. Husemann
Mildenberger / Hoff / Hermann / Heck
WS2012/13 – Blatt 09
`http://comp.physik.kit.edu`
Prog: Di, 18.12.2012 / Ausarb: Fr, 21.12.2012

Aufgabe 20: Gauß-Integration **Programmtestat und Ausarbeitung**

Gegeben sei ein Satz von Orthonormalpolynomen $P_i(x)$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$ mit dazugehöriger Gewichtsfunktion $\omega(x)$. Schreiben Sie eine Routine, die mit Hilfe von $P_n(x)$ und $P_{n-1}(x)$ eine Approximation des Integrals

$$F = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

berechnet. In einem ersten Schritt muss dabei das Interval $[a, b]$ in den Geltungsbereich I der Orthonormalpolynome transformiert (*linear*) werden. Danach spaltet man ω von f ab, um schließlich die Integrationsformel

$$\int_I \tilde{f}(u)\omega(u)\mathrm{d}u \approx \sum_{k=1}^{n} G_k \tilde{f}(x_k)$$

benutzen zu können. Dabei sind die x_k die Nullstellen von $P_n(x)$ und G_k ist gegeben durch

$$G_k = \frac{a_n}{a_{n-1}P'_n(x_k)P_{n-1}(x_k)},$$

wobei $P_n(x) = a_n x^n + \ldots$ und $P_{n-1}(x) = a_{n-1}x^{n-1} + \ldots$.

(a) Testen Sie Ihre Routine für

   (i) $f_1(x) = e^{-(x+2)^2} + e^{-x^2}$ $(a = -5,\, b = 3)$ und
   (ii) $f_2(x) = 3x + 5x^2 + 6x^3 - 10x^6$ $(a = -1,\, b = 1)$.

   Verwenden Sie dabei Tschebyschow-Polynome. Stellen Sie jeweils die Ergebnisse der Gauß-Routine und von `NIntegrate[]` in Abhängigkeit von n zwischen 2 und 8 graphisch dar.

(b) Benutzen Sie Laguerre-Polynome, um die Funktion

$$f_3(x) = e^{-x^2}\,\frac{\sin(x) + \cos(1+x)}{1+x^2} \quad (a = 0,\, b = \infty)$$

   zu integrieren.

(c) In dem File `Orthopolynome.m` finden Sie die Orthonormalpolynome zur Gewichtsfunktion $\omega(x) = e^{-x^2}/(1+x^2)$ und dem Intervall $[0, \infty]$. Benutzen Sie diese, um das Integral über $f_3(x)$ zu berechnen. Stellen Sie die Ergebnisse zusammen mit denjenigen von (b) und `NIntegrate[]` für $n = 2, \ldots, 8$ graphisch dar.

Ausarbeitung: Drucken Sie die in Teil (c) erzeugte Figur aus und notieren Sie *handschriftlich* die numerischen Werte der Datenpunkte $n = 2$ und $n = 8$.

Hinweis: Folgende `Mathematica`-Befehle erweisen sich in dieser Aufgabe als nützlich: `ChebyshevT`, `LaguerreL`, `Coefficient`, `D`, `NSolve`, `Sum`, `Table`, `ListPlot` und `Get` (`<<`). Beachten Sie, dass die schon implementierten orthogonalen Polynome noch normiert werden müssen.

Einführung in die Benutzung von ROOT

ROOT (`http://root.cern.ch`) ist ein Programmpaket zur grafischen Auswertung insbesondere großer Datenmengen. Die von ROOT zur Verfügung gestellten Klassen können entweder in eigene Programme eingebunden oder interaktiv auf Kommandozeilenebene aufgerufen werden.

Root Tutorial — verpflichtend (ohne Testat)

Um sich mit ROOT vertraut zu machen, laden Sie die Datei `divingROOT.zip` in Ihr Arbeitsverzeichnis und entpacken Sie sie. Arbeiten Sie Kapitel 1 – 3 des Tutorials `diving_into_ROOT.pdf` durch. Alle Beispiele finden Sie nach Entpacken der `zip`-Datei im Unterverzeichnis `macros`. Bitte machen Sie sich auch mit den im Tutorial angegebenen Informationsquellen vertraut, insbesondere zu den Klassendefinitionen im Reference-Guide (`http://root.cern.ch/root/Reference.html`) und dem ROOT User's Guide (`http://root.cern.ch/drupal/content/users-guide`).

Aufgabe 21: Gauß-Funktion in ROOT — freiwillig

Nachdem Sie das Tutorial durchgearbeitet haben, sollten Sie nun in der Lage sein, eine normierte Gauß-Funktion mit vorgegebenem Mittelwert von $\mu = 5.0$ und Standardabweichung $\sigma = 1.5$ in ROOT darzustellen.

Eine Möglichkeit besteht darin, eine eigene Funktion zu definieren, die von `x[0]` und zwei Parametern `par[0]`, `par[1]` abhängt. Des Weiteren können Sie die internen Funktionsdefinitionen von ROOT verwenden, wo die beiden Parameter durch `[0]` und `[1]` repräsentiert werden. Sehen Sie dazu auch bitte in die Vorlage `Blatt09/gauss.cc`. Der C++ Code kann sowohl als ROOT Makro innerhalb von ROOT ausgeführt werden (`.x gauss.cc`) als auch mittels des ebenfalls präparierten Makefiles für sich alleinstehend kompiliert, gelinkt und ausgeführt werden (`make -f Makefile.txt gauss`). Die erzeugte ROOT Datei können Sie mittels `root gauss.root` in ROOT öffnen und u.a. mit dem Browser Kommando `TBrowser a` durchsehen.

Zeichnen Sie die Ableitung und das Integral der von Ihnen implementierten Funktion im vorgegebenen Intervall. Sehen Sie dazu unter `http://root.cern.ch/root/html/TF1.html` nach, welche `Draw` Funktionen es zur TF1 Klasse gibt.

Hinweis: Mit dem Rechnernamen `fphctssh.physik.uni-karlsruhe.de` können Sie von überall aus mittels ssh/scp Programm auf einen Poolrechner zugreifen.
