Rechnernutzung in der Physik

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

Prof. Dr. U. Husemann, Dr. V. Shtabovenko
Dr. A. Mildenberger, Dr. T. Chwalek

WS2019/20 – **Blatt 5**

`http://comp.physik.kit.edu`

Bearbeitungszeitraum: bis Di, 3.12.2019

Aufgabe 9: Gauß-Integration (*)

Gegeben sei ein Satz von Orthonormalpolynomen $P_i(x)$ $(i = 0, 1, \dots, n)$ 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 $P_n(x) = a_n x^n + \dots$ und $P_{n-1}(x) = a_{n-1}x^{n-1} + \dots$.

(a) Testen Sie Ihre Routine für

  (i) $f_1(x) = e^{-x^2/2} + e^{-x^2}$ $(a = -5, b = 3)$ und

  (ii) $f_2(x) = x/10 + \sin(x) + \cos(3x)$ $(a = 0, b = 10)$

  Verwenden Sie dabei Legendre-Polynome. Stellen Sie jeweils die Ergebnisse der Gauß-Routine und von `NIntegrate` inAbhängigkeit von n zwischen 2 und 12 grafisch dar.

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

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

  zu integrieren.

(c) In der Datei File `a9-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 $n = 2, \dots, 8$ graphisch dar.

Hinweise:

- Hilfreiche MATHEMATICA-Befehle: `LegendreP`, `LaguerreL`, `Coefficient`, `D`, `NSolve`, `Sum`, `Table`, `ListPlot` und `Get` (<<).
- Beachten Sie, dass die schon implementierten orthogonalen Polynome noch normiert werden müssen.

Aufgabe 10: Gröbnerbasen

Betrachten wir die Reduktion eines Polynoms unter algebraischen Gleichungen $f_1 = 0, ..., f_n = 0$, die durch die Polynome $f_1, ..., f_n$ gegeben seien. Diese Reduktion kann durch sukzessive Polynomdivision mit f_i erreicht werden. Man findet schließlich eine Darstellung

$$f = a_1 f_1 + \cdots + a_n f_n + r \,.$$

Hierbei ist r der Rest, der nicht weiter dividiert werden kann, und die a_i sind wieder Polynome. Es kann nun passieren, dass r unter Linearkombinationen der f_i trotzdem weiter reduziert werden könnte. Insbesondere ist r nicht eindeutig, sondern hängt im Allgemeinen von der Reihenfolge der Polynome f_i ab.

Eine Gröbnerbasis G hat nun die besondere Eigenschaft, dass der Rest nach der Reduktion eines Polynoms unter G eindeutig ist, d.h. insbesondere nicht von der Reihenfolge der Polynomdivisionen abhängt. Eine Gröbnerbasis kann mit Hilfe des Buchberger-Algorithmus berechnet werden.

(a) Seien $f = x^2y + xy^2 + y^2$, $f_1 = y^2 - 1$, $f_2 = xy - 1$. Reduzieren Sie f bezüglich $\{f_1, f_2\}$. Welches r bekommen Sie? Welches r ergibt sich, wenn Sie f_1 und f_2 vertauschen?

(b) Implementieren Sie den Buchberger-Algorithmus (siehe entsprechendes Vorlesungsbeispiel) in einer Funktion `GBasis`. Sie können dazu die Funktion `SPolynomial` aus der Datei SPolynomial.m von der Webseite der Vorlesung verwenden.

(c) Berechnen Sie Gröbnerbasen für die folgenden Beispiele:

   a) $f_1 = y^2 - 1, f_2 = xy - 1,$

   b) $f_1 = x^3 - 2xy, f_2 = x^2y - 2y^2 + x,$

   c) $f_1 = 3x - 6y - 2z, f_2 = 2x - 4y + 4w, f_3 = x - 2y - z - w \,.$

(d) M ist genau dann eine Gröbnerbasis, wenn für alle Paare $g_1, g_2 \in M$ das S-Polynom $S(g_1, g_2)$ unter M auf 0 reduziert wird. Testen Sie damit ihre Ergebnisse.

(e) Zwei Gröbnerbasen G_1, G_2 sind äquivalent, wenn jedes Element von G_1 unter G_2 auf 0 reduziert wird, und umgekehrt. Überprüfen Sie damit die Äquivalenz Ihrer Gröbnerbasen mit der Ausgabe von `GroebnerBasis`.

Hinweise:

- Hilfreiche MATHEMATICA-Befehle: `Subsets`, `PolynomialReduce`, `Module`, `Map`, `Join`, `DeleteDuplicates`