Zusammenfassung vom 19.04.2024

Numerische Integration: Gauss-Legendre Integration

- zu integrierende Funktion wird durch ein Polynom sehr hoher Ordnung approximiert
- durch geschickte Wahl der Stützstellen (Nullstellen eines orthogonalen Polynoms)
 findet man, dass dieses Integral exakt integriert werden kann

$$\int_{a}^{b} dx \ w(x)f(x) \approx \int_{a}^{b} dx \ w(x)p(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \omega_{i} p\left(x_{i}\right) \quad \forall \ p \in \Pi_{2n-1}$$

die Gewichte sind hier alle positiv

4. Gewöhnliche Differentialgleichungen

Differentialgleichungen (DGL) sind Basis vieler physikalischer Probleme. Oft tauchen auch **gewöhnliche DGL** auf (beispielsweise die Bewegungsgleichungen in der Mechanik)

Wir betrachten zunächst DGL einer Variable (=gewöhnliche DGL).

Die Variable werden wir oft als "Zeit" t bezeichnen.

Typisch sind zwei Arten von Problemstellungen:

- Anfangswertproblem: der Funktionswert ist zu einem bestimmten "Zeitpunkt" to gegeben und die DGL beschreibt die Veränderung der Funktion ausgehend von diesem Zeitpunkt.
- Randwertproblem: Funktionswerte sind teilweise zu verschiedenen Zeiten vorgegeben und eine Lösung soll diese Randbedingungen erfüllen.

Wir betrachten zunächst das Anfangswertproblem.

Wir nehmen ein **System von DGL** erster Ordnung an.

$$\dot{\mathbf{y}}(t) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \ \mathbf{y}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$$

 $\mathbf{y}(t), \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)), \dots$ sind dabei vektorwertige Ausdrücke

Eine **DGL höherer Ordnung** lässt sich als System aus **DGL erster Ordnung** schreiben, z.B.

$$\ddot{y}(t) + a(t) \dot{y}(t) + b(t)y(t) + c(t) = 0$$

lässt sich mit den Definitionen $y^{(1)}(t) \equiv y(t)$ und $y^{(2)}(t) \equiv \dot{y}(t)$ als

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{y}^{(1)}(t) \\ \dot{y}^{(2)}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^{(2)}(t) \\ -a(t)y^{(2)}(t) - b(t)y^{(1)}(t) - c(t) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} f^{(1)}\left(t, y^{(1)}(t), y^{(2)}(t)\right) \\ f^{(2)}\left(t, y^{(1)}(t), y^{(2)}(t)\right) \end{pmatrix} \equiv \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$$

schreiben.

D.h. das es genügt sich Systeme aus DGL erster Ordnung anzusehen.

Wir geben außer der DGL auch die Anfangsbedingung $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ vor.

Gesucht ist $\mathbf{y}(t)$ auf dem Intervall [a,b] mit $t_0 \in [a,b]$

Wir führen äquidistante Stützstellen $t_j = t_0 + j \ h \ \text{mit} \ j = 0, \dots, N-1 \ , \ t_0 = a \ \text{und}$ $h = \frac{b-a}{N-1} \ \text{ein}.$ Wir möchten eine Näherung \mathbf{y}_n an den Funktionswert $\mathbf{y}(t_n)$ bestimmen.

Formal erhält man den Funktionswert $\mathbf{y}(t_{n+1})$ im Schritt n+1 durch Integration

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \ \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$$

Somit wird die Differentialgleichung in eine äquivalente Integralgleichung überführt.

Aber $\mathbf{y}(t)$ ist vor Lösung des Problems nicht bekannt!

Wir können trotzdem eine mehrdimensionale Taylor-Entwicklung zur Approximation der Funktion \mathbf{f} um ein festes (t_n, \mathbf{y}_n) machen.

Dazu betrachten wir für die Komponente μ vom Vektor \mathbf{f} die Funktion $f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t))$, wobei $\mathbf{y}(t)$ die Lösung der DGL ist.

Wir entwickeln $f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t))$ um t_n :

$$f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) = f^{(\mu)}(t_n, \mathbf{y}(t_n)) + (t - t_n) \left. \frac{d}{dt} f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \right|_{t = t_n} + O(h^2)$$

Wir führen Indizes ein, die die Funktionsauswertungen abkürzen -z.B. für den ersten Term

$$f^{(\mu)}(t_n, \mathbf{y}(t_n)) \equiv f_n^{(\mu)}$$

Die totale Ableitung erfordert dann partielle Ableitungen:

$$\frac{d}{dt}f^{(\mu)}(t,\mathbf{y}(t))\Big|_{t=t_n} = \underbrace{(\partial_t f^{(\mu)})(t,\mathbf{y}(t))\Big|_{t=t_n}}_{\partial_t f^{(\mu)}_n} + \underbrace{(\partial_\nu f^{(\mu)})(t_n,\mathbf{y}(t_n))}_{\partial_\nu f^{(\mu)}_n} \underbrace{(\partial_t y^{(\nu)})(t)\Big|_{t=t_n}}_{f^{(\nu)}_n}$$

$$= \partial_t f_n^{(\mu)} + \left(\partial_\nu f_n^{(\mu)}\right) f_n^{(\nu)}$$

Wir nehmen die Summenkonvention für doppelte Indizes der partiellen Ableitungen an (ν) in der Gleichung oben)

In der zur DGL äquivalenten Integralgleichung kann dadurch der Integrand entwickelt werden:

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \ f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t))$$

$$= y_n^{(\mu)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \ \left[f_n^{(\mu)} + (t - t_n) \left(\partial_t f_n^{(\mu)} + \left(\partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) \ f_n^{(\nu)} \right) + O(h^2) \right]$$

$$= y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + \frac{h^2}{2} \left(\partial_t f_n^{(\mu)} + \left(\partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) f_n^{(\nu)} \right) + O(h^3)$$

Einsteinsche Summenkonvention!

Dann sehen wir, dass die einfachste Näherung nur Terme bis zur Ordnung $O(h^2)$ erfordert

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + O(h^2)$$

Auf der Basis erhält man das **Euler-Cauchy Verfahren** zur Lösung einer DGL und wir können unseren ersten Löser für gewöhnliche DGL implementieren.

Das **Euler-Cauchy** Verfahren:

Wir wollen die Lösung der DGL

$$\dot{y}(t) = -t \ y(t) \equiv f(t)$$

finden, wobei die Anfangsbedingung als

$$y(t_0 = 0) = y_0 = 1$$

gegeben ist. Dann ist $f_0 = -t_0$ $y_0 = 0$.

Im ersten Schritt berechnen wir

$$y_1 = y_0 + h f_0$$

wobei y_0 und f_0 bekannt sind. Dann haben wir y_1 (= 1) und f_1 (= -h), aus denen wir y_2 und f_2 in dem nächsten Schritt berechnen, und so weiter.

```
/* Datei: beispiel-4.1.c
                          Datum: 23.4.2012 */
#include<stdio.h>
                                 Implementierung des Euler-Cauchy Verfahrens
#include<stdlib.h>
#include<math.h>
                                1. Teil: rechte Seite der DGL wird als C Funktion
#include<float.h>
                                   zur Verfügung gestellt.
#include<limits.h>
/* Routine, die rechte Seite der Dgl definiert.
   neg: Anzahl der Gleichungen
  t : "Zeit" zur der rechte Seite benoetigt ist
  y : Loesung y zu dieser "Zeit" (Feld der Laenge neq)
  f : Ergebnis fuer die rechte Seite (Ausgabe) (Feld der Laenge neq)
*/
void derhs(int neq,double t,double *y,double *f)
                                                       hat neg Komponenten
                                                       ist abhängig von t
  /* sicherstellen, dass Anzahl der Gleichungssystem wi
  if(neq!=1)
                                                       hängt von neq Komponenten y ab
                                                       wird als Feld zurückgegeben
     printf("neq passt nicht!\n");
     abort();
  /* es wird angenommen, dass die aufrufende Funktion den Speicherplatz f
    bereitstellt
    hier dy/dt = -t * y(t) */
 f[0]=-t*y[0];
                                               hier: y'(t) = -t y(t) (eine Komponente)
}
```

```
/* Schritt nach dem Euler-Verfahren
                                     2. Teil: Schritt nach dem Euler-Cauchy Verfahren
   neg: Anzahl der Gleichungen
      : Schrittweite
     : "Zeit" beim Start
                                          "euler" startet mit y bei t und führt Schritt
     : Loesung bei t , (Aufruf)
          Loesung bei t+h, (Rueckgabe)
                                          nach t+h durch.
          Feld der Laenge neg
     : Hilfsfeld der Laenge neg
   derhs: Zeiger auf Funktion, die rechte Seite bestimmt
*/
void euler(int neq, double h, double t, double *y, double *f,
           void (*derhs) (int, double ,double *, double*))
  int i;
  /* rechte Seite bestimmen f(t,y(t)) und bei f speichern */
  (*derhs)(neq,t,y,f);
  /* Schritt einfaches Eulerverfahren:
                                                   y_{n+1}^{\mu} = y_n^{\mu} + h f_n^{\mu} + \mathcal{O}(h^2)
      y(t+h) = y(t) + h * f(t,y(t)) */
  for(i=0;i<neq;i++)
      y[i]+=h*f[i];
```

Computerphysik SS 2024

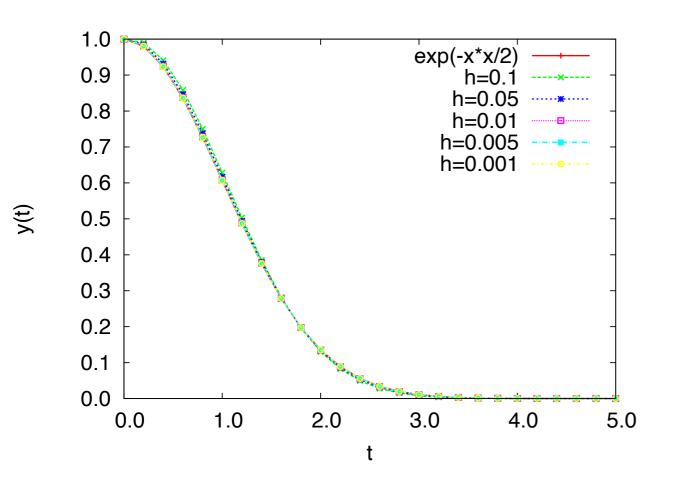
free(y); free(f); }

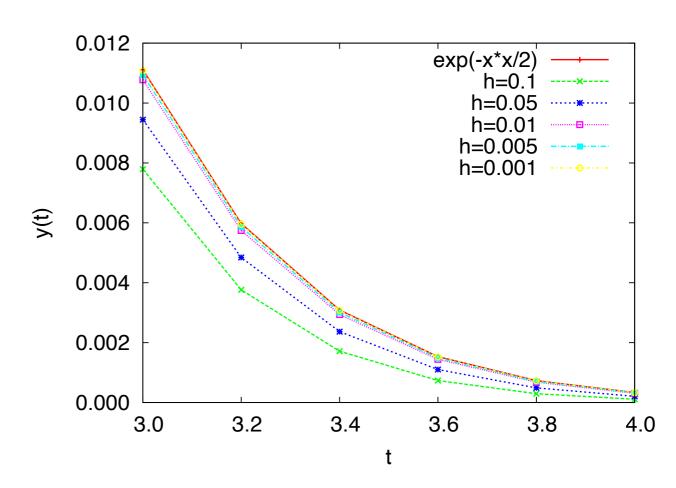
```
int main()
                                                     3. Teil: Hauptprogramm mit Ausgabe
 double h,t0,y0,tend,tstep; /* Schrittweite, startpunkt, Startwert Endpunkt, Schritt fuer Ausgabe */
 int neq=1;
                           /* feste Vorgabe der Anzahl der Gleichungen */
 double exact, diff; /* Variablen, um Ergebnis zu speichern und vergleichen*/
                                                                              Deklarationen
 double *y,*f;
               /* Zeiger auf Speicherplaetze, die double enthalten */
 double t,tprint,eps=1.0E-4;
 /* Eingabe der Parameter */
                                                          Eingabe der Startwerte und Zeitpunkte
 printf("Bitte geben Sie h,t0,y0,tend und tstep ein: \n");
 scanf(" %le %le %le %le",&h,&t0,&y0,&tend,&tstep);
                                                          für Ausgabe der Funktion
 y=malloc(sizeof(double)*neq); /* malloc reserviert Speicher fuer Feld mit y Werten und Hilfsfeld */
 f=malloc(sizeof(double)*nea);
                                                                     Speicher für Zwischenwerte
 printf("\n %20s %20s %20s %20s \n","t","exact","dgl","diff");
                                                                     Schleife durchläuft alle "Zeiten"
 y[0]=y0;
 tprint=t0;
                                                                     in Schritten von h
 for(t=t0;t<=tend;t+=h)</pre>
   { if(t-tprint>=-eps) /* Naechsten Ausgabepunkt erreicht?*/
       { exact=exp(-t*t*0.5);
                                     /* known exact value */
                                                                          Ausgabe gewünscht?
          diff=fabs(exact-y[0])/exact; /* and rel. error */
         printf(" \%20.5le \%20.5le \%20.5le \%20.5le \n",t,exact,y[0],diff);
         tprint+=tstep; /* Ausgabe und naechsten Punkt bestimmen */
     /* Dal.schritt ausfuehren */
     euler(neq,h,t,y,f,&(derhs));
```

Führe euler Schritt aus

SS 2024 Computerphysik 11

Welche Genauigkeiten erhält man mit dem Euler-Cauchy Verfahren?





- für unser Beispiel sind die Ergebnisse generell gut
- beachte Lösung bei **großen** *t* und die relativ schlechte Genauigkeit
- Konvergenz für verschiedene h = 0.1,...,0.001
- welche Genauigkeiten ergeben sich bei höheren Ordnungen: Runge-Kutta Verfahren
- betrachten später auch noch Stabilität der Methode

Ausgangspunkt ist wieder das Integral $\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \int_{t_n}^{\iota_{n+1}} dt \ \mathbf{f}(t,\mathbf{y}(t))$

Durch Entwicklung des Integranden um $t_{n+\frac{1}{2}} \equiv t_n + \frac{h}{2}$ (*Mittelpunkt!*) findet man

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dt \left[f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + (t - t_{n+\frac{1}{2}}) \frac{d}{dt} f^{(\mu)}(t, \mathbf{y}(t)) \Big|_{t=t_{n+\frac{1}{2}}} + O(h^2) \right]$$

$$= y_n^{(\mu)} + h f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} + O(h^3)$$

$$f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} = f^{(\mu)} \left(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_{n+\frac{1}{2}} \right) \approx f^{(\mu)} \left(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y} \left(t_{n+\frac{1}{2}} \right) \right)$$

Der Term $O(h^2)$ fällt wegen der symmetrischen Integrationsgrenze heraus!

Nun brauchen wir $f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)}$ nur bis zur Ordnung O(h) zu kennen, um das Integral bis zur

Ordnung $O(h^2)$ zu erhalten. Dafür reicht uns ein halber Schritt mit Euler-Cauchy.

Mit

$$y_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + \frac{h}{2} f^{(\mu)}(t_n, \mathbf{y}_n) + O(h^2) \equiv y_n^{(\mu)} + \frac{k^{(\mu)}}{2} + O(h^2)$$

erhält man dann

$$f_{n+\frac{1}{2}}^{(\mu)} = f^{(\mu)}(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_{n+\frac{1}{2}}) = f^{(\mu)}(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k}}{2}) + O(h^2)$$

SS 2024 Computerphysik

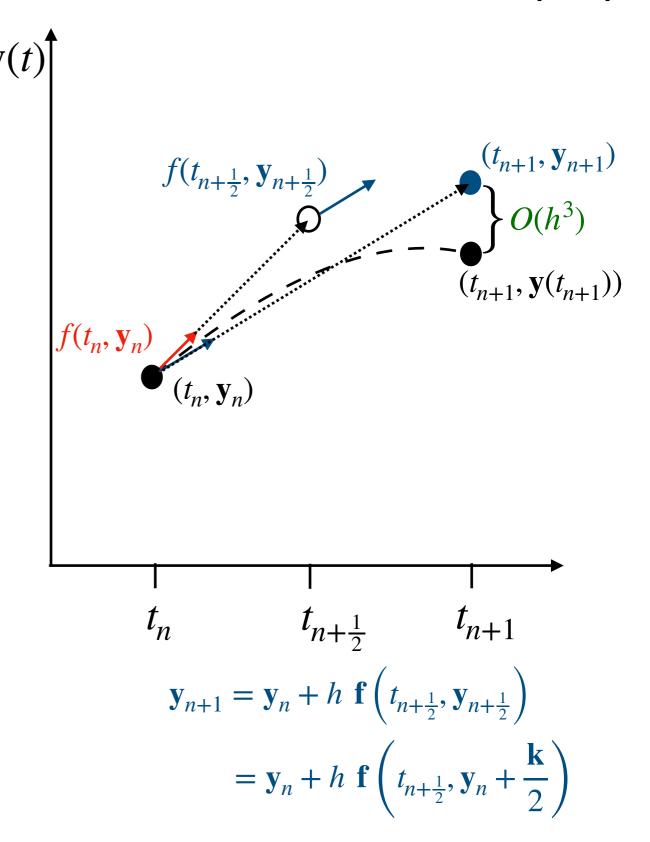
Euler-Cauchy-Verfahren

$\mathbf{y}(t)$ $(t_{n+1},\mathbf{y}(t_{n+1}))$ $f(t_n, \mathbf{y}_n)$

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \ \mathbf{f}(t_n, \mathbf{y}_n)$$

 t_{n+1}

verbessertes Euler-Verfahren (RK2)



Eingesetzt ist das Integral findet man damit das

Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung (verbessertes Euler-Verfahren)

$$\mathbf{k} = h \ \mathbf{f} \left(t_n, \mathbf{y}_n \right) = h \ \mathbf{f}_n$$

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + h \ f^{(\mu)} \left(t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k}}{2} \right) + O \left(h^3 \right)$$

Uberprüfen kann man die Ordnung durch den Vergleich mit der allgemeinen Taylor-Entwicklung um (t_n, y_n) . Für das Runge-Kutta Verfahren findet man

$$y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + h \left(\frac{h}{2} \partial_t f_n^{(\mu)} + \left(\partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) \frac{k^{(\nu)}}{2} \right) + O(h^3)$$

$$= y_n^{(\mu)} + h f_n^{(\mu)} + \frac{h^2}{2} \left(\partial_t f_n^{(\mu)} + \left(\partial_\nu f_n^{(\mu)} \right) f_n^{(\nu)} \right) + O(h^3)$$

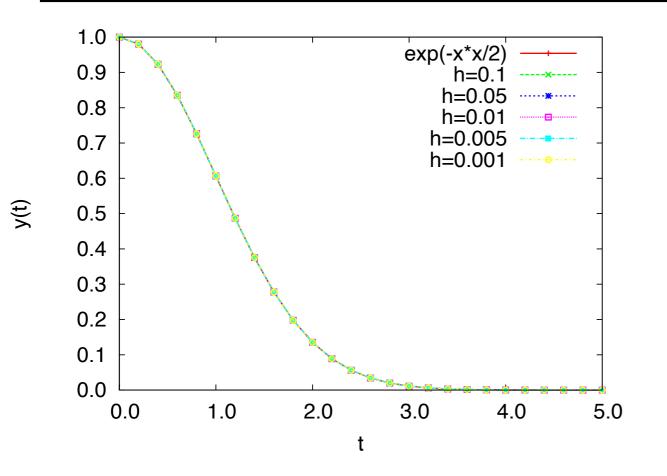
Das stimmt mit dem allgemeinen Ausdruck bis zur Ordnung $O(h^2)$ überein.

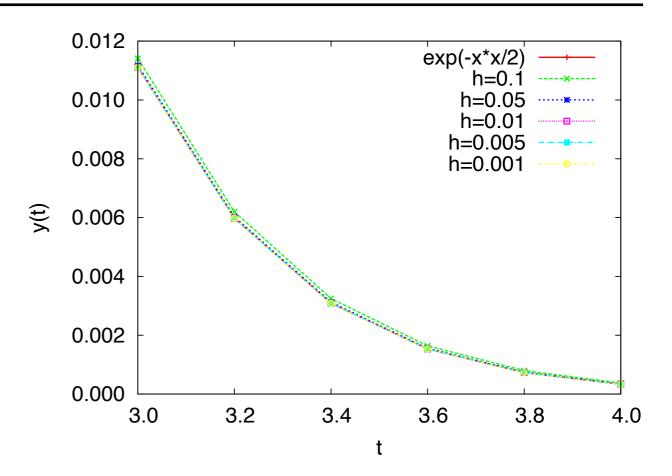


Schritt nach dem Runge-Kutta Verfahren 2. Ordnung

```
/* Datei: beispiel-4.2.c Datum: 24.4.2012 */
/* ... siehe beispiel-4.1.c */
/* Schritt nach dem Runge-Kutta-Verfahren 2. Ordnung, Mittelpunkt oder modifiziertes Euler-Verfahren
   neq: Anzahl der Gleichungen
                                                      "rkstep" startet mit y bei t und führt Schritt
   h : Schrittweite
     : "Zeit" beim Start
                                                      nach t+h durch
     : Loesung bei t , (Aufruf)
                                                      f und k sind Hilfsfelder
          Loesung bei t+h, (Rueckgabe)
          Feld der Laenge neg
     : Hilfsfeld der Laenge neg
   k : Hilfsfeld der Laenge neg
   derhs : Zeiger auf Funktion, die rechte Seite bestimmt
void rkstep(int neq, double h, double t, double *y,double *f,double *k,
              void (*derhs) (int, double ,double *, double*))
{ int i;
  (*derhs)(neq,t,y,k); /* rechte Seite bestimmen f(t,y(t)) und bei k speichern */ \mathbf{k} = h \ \mathbf{f} \left( t_n, \mathbf{y}_n \right) = h \ \mathbf{f}_n
                                /* k verwenden fuer neues Argument von f k = y_n + k/2 */
  for(i=0;i<neq;i++)
      k[i]=0.5*h*k[i]+y[i];
  (*derhs)(neq,t+0.5*h,k,f); /* rechte Seite bestimmen f(t+h/2,y(t)+k/2) und bei f speichern */
  for(i=0;i<neq;i++) /* Schritt modifiziertes Eulerverfahren: y(t+h) = y(t) + h * f(t+h/2,y(t)+k/2) */
      y[i]+=h*f[i];
                                                   y_{n+1}^{(\mu)} = y_n^{(\mu)} + h f^{(\mu)} \left( t_{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{y}_n + \frac{\mathbf{k}}{2} \right) + O(h^3)
```

```
int main()
                                       Hauptprogramm mit Ausgabe fast identisch
{ ...
                  /* Zeiger auf zum Euler-Cauchy Verfahren
  double *y,*f,*k;
  /* malloc reserviert Speicher fuer Feld mit y Werten und Hilfsfeld */
  y=malloc(sizeof(double)*neq);
  k=malloc(sizeof(double)*neq);
  f=malloc(sizeof(double)*neq);
  for(t=t0;t<=tend;t+=h)</pre>
     exact=exp(-t*t*0.5);
                           /* known exact value */
     diff=fabs(exact-y[0])/exact; /* and rel. error */
     if(t-tprint>=-eps) /* Naechsten Ausgabepunkt erreicht?*/
   {
     printf(" %20.5le %20.5le %20.5le %20.5le \n",t,exact,y[0],diff);
     tprint+=tstep; /* Ausgabe und naechsten Punkt bestimmen */
     /* Dql.schritt ausfuehren */
                                         wende hier Runge-Kutta 2. Ordnung an
     rkstep(neq,h,t,y,f,k,&(derhs));
   }
 free(k); free(y); free(f);
/* Ergebnis: Bitte geben Sie h,t0,y0,tend und tstep ein:
0.01 0.0 1.0 4.0 1.0
                                                                               diff
                                     exact
                                                           dql
                               1.00000e+00
           0.00000e+00
                                                   1.00000e+00
                                                                        0.00000e+00
                               6.06531e-01
                                                   6.06526e-01
                                                                        8.39207e-06
           1.00000e+00
           2.00000e+00
                               1.35335e-01
                                                   1.35338e-01
                                                                        1.67996e-05
                                                   1.11115e-02
                                                                        2.28885e-04
           3.00000e+00
                               1.11090e-02
                                                                        8.87585e-04 */
           4.00000e+00
                               3.35463e-04
                                                   3.35760e-04
```





- beachte recht gute Genauigkeit bei großen t
- Konvergenz für verschiedene h = 0.1, ..., 0.001 deutlich schneller als bei Euler-Cauchy
- andere Wahl der Koeffizienten bei gleicher Ordnung ist möglich
- und es gibt höherer Ordnungen