Die Lösung aller

(numerischen)

Probleme

Pe & Flo

24. August 2005

Zusammenfassung

Dies ist eine kleine Zusammenstellung, welche bei der Prüfung der Numerischen Methoden im Studiengang Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart dienen soll.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort:

Der Aufruf von $\mathbf{f(x)}$ in den Struktogrammen steht für den Aufruf einer bereits definierten Funktion oder ist durch den Funktionsterm zu ersetzten. Im ersten Fall muss die Variable f am Anfang des Stuktogramms deklariert $\boxed{REAL :: f}$ werden und beim Aufruf ist an die Querstriche $\boxed{|y = f(x)|}$ zu denken.

1 Integration

1.1 Übersicht:

- Quadraturformeln mit äquistanten Stützstellen
  - Abgeschlossene Newton-Cotes-Formeln
    (Äußere Stützstellen $\triangleq$ Intervallgrenzen)
    Sehnen-Trapez
    Simpson
    3/8 - Regel
    die äußersten Stützstellen fallen mit den Intervallgrenzen zusammen: $x_0 = a, x_{n-1} = b$; ihre Streifenzahl ist demnach $s = n - 1$, die Streifenbreite $h = (b - a)/(n - 1)$
  - Offene Newton-Cotes Formeln
    (Intervallgrenzen nicht als Stützstellen benutzt)
    Rechteck-Regel
    Intervallgrenzen werden nicht als Stützstellen benutzt: $x_0 = a + h, x_{n-1} = b - h$. Für sie ist $s = n + 1, h = (b - a)/(n + 1)$.
  - Mac-Laurin Formeln
    Stützstellen in der Mitte der Streifen, sodaß $s = n, h = (b - a)/n$ und $x_0 = a + h/2, x_{n-1} = b - h/2$.

Familie	E	n	s		I	*Name*	$\|R\|$
Abgeschlossene	1.	2	1	$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$	$= \frac{h}{2}(f_0 + f_1)$	*'Sehnentrapez'*	$\frac{1}{12}h^3 f''(\xi)$
Newton-Cotes-	3.	3	2	$\int_{x_0}^{x_2}$	$= \frac{2h}{6}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	*'Simpson'*	$\frac{1}{90}h^5 f^{IV}(\xi)$
Formeln	3.	4	3	$\int_{x_0}^{x_3}$	$= \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$	'3/8'	$\frac{3}{80}h^5 f^{IV}(\xi)$
Offene	1.	1	2	$\int_{x_0}^{x_2}$	$= 2hf_1$	*'Rechteck'*	$\frac{1}{3}h^3 f''(\xi)$
Newton-Cotes-	1.	2	3	$\int_{x_0}^{x_3}$	$= \frac{3h}{2}(f_1 + f_2)$		$\frac{3}{4}h^3 f''(\xi)$
Formeln	3.	3	4	$\int_{x_0}^{x_4}$	$= \frac{4h}{3}(2f_1 - f_2 + 2f_3)$		$\frac{14}{45}h^5 f^{IV}(\xi)$
	3.	4	5	$\int_{x_0}^{x_5}$	$= \frac{5h}{24}(11f_1 + f_2 + f_3 + 11f_4)$		$\frac{95}{144}h^5 f^{IV}(\xi)$
MacLaurin-	1.	1	1	$\int_{x_0}^{x_1}$	$= hf_{1/2}$		$\frac{1}{24}h^3 f''(\xi)$
Formeln	1.	2	2	$\int_{x_0}^{x_2}$	$= \frac{2h}{2}(f_{1/2} + f_{3/2})$		$\frac{1}{12}h^3 f''(\xi)$
	3.	3	3	$\int_{x_0}^{x_3}$	$= \frac{3h}{8}(3f_{1/2} + 2f_{3/2} + 3f_{5/2})$		$\frac{21}{640}h^5 f^{IV}(\xi)$

Tabelle 1.1. Quadraturformeln für äquidistante Stützstellen

- Gaußintegration
- Rombergverfahren

1.2 Simpson-Regel

Exaktheitsgrad 3; Stützstellen 3; Streifen 2

$$Int = \frac{2h}{6}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

summiert:

$$Int = \frac{2h}{6}\left[(f_a - f_b) + \sum_{i=0}^{k-1}(4f_{2i+1} + 2f_{2i})\right] \qquad k\text{: Anzahl der Schritte}$$

SIMPSON
REAL :: $a, b, int, h, f_o, f_1, f_2$
ÜBERNEHME a, b
h = (b - a) / 2
$f_0 = \mathbf{f(a)}$
$f_1 = \mathbf{f(a+h)}$
$f_2 = \mathbf{f(b)}$
$int = \frac{2h}{6}(f_0 + 4f_1 + f_2)$
ÜBERGEBE int

SIMPSON-SUMMIERT
REAL :: h, a, b, f, Int
REAL FELD :: $x(0...n)$
INTEGER :: k, i, j
ÜBERNEHME a, b, k
$h = (b-a)/2k$
$i = 0$
SOLANGE $i \leq 2k$
$x_i = a + hi$
$i = i + 1$
$Int = \mathbf{f(a)} - \mathbf{f(b)}$
$j = 1$
SOLANGE $j \leq k$
$Int = Int + 4\mathbf{f}(\mathbf{x_{2j+1}}) + 2\mathbf{f}(\mathbf{x_{2j}})$
$j = j + 1$
$Int = Int \cdot (2h/6)$
ÜBERGEBE Int

Eine weitere Möglichkeit der Summierten Regel lässt sich analog zu **SUM MACLAURIN** mit Hilfe eines Unterprograms realisieren. Dies ist oft die einfachere Methode.

1.3 Sehnentrapez-Regel

Exaktheitsgrad 1; Stützstellen 2; Streifen 1

$$Int = \frac{b-a}{2}(f_0 + f_1)$$

SEHNEN-TRAPEZ
REAL :: a, b, int
ÜBERNEHME a, b, f_0, f_1
$f_0 = \mathbf{f}(\mathbf{a})$
$f_1 = \mathbf{f}(\mathbf{b})$
$int = \frac{b-a}{2}(f_0 + f_1)$
ÜBERGEBE int

$\hookrightarrow$ summierte Simpson siehe MacLaurin

1.4 3/8-Regel

Exaktheitsgrad 3; Stützstellen 4; Streifen 3

einfach:

$$Int = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

summiert:

$$Int = \frac{3h}{8}\left[\mathbf{f(a)} - \mathbf{f(b)} + \sum_{j=0}^{k-1}(3\mathbf{f(x_{3j+1})} + 3\mathbf{f(x_{3j+2})} + 2\mathbf{f(x_{3j+3})})\right]$$

Benötigte Auswertungen bei k-Summationen $3k + 1$

3/8 - SUMMIERT

REAL :: h, a, b, f, Int

REAL FELD :: $x(0...3k)$

INTEGER :: k, i, j

ÜBERNEHME a, b, k

$h = (b - a)/3k$

$i = 0$

SOLANGE $i \leq 3k$

  $x_i = a + hi$

  $i = i + 1$

$Int = \mathbf{f(a)} - \mathbf{f(b)}$

$j = 1$

SOLANGE $j \leq k$

  $Int = Int + 3\mathbf{f(x_{3j-2})} + 3\mathbf{f(x_{3j-1})} + 2\mathbf{f(x_{3j})}$

  $j = j + 1$

$Int = Int \cdot (3h/8)$

ÜBERGEBE Int

1.5 Rechteckregel

RECHTECK REGEL
REAL :: h, a, b, f, x, Q
INTEGER :: i, n
ÜBERNEHME a, b, n
$Q = 0; \quad i = 0; \quad x = a$
$h = (b - a)/n$
SOLANGE $i < n$
$Q = Q + \mathbf{f}(\mathbf{x})$
$x = x + h$
$i = i + 1$
$Q = h \cdot Int$
ÜBERGEBE Q

1.6 MacLaurin

$$Int = h - f_{1/2} \qquad \text{E:1 n:1 s:1}$$

$$Int = \frac{2h}{2}(f_{1/2} + f_{3/2}) \qquad \text{E:1 n:2 s:2}$$

$$Int = \frac{3h}{8}(3f_{1/2} + 2f_{3/2} + 3f_{5/2}) \qquad \text{E:3 n:3 s:3}$$

- legt Stützstellen in die Mitte der Streifen / Intervalle (Gruppe: Quadraturformeln)
- Polynome vom Grad > 6 neigen zu Oszillationen

MACLAURIN (3.Ordnung)
REAL :: $h, a, b, f_{1/2}, f_{3/2}, f_{5/2}, Int$
INTEGER :: n
ÜBERNEHME a, b
$h = (b - a)/n$
$f_{1/2} = \star$ # aus Aufgabenstellung
$f_{3/2} = \star$
$f_{5/2} = \star$
$Int = \frac{3h}{8}(3f_{1/2} + 2f_{3/2} + 3f_{5/2})$
ÜBERGEBE Int

SUM MACLAURIN
REAL :: $a, b, h, Anfang, Ende$
REAL :: $Q, Q*$
INTEGER :: i, n
ÜBERNEHME $Anfang, Ende, n$
$h = (Ende - Anfang)/n$
$Q = 0; i = 1$
SOLANGE $i \leq n$
$a = Anfang + h(i - 1)$
$b = a + h$
CALL MACLAURIN$(a, b, Q*)$
[ÜG: a, b ÜN: $Q*$]
$Q = Q + Q*$
$i = i + 1$
ÜBERGEBE Q

1.7 Gauß

n	$\mathbf{x_i}$	$\mathbf{a_i}$	$\mathbf{\vert R \vert}$
1	0	2	$\frac{1}{3} f''(\xi)$
2	$\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$	1	$\frac{1}{135} f^{IV}(\xi)$
3	$0; \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$	$\frac{8}{9}; \frac{5}{9}$	$\frac{1}{15750} f^{VI}(\xi)$
4	$\pm 0,86113631; \pm 0,33998104$	$0,34785485; 0,65214515$	$\frac{1}{3472875} f^{VIII}(\xi)$
5	$0; \pm 0,9061785; \pm 0,53846931$	$\frac{128}{225}; 0,23692689; 0,47862867$	$\frac{1}{1237732650} f^{X}(\xi)$

$$Q = \sum_{i=0}^{n-1} a_i f_i$$

Transformation:

$$T : [-1, 1] \to [a, b]$$
$$z \to x$$
$$\Rightarrow x = \frac{b-a}{2} z + \frac{b+a}{2}$$

GAUSS

REAL :: $x_1, x_2, .., x_n, a, b, Q, f_1, .., f_n$

ÜBERNEHME a, b

$x_1 = \star;\ x_2 = \star$ # *siehe Tabelle*

...

$f_1 = \mathbf{f(x_1)}$

$f_2 = \mathbf{f(x_2)}$

...

$Q = \frac{b+a}{2}(a_1 f_1 + ... + a_n f_n)$
a_i *aus Tabelle*

ÜBERGEBE Q

SUM_GAUSS

REAL :: $Q, Q*, a, b, h, a_0, a_1$

INTEGER :: n, i

ÜBERNEHME a, b, n

$h = (b-a)/n$ # *Schrittweite*

$i = 1;\ Q* = 0$

SOLANGE $i \leq n$

- $a_0 = a + (i-1)h,\ a_1 = a + ih$
- CALL GAUSS(a_0, a_1, Q)
- [ÜG: a_0, a_1 ÜN: Q]
- $Q* = Q * + Q$
- $i = i + 1$

ÜBERGEBE $Q*$

1.8 Romberg

($\rightsquigarrow$ S.33)
Extrapolationsprinzip auf aufsummierte Sehnen-Trapez-Regel angewandt

ROMBERG

REAL :: a, b, h, f, q

REAL FELD :: $T(0..N, 0..N)$

INTEGER :: i, n, m, N, p

ÜBERNEHME a, b, N

$T_{1,1} = (b-a) \cdot \big(\mathbf{f(a)} + \mathbf{f(b)}\big)/2$

$n = 2$

SOLANGE $n \leq N$

- $h = (b-a)/2^{n-1}$
- $q = 0; i = 1$
- SOLANGE $i \leq 2^{n-1} - 1$
  - $q = q + \mathbf{f(a+ih)}$
  - $i = i + 2$
- $T_{n,1} = T_{n-1,1}/2 + hq$
- $p = 4; m = 1$
- SOLANGE $m \leq n$
  - $T_{n,m} = T_{n,m-1} + (T_{n,m-1} - T_{n-1,m-1})/(p-1)$
  - $p = 4p; m = m + 1$

ÜBERGEBE $T_{N,N}$

2 Anfangswertprobleme

umschreiben von DGL 2. Ordnung in Systeme:

$$y = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix}$$

$$y' = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \end{pmatrix}$$

Bsp: $y'' = 3y' - 5y + 3$

$$y' = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y' \\ y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v \\ 3y' - 5y + 3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} v \\ 3u' - 5u + 3 \end{pmatrix}$$

2.1 Übersicht AWP

- Einschrittverfahren
  - Euler-Cauchy
  - Heun
  - Runge-Kutta
- Extrapolationsverfahren

- Mehrschrittverfahren
  - Simpson
  - Adams-Bashfort

2.2 Euler-Cauchy-Verfahren

$$Y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i) \quad \text{Euler-Cauchy / Streckenzug-Formel}$$

– Einfache Integrationsformel, ungenau, Fehler werden mitgeschleppt

– Idee: ähnlich Rechteckregel

– Einschrittverfahren, ungenau

EULER_CAUCHY
REAL :: $f, x, y, x_0, y_0, x_{Ende}, h$
INTEGER :: $i, Schritte$
ÜBERNEHME x_0, y_0, x_{Ende}
$h = (x_{Ende} - x_0)/Schritte$
$x = x_0;\; y = y_0;\; i = 0;$
ÜBERGEBE x, y
SOLANGE $i \leq Schritte$
$x = x + h$
$y = y(1 - h)$
$i = i + 1$
ÜBERGEBE x, y

2.3 Verfahren von Heun

$$\begin{aligned}
\tilde{y}_{i+1} &= y_i + k \cdot f(x_i, y_i) \quad \text{P(Euler-Cauchy)} \\
y_{i+1} &= y_i + \frac{k}{2}\left[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})\right]
\end{aligned}$$

- Prädiktor-Korrektor Verfahren
- um 2 Größenordnungen genauer als Euler-Cauchy
- Iterationsverfahren
- Einschrittverfahren, ungenau

HEUN

REAL :: $h, y_0, y_1, \tilde{y}, y, x$

INTEGER :: n, i

ÜBERNEHME n, y_0

$h = 1/n$ # *Schrittweite*

$i = 1;\ x_1 = 0;\ y_1 = y_0$

SOLANGE $i \leq n$

- ÜBERGEBE y, x
- $\tilde{y} = y + h \cdot \mathbf{f(x,y)}$ # *Prädiktor*
- $y = y + \dfrac{h}{2}\left[\mathbf{f(x,y)} + \mathbf{f(x+h,\tilde{y})}\right]$ # *Korrektor*
- $x = x + h$
- $i = i + 1$

ÜBERGEBE y, x

Algorithmus: Schrittweitensteuerung

1. Berechne y_{i+1}
2. $\kappa_{i+1} = h|f_y(x_{i+1}, y_{i+1})|$
3. Mittle: $\kappa := \frac{1}{2}(\kappa_i + \kappa_{i+1})$
4. Ist $\kappa \geq 0.2 \;\Rightarrow\; h := \frac{1}{2}h$ und letzten Schritt wiederholen.
   Ist $\kappa \leq 0.05 \;\Rightarrow\; h := 2h$ und weiterrechnen.
   Ist $0.05 < \kappa < 0.2 \;\Rightarrow$ Schrittweite beibehalten und weiterrechnen.

Schrittweitensteuerung als Unterprogramm

Real: $x, y, h, \kappa_{\text{alt}}, \kappa, f_y, fy$

Übernehme x, y, h und κ_{alt}

$fy = f_y(x, y)$

- $\kappa = \frac{1}{2}(\kappa_{\text{alt}} + h|fy|)$
- Falls κ

$\geq 0,2$	$\kappa \leq 0,05$	sonst
$h = \frac{1}{2}h$	$h = 2h$	Tu nichts

bis $\kappa < 0,2$

Gib h und κ zurück

2.4 Runge-Kutta Verfahren

4. Ordnung / klassische Variante

$$k_1 = f(x_i, y_i) \qquad k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_2)$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1) \qquad k_4 = f(x_i + h, y_i + h \cdot k_3)$$

$$y_{i+1} = \frac{h}{6}\Big(k_1 + 2\,(k_2 + k_3) + k_4\Big) + y_i$$

- Einschrittverfahren (selbsstartend $\oplus$)
- Simpson-Regel (Newton-Cotes) liegt dem Verfahren zu Grunde
- gut für Schrittweitensteuerung geeignet, da k_2 und k_3 an der gleichen Stelle wie die x-Koordinate ausgewertet werden. Damit kann bereits während der Zwischenschritte das Verhalten der Lösung abgelesen werden und es muss nicht einmal ein vollständiger Verfahrensschritt gegangen werden.

$\oplus$ Starre Fehlerordnung, einfache Handhabung, automatische Schrittweitensteuerung leicht möglich

$\ominus$ jeder Integrationsschritt erfordert Berechnung mehrerer Funktionswerte

RUNGE-KUTTA (4. Ordnung)

REAL :: $k_1, k_2, k_3, k_4, x, y, a, b, h$
\# a, b: *untere/obere Grenze*, n: *Schrittanzahl*

INTEGER :: n, i

ÜBERNEHME n, a, b

$h = (b - a)/n$

$x = a;\ y = \star$ \# *aus Aufgabe*

ÜBERGEBE x, y

$i = 1$

SOLANGE $i \leq n$

- $k_1 = \mathbf{f(x, y)}$
- $k_2 = \mathbf{f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} k_1)}$
- $k_3 = \mathbf{f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} k_2)}$
- $k_4 = \mathbf{f(x + h, y + h \cdot k_3)}$
- $y = \frac{h}{6}\Big(k_1 + 2 \cdot (k_2 + k_3) + k_4\Big) + y$
- $i = i + 1 \quad \bigstar$
- $x = x + h$
- ÜBERGEBE x, y

Schrittweitensteuerung:

$$\kappa = h|f_y| = 2\left|\frac{k_3 - k_2}{k_2 - k_1}\right|$$

Das Struktogramm muss im obigen an Stelle von ★ eingefügt werden.

SCHRITTWEITENKONTROLLE (für Runge-Kutta)		
REAL :: $\kappa, \kappa_{min}, \kappa_{max}$		
$\kappa = 2\big\|(k_3 - k_2)/(k_2 - k_1)\big\|$		
κ		
$< \kappa_{min}$	$> \kappa_{max}$	sonst
$h = 2h$	$h = h/2$	$i = i + 1$
$i = i + 1$	# *Schritt wird wiederholt*	

$x + h > b$	
WAHR	FALSCH
$h = b - x$ # *letzter Schritt wird angepasst*	$\varnothing$

Sinn: In Bereichen, in denen sich die Lösung stark ändert wird die Schrittweite kleiner gewählt als in Bereichen, in denen sie sich weniger stark ändert.

2. Ordnung:

a)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{2}k_1\right) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + hk_2 \end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f(x_i + h\ ,\ y_i + hk_1) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned}$$

3. Ordnung:

a)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f(x_i + h\ ,\ y_i - hk_1 + 2hk_2) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{3}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{3}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \tfrac{2h}{3}\ ,\ y_i + \tfrac{2h}{3}k_2\right) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{4}(k_1 + 3k_3) \end{aligned}$$

4. Ordnung:

a)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{3}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{3}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \tfrac{2h}{3}\ ,\ y_i - \tfrac{h}{3}k_1 + hk_2\right) \\ k_4 &= f(x_i + h\ ,\ y_i + h(k_1 - k_2 + k_3)) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{8}(k_1 + 3(k_2 + k_3) + k_4) \end{aligned}$$

b) *(klassische Variante)*

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{2}k_2\right) \\ k_4 &= f(x_i + h\ ,\ y_i + hk_3) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{6}(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4) \end{aligned}$$

c) *(Gill)*

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i = \tfrac{h}{2}(\sqrt{2} - 1)k_1 + \tfrac{h}{2}(2 - \sqrt{2})k_2\right) \\ k_4 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i - \tfrac{h}{2}\sqrt{2}k_2 + \tfrac{h}{2}(2 + \sqrt{2})k_3\right) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{6}(k_1 + (2 - \sqrt{2})k_2 + (2 + \sqrt{2})k_3 + k_4) \end{aligned}$$

5. Ordnung:

(Butcher)

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i\ ,\ y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{4}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{4}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{4}\ ,\ y_i + \tfrac{h}{8}(k_1 + k_2)\right) \\ k_4 &= f\left(x_i + \tfrac{h}{2}\ ,\ y_i - \tfrac{h}{2}k_2 + hk_3\right) \\ k_5 &= f\left(x_i + \tfrac{3h}{4}\ ,\ y_i + \tfrac{3h}{16}(k_1 + 3k_4)\right) \\ k_6 &= f(x_i + h\ ,\ y_i - \tfrac{h}{7}(3k_1 - 2k_2 - 12(k_3 - k_4) - 8k_5)) \\ \hline y_{i+1} &= y_i + \tfrac{h}{90}(7(k_1 + k_6) + 32(k_3 + k_5) + 12k_4) \end{aligned}$$

Tabelle 2.3. Gebräuchliche Varianten des Runge-Kutta-Verfahrens

2.5 Extrapolationsverfahren

$$
\begin{aligned}
h_0 &= b - a \\
y_1 &= y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0, y_0) \\
y_2 &= y_0 + h_0 \cdot f\big(\frac{a+b}{2}, y_1\big) \\
y_2 &= \frac{1}{2}\Big(y_1 + y_2 + h_0 \cdot f(b, y_2)\Big) \\
h_k &= \frac{b-a}{n_k} \\
y_1 &= y_0 + h_i \cdot f(x_0, y_0) && \text{Anlaufrechnung mit Euler} \\
y_i &= y_{i-2} + 2h_k \cdot f\big(x_{i-1}, y_{i-1}\big) && i = 2, 3 ... n_k \\
T_{k,1} &= \frac{1}{2}\Big(y_{n_k - 1} + y_{n_k} + h_k \cdot f(x_{n_k}, y_{n_k})\Big) \\
T_{k,j} &= T_{k,j-1} + \frac{T_{k,j-1} - T_{k-1,j}}{\big(\frac{h_{k-1}}{h_k}\big)^{2(j-1)} - 1}
\end{aligned}
$$

⊕ selbsstartend
keine Starre Ordnung
Vorgabe der Genauigkeit
Schrittweitensteuerung möglich

⊖ oft erheblicher Rechenaufwand pro Schritt

EXTRAPOLATION

- REAL :: a, b
- REAL FELD (0..k_{end}):: x, y, T, h
- INTEGER :: n, i, k_{end}, k # k_{end}: *Anzahl der Schritte*
- ÜBERNEHME a, b, k_{end}
- $k = 2;\ y_0 = \mathbf{f(a)};\ x_0 = a$
- $h_1 = (b - a)/2$
- SOLANGE $k \leq k_{end}$
  - $n_k = 2^k$ # *Romberg*
  - $h_k = (b - a)/n_k$
  - $y_1 = y_0 + h_k \cdot \mathbf{f(x_0, y_0)}$ # *Anlaufrechnung mit Euler*
  - $i = 2$
  - SOLANGE $i \leq n_k$
    - $y_i = y_{i-2} + 2h_k\mathbf{f(x_{i-1}, y_{i-1})}$
    - $x_i = x_{i-1} + h_k$
    - $i = i + 1$
  - $T_{1,1} = 1/2 \cdot \big(y_1 + y_2 + h_1\mathbf{f(x_2, y_2)}\big)$
  - $T_{k,1} = 1/2 \cdot \big(y_{n-1} + y_n + h_k\mathbf{f(x_n, y_n)}\big)$
  - $j = 2$
  - SOLANGE $j \leq n_k$
    - $T_{k,j} = T_{k,j-1} + \big(T_{k,j-1} - T_{k-1,j}\big)/\Big(\Big(\dfrac{h_{k-1}}{h_k}\Big)^{2(j-1)} - 1\Big)$
    - $j = j + 1$
  - $k = k + 1$
- ÜBERGEBE $x(), y()$

2.6 Simpson-Verfahren

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}\big(f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 4f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})\big)$$

- Mehrschrittverfahren (braucht Anlaufstück)
- implizites Verfahren, d.h. erfordert ein Iterationsverfahren

2.7 Adams-Bashforth mit impl. Adams Moulton

$$\tilde{y}_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\big(-f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 3f(x_i, y_i)\big) \qquad \text{A.-Bashforth (Prädiktor / explizit)}$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12}\big(-f(x_{i-1}, y_{i-1}) + 8f(x_i, y_i) + 5f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})\big) \qquad \text{A.-Moulton (Korrektor / implizit)}$$

- Prädiktor-Korrektor-Verfahren
- Mehrschrittverfahren (braucht Anlaufstück)
- Korrektorformel hat gleiche Ordnung oder eine höher

⊕ Je Integrationsschritt nur 1-2 Berechnungen von Funktionswerten erforderlich
Formeln beliebig hoher Genauigkeit

⊖ nicht selbststartend
Schrittweitensteuerung aufwendig
Änderung der Schrittweite ⟶ Neuberechnung des Anlaufstücks

- wird gern für aufwendig zu berechnende Funktionen f genommen.

ADAMS-BASHFORTH

REAL :: h, f, f_a, f_b, f_c # $a = f_{n-1}, b = f_n$, etc.

REAL FELD (0..n):: x, y

INTEGER :: n, i

ÜBERNEHME n, y_0

$i = 0$

SOLANGE $i \leq n$

- $x_i = i/n$
- $i = i + 1$

$h = x_1$

x_0, x_1, y_0: Werte aus Aufgabe

CALL Anlaufstückberechnung(x_0, x_1, y_0, y_1)

[ÜG: x_0, x_1, y_0 ÜN: y_1]

$f_a = \mathbf{f}(\mathbf{x_0}, \mathbf{y_0})$; $i = 1$

SOLANGE $i \leq n$

- $f_b = \mathbf{f}(\mathbf{x_i}, \mathbf{y_i})$
- $y_{i+1} = y_i + h/2(-f_a + 3f_b)$
- $f_c = \mathbf{f}(\mathbf{x_{i+1}}, \mathbf{y_{i+1}})$
- $y_{i+1} = y_i + h/12 \cdot (-f_a + 8f_b + 5f_c)$
- $f_a = f_b$
- $i = i + 1$

ÜBERGEBE $x(), y()$

a_{i-6}	a_{i-5}	a_{i-4}	a_{i-3}	a_{i-2}	a_{i-1}	a_i
					$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$
				$\frac{5}{12}$	$-\frac{16}{12}$	$\frac{23}{12}$
			$-\frac{9}{24}$	$\frac{37}{24}$	$-\frac{59}{24}$	$\frac{55}{24}$
		$\frac{251}{720}$	$-\frac{1274}{720}$	$\frac{2616}{720}$	$-\frac{2774}{720}$	$\frac{1901}{720}$
	$-\frac{475}{1440}$	$\frac{2877}{1440}$	$-\frac{7298}{1440}$	$\frac{9982}{1440}$	$-\frac{7923}{1440}$	$\frac{4277}{1440}$
$\frac{19087}{60480}$	$-\frac{134472}{60480}$	$\frac{407139}{60480}$	$-\frac{688256}{60480}$	$\frac{705549}{60480}$	$-\frac{447288}{60480}$	$\frac{198721}{60480}$

Tabelle 2.1. Explizite Mehrschrittverfahren (Adams-Bashforth-Verfahren)

a_{i-6}	a_{i-5}	a_{i-4}	a_{i-3}	a_{i-2}	a_{i-1}	a_i	a_{i+1}
					$-\frac{1}{12}$	$\frac{8}{12}$	$\frac{5}{12}$
				$\frac{1}{24}$	$-\frac{5}{24}$	$\frac{19}{24}$	$\frac{9}{24}$
			$-\frac{19}{720}$	$\frac{106}{720}$	$-\frac{264}{720}$	$\frac{646}{720}$	$\frac{251}{720}$
		$\frac{27}{1440}$	$-\frac{173}{1440}$	$\frac{482}{1440}$	$-\frac{798}{1440}$	$\frac{1427}{1440}$	$\frac{475}{1440}$
	$-\frac{863}{60480}$	$\frac{6312}{60480}$	$-\frac{20211}{60480}$	$\frac{37504}{60480}$	$-\frac{46461}{60480}$	$\frac{65112}{60480}$	$\frac{19087}{60480}$
$\frac{1375}{120960}$	$-\frac{11351}{120960}$	$\frac{41499}{120960}$	$-\frac{88547}{120960}$	$\frac{123133}{120960}$	$-\frac{121797}{120960}$	$\frac{139849}{60480}$	$\frac{36799}{120960}$

Tabelle 2.2. Implizite Mehrschrittverfahren (Adams-Moulton-Verfahren)

3 Randwertprobleme

3.1 Differenzenverfahren & Thomas-Alghorithmus

$$\begin{aligned} y'' &= f(x, y, y') & y(a) &= \alpha \quad y(b) = \beta \\ a_i &= \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} & \text{mit} \quad y'' &= r(x) - a(x) \cdot y - p(x) \cdot y' \\ b_i &= -\frac{2}{h^2} + a(x_i) & c_i &= \frac{1}{h^2} - \frac{p(x_i)}{2h} \end{aligned}$$

Füllen der tridiagonal Matrix

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} y_1 & y_2 & \cdots & \cdots & y_{n-1} \end{array} \\ \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & c_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} \end{pmatrix} \end{array} = \begin{pmatrix} r(x_1) - a_1 y_0 \\ r(x_2) \\ \vdots \\ r(x_{n-2}) \\ r(x_{n-1}) - c_{n-1} y_n \end{pmatrix}$$

DIFFERENZEN / THOMAS - VERFAHREN

REAL :: a, h, q

REAL FELD (0...n):: a, b, c, r, y, x

INTEGER :: n, i

ÜBERNEHME n

$x_0 = \star;\ x_n = \star$ *# aus Aufgabe*

$y_0 = \star;\ y_n = \star$ *# Randwerte aus Aufgabenstellung*

$h = (x_n - x_0)/n$

$i = 1$

SOLANGE $i \leq n - 1$ *# Füllen der Matrix*

- $a_i = \star;\ b_i = \star;\ c_i = \star$ *# siehe Formeln oben*
- $x_i = ih + x_0$
- $r_i = \star$ *# siehe oben*
- $i = i + 1$

$r_1 = r_1 - a_1 y_0$

$r_{n-1} = r_{n-1} - c_{n-1} y_n$

$i = 2$

SOLANGE $i \leq n - 1$ *# Hier beginnt der Thomas Algorithmus*

- $q = a_i / b_{i-1}$
- $b_i = b_i - q c_{i-1}$
- $r_i = r_i - q r_{i-1}$
- $i = i + 1$

$y_{n-1} = r_{n-1} / b_{n-1}$

$i = n - 2$

SOLANGE $i \geq 1$

- $y_i = (r_i - c_i y_{i+1}) / b_i$
- $i = i - 1$

ÜBERGEBE $x(), y()$

3.2 Schießverfahren

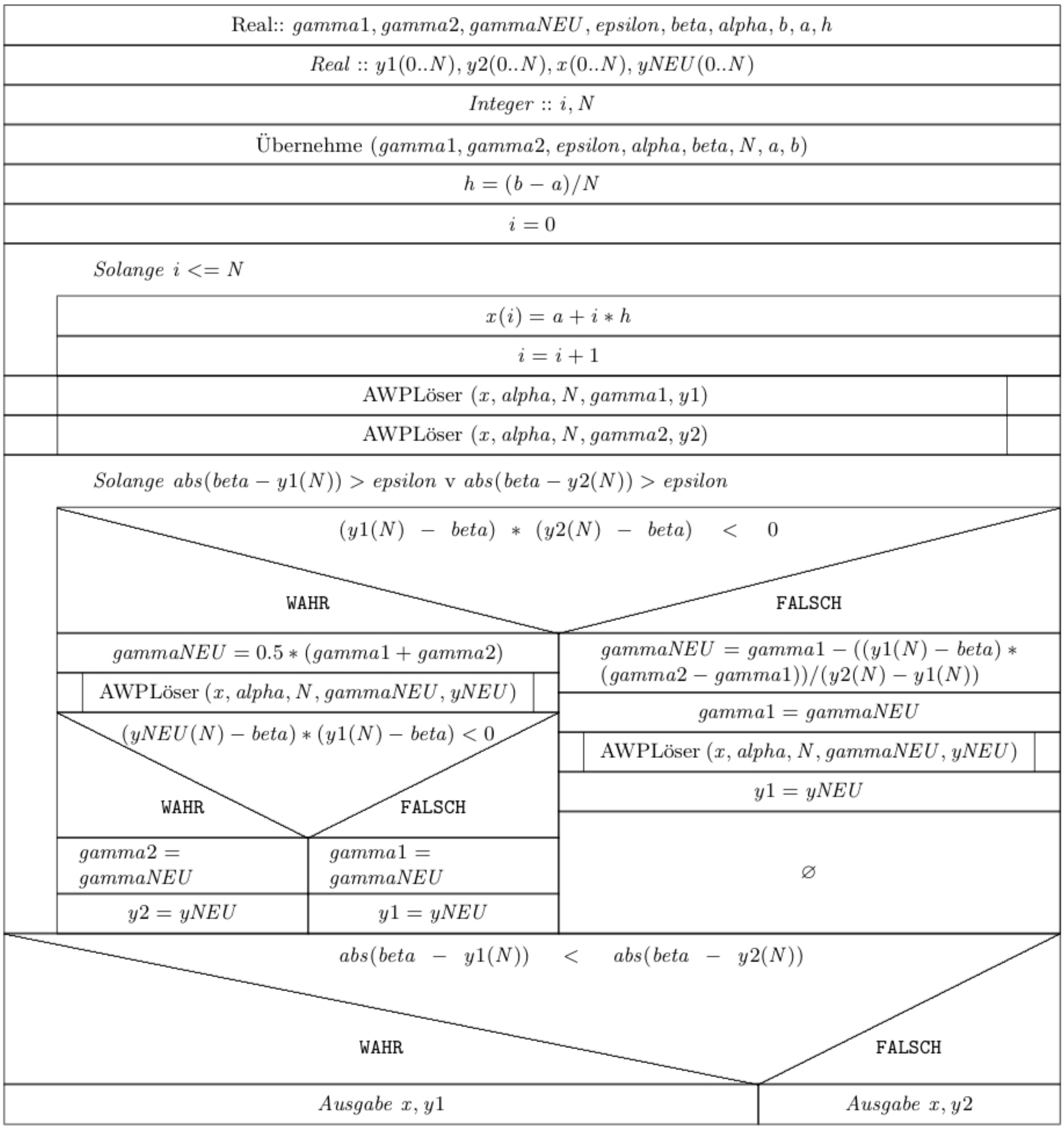
Idee: statt RWP zu lösen wird AWP gelöst.

$$\left.\begin{array}{r} y'' = f(x, y, y') \\ y(a) = \alpha \quad y(b) = \beta \end{array}\right\} \Longrightarrow \begin{array}{rl} y_1' = y_2 & \quad y_2' = f(x, y_1, y_2) \\ y_1(a) = \alpha & \quad y_2(a) = \gamma \quad (= \text{Steig}) \end{array}$$

γ wird so bestimmt, dass $y_1(b) = \beta$ wird.

SCHIEßVERFAHREN (linear, 2. Ordnung)
REAL :: $\alpha, \beta, a, b, h, k_1, k_2, Steig_1, Steig_2$
REAL FELD (0...n):: y, y^I, y^{II}, x
INTEGER :: n, i
ÜBERNEHME $a, b, \alpha, \beta, n, Steig_1, Steig_2$ # *Die beiden Steigungen sind frei wählbar*
$h = (b-a)/n$
$i = 0$
SOLANGE $i \leq n$ $x_i = a + ih$ $i = i + 1$
CALL AWPsolve($x, \alpha, Steig_1, n, y^I$)
[ÜG: $x, \alpha, Steig_1, n$ ÜN: y^I]
CALL AWPsolve($x, \alpha, Steig_2, n, y^{II}$)
[ÜG: $x, \alpha, Steig_2, n$ ÜN: y^{II}]
$k_1 = (y_n^{II} - \beta)/(y_n^{II} - y_n^I)$
$k_2 = 1 - k_1$
$i = 0$
SOLANGE $i \leq n$ $y_i = k_1 y_i^I + k_2 y_i^{II}$ $i = i + 1$
ÜBERGEBE $x(), y()$

Programm Nicht-lineares RWP



4 Interpolation

4.1 Newton

$$
\begin{aligned}
N_j(x) =& (x - x_0)(x - x_n)...(x - x_{j-1}) \qquad j = 0, 1, ..., n \\
P_n(x) =& \sum_{i=0}^{n} c_i N_i(x) \\
=& c_0 + c_1(x - x_0) + ... + c_n(x - x_0)(x - x_1)..(x - x_{n-1})
\end{aligned}
$$

\+ Einfache Hinzunahme einer neuen Interpolationsstelle

– Neigt zu Osszilationen. Grad größer 5 für Praktische Berechnung nicht geeignet (⇝ SPLINE-Interpolation)

```
INTEGER :: i, j
REAL :: P, x, xa, xb, Schrittweite    # x_a: Anfangsw., x_b: Endwert
REAL FELD (0..n):: Xs, Ys    # Xs; Ys sind mit den Bekannten Werten gefüllt
ÜBERNEHME Xs(), Ys(), xa, xb, n, Schrittweite    # n: Anzahl der Stützstellen
j=1
j ≤ n          # Berechnen der Dividierten Differenzen c_i
    i = n
    i ≥ j
        Ys(i) = ( Ys(i) - Ys(i-1) ) / ( Xs(i) - Xs(i-j) )
        i = i - 1
    j = j + 1
x = xa
x ≤ xb
    P = Ys(n)
    j = n - 1
    j ≥ 0
        P = Ys(j) + ( x - Xs(j) ) · P
        j = j - 1
    ÜBERGEBE X, P    # P: interpolierte Funktionswerte
    x = x + Schrittweite
```

4.2 Lagrange

$$L_i^n(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)...(x_i-x_n)} \qquad \text{ohne: } \frac{x-x_i}{x_i-x_i}$$

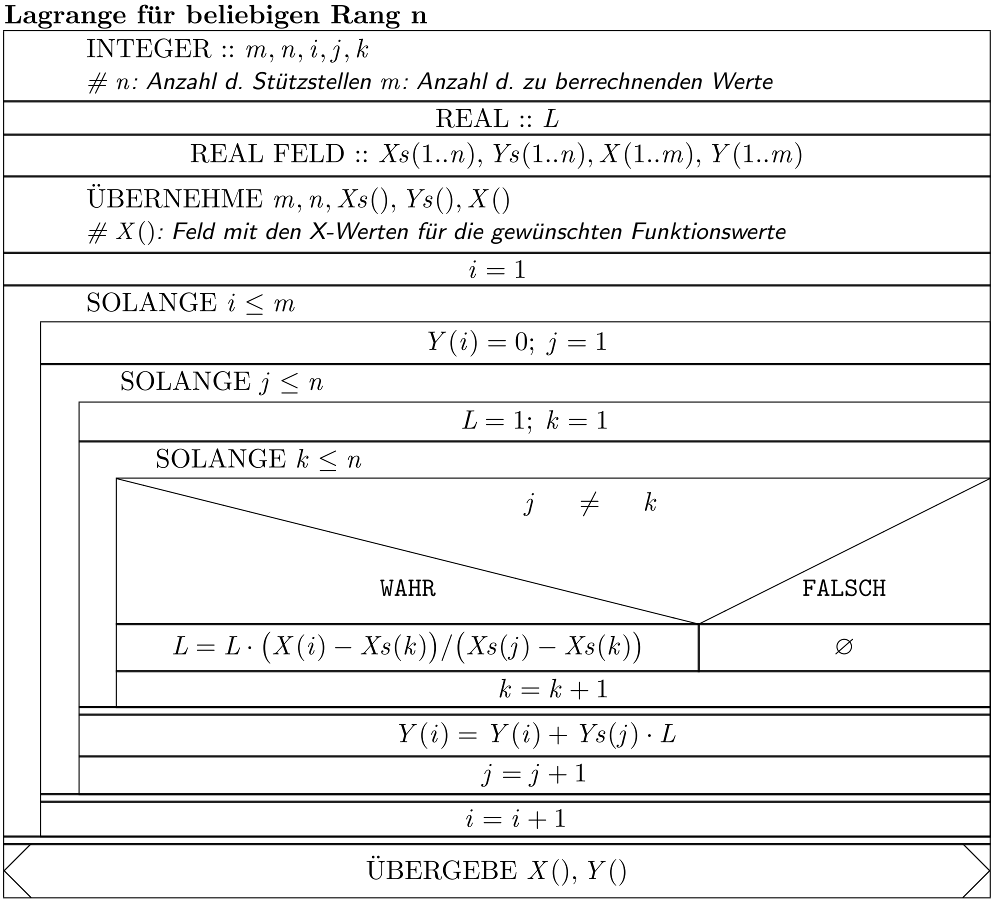
$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i L_i^n(x)$$

+ es muss kein Gleichungssystem gelöst werden

– bei Hinzunahme einer Interpolationsstelle müssen alle L_i neu berrechnet werden.

– Neigt zu Osszilationen. Grad größer 5 für Praktische Berechnung nicht geeignet (→ SPLINE-Interpolation)

Lagrange für beliebigen Rang n



Lagrange für Rang 2:

x_a: Stelle an der der Funktionswert interpoliert werden soll.

x_i, y_i: Bekannte Werte über die Interpoliert werden soll.

REAL :: $x_0, y_0, x_1, y_1, x_2, y_2, x_a, L_0, L_1, L_2, y_a$
ÜBERNEHME x_a
$y_0 = \star;\ y_1 = \star;\ y_2 = \star;$ # *aus Aufgabe*
$x_0 = \star;\ x_1 = \star;\ x_2 = \star;$ # *aus Aufgabe*
$L_0 = \big((x_a - x_1)(x_a - x_2)\big)/\big((x_0 - x_1)(x_0 - x_2)\big)$
$L_1 = \big((x_a - x_0)(x_a - x_2)\big)/\big((x_1 - x_0)(x_1 - x_2)\big)$
$L_2 = \big((x_a - x_0)(x_a - x_1)\big)/\big((x_2 - x_0)(x_2 - x_1)\big)$
$y_a = y_0 L_0 + y_1 L_1 + y_2 L_2$
ÜBERGEBE y_a

Fehlerabschätzung:

$$F = \frac{f^{(n+1)}\big(\xi(x)\big)}{(n+1)!}(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$$

5 Nichtlineare Gleichungen

5.1 Bisektionsverfahren

Prinzip: eine stetige Funktion hat zwischen einem postiven und einem negativen Funktionswert mindestens eine Nullstelle. Man startet mit einem positiven und einem negativen Funktionswert und nimmt den Wert in der Mitte. Ist dort das Vorzeichen das selbe wie bei x_0 ersetzten wir dieses durch den neuen Punkt. Ist es das selbe wie bei x_1 so ersetzen wir diesen. Dies wird solange wiederholt bis der Funktionswert annähernd Null erreicht.

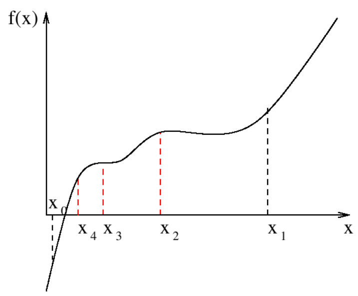


Abb. B.1. Prinzip des Bisektionsverfahrens