Einführung in die Programmierung für Physiker

Die Programmiersprache C – Verwendung wissenschaftlicher Bibliotheken

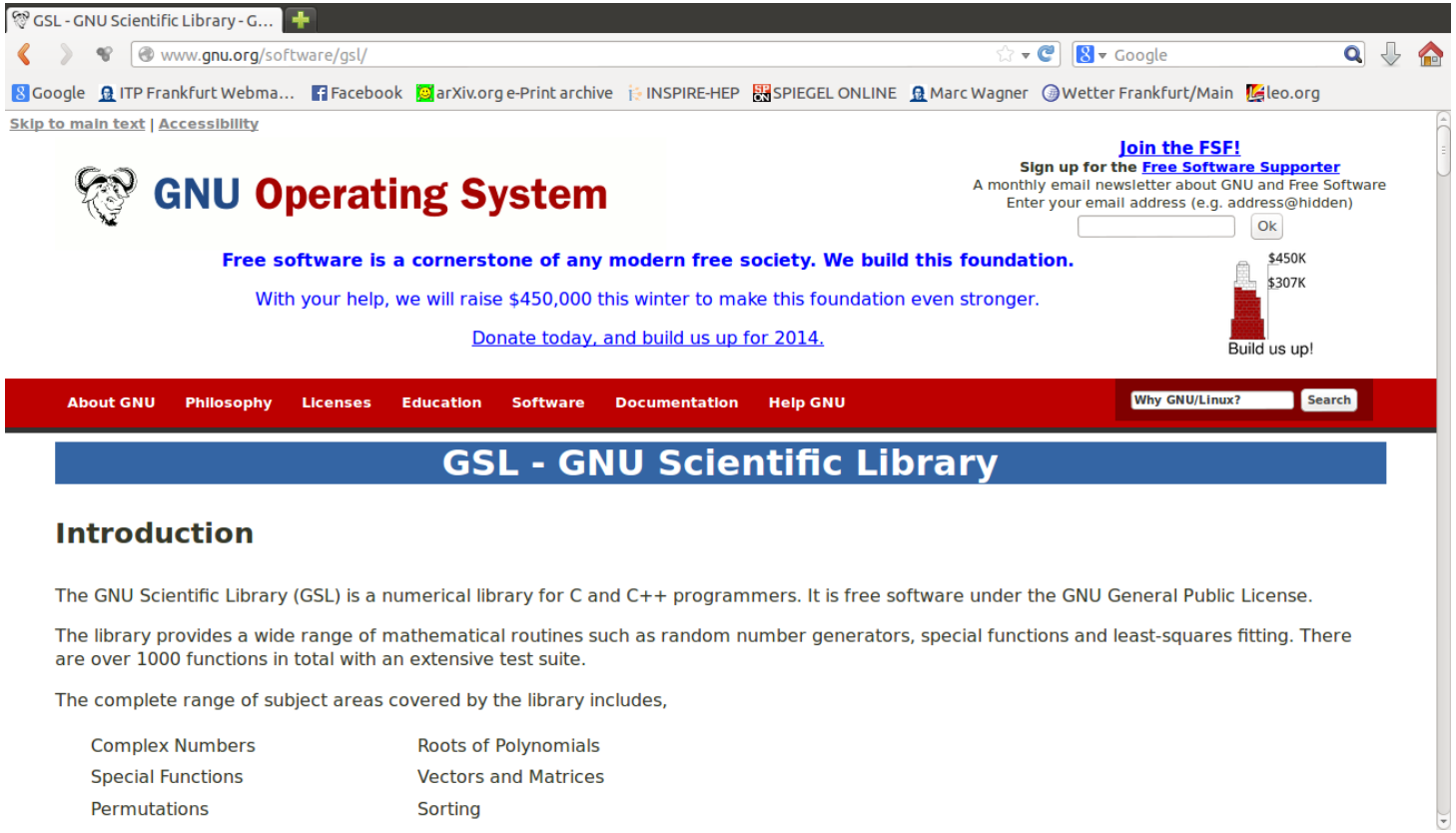
Marc Wagner

Institut für theoretische Physik
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

WS 2013/14

GSL (GNU Scientific Library)

- Es existieren zahlreiche frei verfügbare wissenschaftliche Bibliotheken, in denen numerische Standardverfahren (z.B. zur Nullstellensuche, zur Integration, zum Lösen von Differentialgleichungen) implementiert sind.
- Häufig ist die Verwendung solcher wissenschaftliche Bibliotheken zeitsparender und weniger fehleranfällig, als das selbstständige Implementieren eines entsprechenden numerischen Verfahrens.
- Eine oft verwendete wissenschaftliche Bibliothek ist **GSL (GNU Scientific Library)**.



- **GSL** enthält ein breites Spektrum von **C**-Funktionen zur Lösung numerischer Standardprobleme.

are over 1000 functions in total with an extensive test suite.

The complete range of subject areas covered by the library includes,

Complex Numbers	Roots of Polynomials
Special Functions	Vectors and Matrices
Permutations	Sorting
BLAS Support	Linear Algebra
Eigensystems	Fast Fourier Transforms
Quadrature	Random Numbers
Quasi-Random Sequences	Random Distributions
Statistics	Histograms
N-Tuples	Monte Carlo Integration
Simulated Annealing	Differential Equations
Interpolation	Numerical Differentiation
Chebyshev Approximation	Series Acceleration
Discrete Hankel Transforms	Root-Finding
Minimization	Least-Squares Fitting
Physical Constants	IEEE Floating-Point
Discrete Wavelet Transforms	Basis splines

Unlike the licenses of proprietary numerical libraries the license of GSL does not restrict scientific cooperation. It allows you to share your programs freely with others.

Downloading GSL

Beispiel: Numerische Integration mit GSL

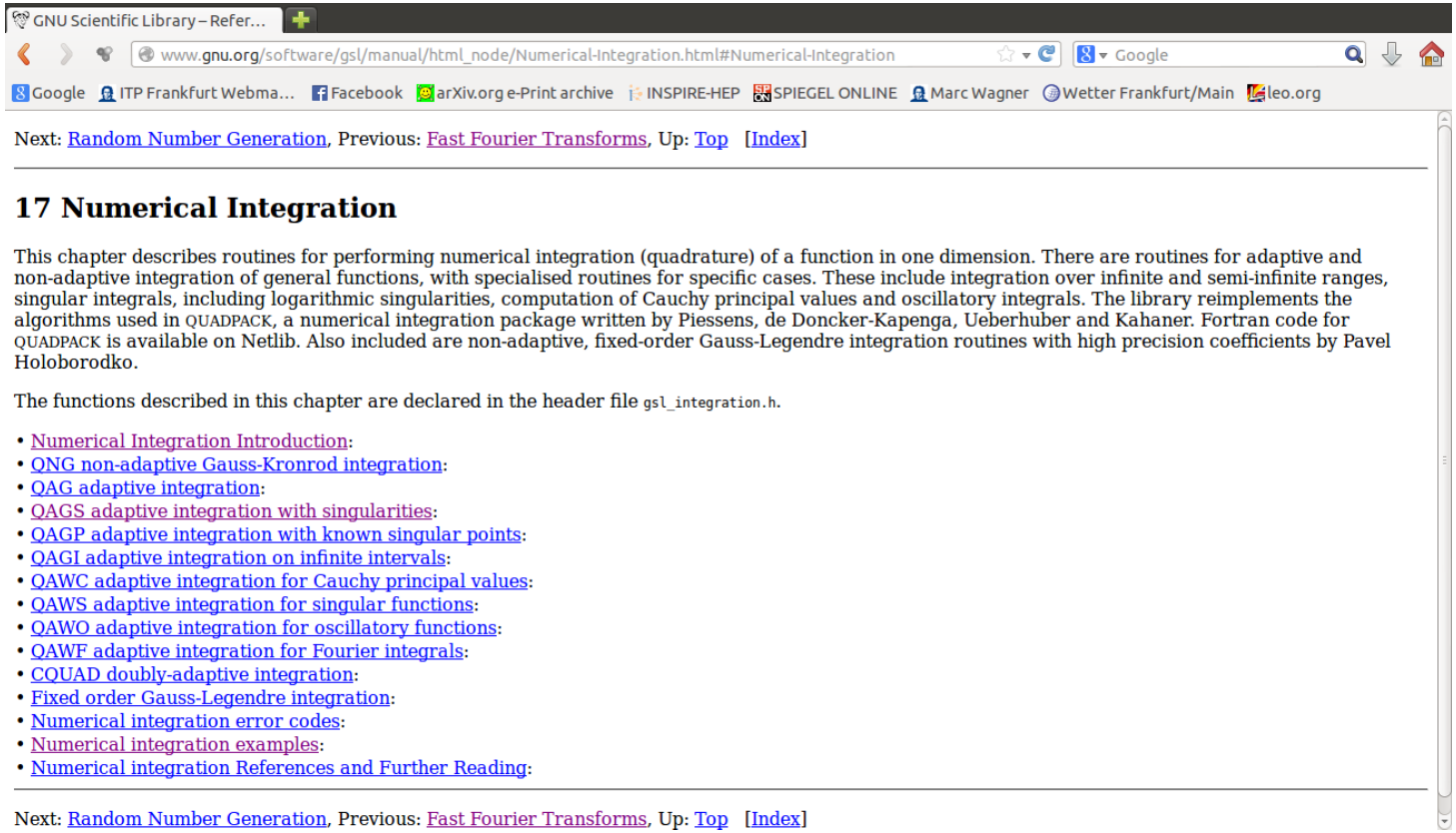
- Zur Illustration sollen die folgenden drei eindimensionalen (auch leicht analytisch lösbaren) Integrale numerisch mit Hilfe von **GSL** gelöst werden.

$$\int_0^1 dx\, x = \frac{1}{2}$$

$$\int_0^\pi dx\, (sin(x))^2 = \frac{\pi}{2}$$

$$\int_0^1 dx\, \frac{1}{\sqrt{ax}} = \frac{2}{\sqrt{a}} \quad \text{(numerisch im Spezialfall } a = 3\text{)}$$

- **GSL** enthält eine Reihe von **C**-Funktionen, in denen unterschiedliche Integrationsverfahren realisiert sind; unter Umständen erfordert die Auswahl des geeignetsten oder zumindest eines erfolgversprechenden Verfahrens für das vorliegende Problem Kenntnisse in numerischer Mathematik (z.B. Inhalt der Vorlesung "Numerische Methoden der Physik", siehe nächste Folie).



- Die obigen Integrale sind numerisch unproblematisch (endlicher Integrationsbereich, keine starken Oszillationen), lediglich das letzte Integral hat einen singulären Integranden; verwende daher ein Verfahren, das mit solchen Singularitäten zurechtkommt (→ "QAGS adaptive integration with singularities"; auch in "Numerical integration examples" verwendet).

Next: QAGP adaptive integration with known singular points, Previous: QAG adaptive integration, Up: Numerical Integration [Index]

17.4 QAGS adaptive integration with singularities

The presence of an integrable singularity in the integration region causes an adaptive routine to concentrate new subintervals around the singularity. As the subintervals decrease in size the successive approximations to the integral converge in a limiting fashion. This approach to the limit can be accelerated using an extrapolation procedure. The QAGS algorithm combines adaptive bisection with the Wynn epsilon-algorithm to speed up the integration of many types of integrable singularities.

Function: *int* **gsl_integration_qags** *(const gsl_function * f, double a, double b, double epsabs, double epsrel, size_t limit, gsl_integration_workspace * workspace, double * result, double * abserr)*

> This function applies the Gauss-Kronrod 21-point integration rule adaptively until an estimate of the integral of *f* over *(a,b)* is achieved within the desired absolute and relative error limits, *epsabs* and *epsrel*. The results are extrapolated using the epsilon-algorithm, which accelerates the convergence of the integral in the presence of discontinuities and integrable singularities. The function returns the final approximation from the extrapolation, *result*, and an estimate of the absolute error, *abserr*. The subintervals and their results are stored in the memory provided by *workspace*. The maximum number of subintervals is given by *limit*, which may not exceed the allocated size of the workspace.

```
1. #include<math.h>
2. #include<stdio.h>
3.
4. #include<gsl/gsl_integration.h>
5.
6. // ********************
7.
8. // Die Funktionen, die integriert werden.
```

```
 9.
10. // f(x) = x
11. double f(double x, void *params)
12. {
13.   return x;
14. }
15.
16. // g(x) = sin^2(x)
17. double g(double x, void *params)
18. {
19.   return pow(sin(x), 2.0);
20. }
21.
22. // h(x) = 1/sqrt(a*x)
23. double h(double x, void *params)
24. {
25.   double a = *(double *)params;
26.   return 1.0/sqrt(a*x);
27. }
28.
29. // ********************
30.
31. int main(void)
32. {
33.   // int gsl_integration_qags (const gsl_function *f, double a, double b,
34.   //   double epsabs, double epsrel, size_t limit,
35.   //   gsl_integration_workspace *workspace, double *result, double *abserr)
```

```
36.
37.   // Eine GSL-Struktur fuer mathematische Funktionen.
38.   gsl_function func;
39.
40.   // GSL benoetigt einen speziellen Speicherbereich zur Integration; dieser
41.   // kann im vorliegenden Fall bis zu 1000 Intervalle speichern.
42.   gsl_integration_workspace *workspace = gsl_integration_workspace_alloc(1000);
43.
44.   double result, abserr;
45.   double result_analytically;
46.
47.   // **********
48.
49.   // int_0^1 dx x = 1/2
50.
51.   result_analytically = 0.5;
52.
53.   func.function = &f;
54.   func.params = NULL;
55.
56.   // Die eigentliche numerische Integration.
57.   gsl_integration_qags(&func, 0.0, 1.0, 0.0, 1.0e-7, 1000, workspace, &result, &abserr);
58.
59.   printf("int_0^1 dx x = ...\n");
60.   printf("  ... = +%.12lf (numerically)\n", result);
61.   printf("  ... = +%.12lf (analytically)\n", result_analytically);
62.   printf("  estimated error = % .12f\n", abserr);
```

```
63.   printf("  actual error    = % .12f\n", fabs(result - result_analytically));
64.   printf("  intervals =  %zd\n", workspace->size);
65.
66.   // **********
67.   printf("\n");
68.   // **********
69.
70.   // int_0^\pi dx (sin(x))^2 = \pi/2
71.
72.   result_analytically = 0.5*M_PI;
73.
74.   func.function = &g;
75.   func.params = NULL;
76.
77.   // Die eigentliche numerische Integration.
78.   gsl_integration_qags(&func, 0.0, M_PI, 0.0, 1.0e-7, 1000, workspace, &result, &abserr);
79.
80.   printf("int_0^\\pi dx (sin(x))^2 = ...\n");
81.   printf("  ... = +%.12lf (numerically)\n", result);
82.   printf("  ... = +%.12lf (analytically)\n", result_analytically);
83.   printf("  estimated error = % .12f\n", abserr);
84.   printf("  actual error    = % .12f\n", fabs(result - result_analytically));
85.   printf("  intervals =  %zd\n", workspace->size);
86.
87.   // **********
88.   printf("\n");
89.   // **********
```

```
90.
91.  // int_0^1 dx 1/sqrt(a*x) = 2*sqrt(a*x)/a|_0^1 = 2/sqrt(a)
92.
93.   double a = 3.0;
94.   result_analytically = 2.0/sqrt(a);
95.
96.   func.function = &h;
97.   func.params = &a;
98.
99.   // Die eigentliche numerische Integration.
100.  gsl_integration_qags(&func, 0.0, 1.0, 0.0, 1.0e-7, 1000, workspace, &result, &abserr);
101.
102.  printf("int_0^1 dx 1/sqrt(3*x) = ...\n");
103.  printf("  ... = +%.12lf (numerically)\n", result);
104.  printf("  ... = +%.12lf (analytically)\n", result_analytically);
105.  printf("  estimated error = % .12f\n", abserr);
106.  printf("  actual error    = % .12f\n", fabs(result - result_analytically));
107.  printf("  intervals =  %zd\n", workspace->size);
108.
109.  // **********
110.
111.  gsl_integration_workspace_free(workspace);
112. }
```

- Beim Kompilieren muss die **GSL**-Bibliothek eingebunden werden; unter **Linux** und bei Verwendung der Compiler **gcc** oder **g++** dient dafür die Option **-l***libname*:

- **`-lgsl`**: **GSL** wird eingebunden.
- **`-lgslcblas`**: lineare Algebra für **GSL** wird eingebunden (BLAS = Basic Linear Algebra Subprograms).

```
mwagner@laptop-tigger:~/lecture_ProgPhys/slides/tmp$ ls -l
insgesamt 4
-rw-rw-r-- 1 mwagner mwagner 2988 Jan 21 16:00 prog.c
mwagner@laptop-tigger:~/lecture_ProgPhys/slides/tmp$ g++ -o prog prog.c -lgsl -lgslcblas
mwagner@laptop-tigger:~/lecture_ProgPhys/slides/tmp$ ls -l
insgesamt 20
-rwxrwxr-x 1 mwagner mwagner 13555 Jan 21 17:13 prog
-rw-rw-r-- 1 mwagner mwagner  2988 Jan 21 16:00 prog.c
mwagner@laptop-tigger:~/lecture_ProgPhys/slides/tmp$ ./prog
int_0^1 dx x = ...
  ... = +0.500000000000 (numerically)
  ... = +0.500000000000 (analytically)
  estimated error =  0.000000000000
  actual error    =  0.000000000000
  intervals =  1

int_0^\pi dx (sin(x))^2 = ...
  ... = +1.570796326795 (numerically)
  ... = +1.570796326795 (analytically)
  estimated error =  0.000000000000
  actual error    =  0.000000000000
  intervals =  1

int_0^1 dx 1/sqrt(3*x) = ...
  ... = +1.154700538379 (numerically)
  ... = +1.154700538379 (analytically)
  estimated error =  0.000000000000
  actual error    =  0.000000000000
  intervals =  6
```

"Numerische Methoden der Physik" (WS 2011/12, SS 2014)

Inhalt

- **7 Numerische Integration**
  - 7.1 Eindimensionale Integration
    - 7.1.1 Newton-Cotes-Formeln
    - 7.1.2 Gaußsche Integralformeln
  - 7.2 Mehrdimensionale Integration
    - 7.2.1 Geschachtelte eindimensionale Integration
    - 7.2.2 Monte-Carlo-Integration
    - 7.2.3 Wann ist welches Verfahren geeignet?
- **8 Eigenwertprobleme**
  - 8.1 Problemstellung, grundlegende Eigenschaften und Tatsachen
  - 8.2 Prinzipielle Arbeitsweise numerischer Eigenwertverfahren
  - 8.3 Jacobi-Verfahren
  - 8.4 Beispiel für physikalische Anwendung: Kleine Schwingungen
  - 8.5 Bibliotheken für Eigenwertprobleme
- Einschub: Verwendung numerischer Bibliotheken
- **9 Interpolation, Extrapolation, Approximation**

- 11.1.1 Metropolis-Algorithmus
- 11.2.2 Heatbath-Algorithmus
- 11.3 Monte Carlo-Simulation des Ising-Modells

Literatur

- Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing (W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Cambridge University Press).
- Computational Physics I + II (U. Wolff mit O. Bär, S. Schaefer, http://linde.physik.hu-berlin.de/comphys/comphys.html).
- Numerik I und II (für Ingenieure) (H. Grabmüller, http://fauams5.am.uni-erlangen.de/am1/de/scripts_grabmue.html).