Einführung in die Numerik

Peter Bastian

Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Im Neuenheimer Feld 368, D-69120 Heidelberg
email: peter.bastian@iwr.uni-heidelberg.de

13. Oktober 2015

Vorlesung

- Dozent: Peter Bastian, INF 368, R. 420, Sprechstunde Do 11-12 (peter.bastian@iwr.uni-heidelberg.de)
- Übungsleitung: Dominic Kempf (num0@conan.iwr.uni-heidelberg.de)
- Vorlesungstermine: Di, Do 14-16, HS 1, INF 288.
- Webseite zur Vorlesung (Materialien, Übungsaufgaben, ...)

`http://conan.iwr.uni-heidelberg.de/teaching/numerik0_ws2015/`

- Vorlesung vorwiegend als Tafelanschrieb mit praktischen Beispielen auf dem Computer.
- Inhalt der Folien ist als PDF auf Webseite erhältlich.
- Mitschrieb von Stefan Breunig von 2010:

`https://mathphys.fsk.uni-heidelberg.de/~stefan/mitschriebe/numerik0/numerik0_print.pdf`

Programmieren

- Vorlesung und praktische Programmierübungen verwenden Programmiersprache C++.
- Zur Vorlesung werden C++ Klassen für Matrizen, Vektoren und Zeitmessung zur Verfügung gestellt.
- Wir empfehlen (und unterstützen) Programmieren in einer LINUX Umgebung.
- Mac user: Analog Linux
- Windows user (**kein support!**):
  - LiveCD/Stick (`http://www.ubuntu.com`)
  - Wubi (`http://wubi-installer.org`)
  - Virtuelle Maschine mit Linux (`http://www.virtualbox.org`)
  - Cygwin (`http://www.cygwin.com`), Editor: Notepad++ (`http://notepad-plus-plus.org`)

Programmierkurs

Einsteigerkurs für Programmieranfänger (2 mal mit gleichem Inhalt):

- Mittwoch, 21.10.2015, 14-16 Uhr, Otto-Meyerhof-Zentrum, INF 350, Untergeschoss, Poolräume
- Mittwoch, 21.10.2015, 16-18 Uhr, Otto-Meyerhof-Zentrum, INF 350, Untergeschoss, Poolräume

Übung

Begleitend zur Vorlesung finden Übungen statt:

- Pro Woche wird ein Übungsblatt mit theoretischen und praktischen Übungen (Programmierübungen) ausgegeben.
- Punkteverhältnis ca. 70% (theoretisch) zu 30% (praktisch).
- Eine erfolgreiche Teilnahme an den Übungen ist Voraussetzung für die Teilnahme an der Klausur.
- Einmal pro Woche findet **betreutes Programmieren** im CIP-Pool statt. Die Teilnehmer können hier Unterstützung bei Schwierigkeiten mit der Lösung der Programmieraufgaben erhalten. Termin: Mi 21.10.15, OMZ INF 350, Untergeschoss, U 011

Eine Abgabe in Gruppen von zwei bis drei Teilnehmer ist möglich und ausdrücklich erwünscht.

Übungsbetrieb

- Ausgabe Übungsblätter immer Donnerstags (erstes Übungsblatt Freitag 22.10.2015).
- Bearbeitungszeit jeweils 1 Woche.
- Abgabe im Foyer INF 288, freitags 11 Uhr.
- Beginn der Übungsgruppen ab 19.10.2015.

Übungsgruppen

Anmeldung über *Muesli*:

`https://www.mathi.uni-heidelberg.de/muesli/`

ist geöffnet

Derzeit 6 Termine geöffnet

Anmeldung bis Donnerstag, 15.10.2015, 20:00 Uhr

Zuteilung am Freitag

Übungstermin Pool:

Mi 14-16 Uhr   INF 350 (OMZ), U011

Scheinkriterien

Klausur:
Die Scheinvergabe und Benotung erfolgt aufgrund der Ergebnisse der verpflichtenden Klausur.

Klausurtermin: wird bekannt gegeben

Zulassung zur Klausur:

- 50 % der Punkte aus allen Übungen
- Vorführung mindestens einer Lösung in der Übungsgruppe (einmal pro **Teilnehmer**, nicht einmal pro Abgabegruppe).

Weiterführende Vorlesungen

- Numerik (gewöhnlicher Differentialgleichungen)
- Numerik partieller Differentialgleichungen
- Parallele Löser für große Gleichungssysteme
- Kontinuumsmechanik
- Strömungsmechanik
- Algorithmische Optimierung I/II
- Objektorientiertes Programmieren im Wissenschaftlichen Rechnen

Inhalt

1. Motivation
   - Modellbildung und Simulation
   - Ein einfaches Beispiel: Das Fadenpendel
   - Inhaltsübersicht der Vorlesung

Die Wissenschaftliche Methode

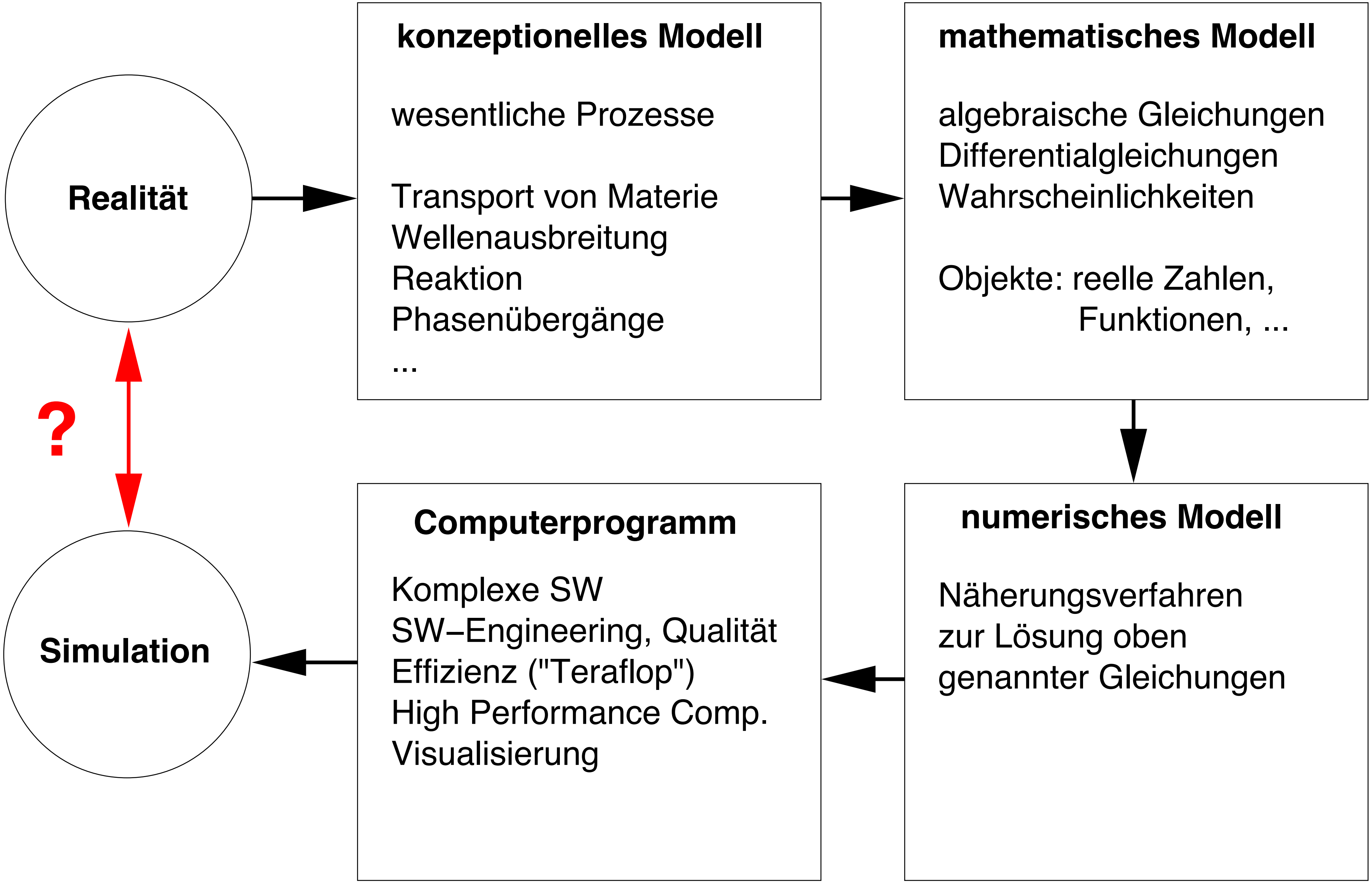
- Experiment: Beobachte (und messe) was passiert.
- Theorie: Versuche die Beobachtung mit Hilfe von Modellen zu erklären.
- Theorie und Experiment werden sukzessive verfeinert und verglichen, bis eine akzeptable Übereinstimmung vorliegt.
- In Naturwissenschaft und Technik liegen Modelle oft in Form mathematischer Gleichungen vor. Z. B. gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen.
- Oft können die Modellgleichungen nicht geschlossen (mit Papier und Bleistift oder Mathematica . . .) gelöst werden.

$\Rightarrow$ **Numerische Simulation und Optimierung**

Simulation

- Simulation: Gleichungen numerisch lösen.
  - Undurchführbare Experimente ermöglichen (z. B. Galaxienkollisionen).
  - Einsparung teuerer Experimente (z. B. Windkanal).
  - Parameterstudien schneller durchführbar.
  - (Automatische) Optimierung von Prozessen.
  - Identifikation von Modellparametern aus Messungen.
  - Abschätzung von Unsicherheiten.
- Vielfältiger Einsatz in Naturwissenschaft, Technik und Industrie: Strömungsberechnung (Wetter, Klima), Festigkeit von Bauwerken ...
- Grundlage für alle diese Anwendungen sind numerische Algorithmen!
- Auch Informatiker sind beteiligt: SW-Engineering, High-Performance (Parallel) Computing, ...

Wissenschaftliches Rechnen



Fehlerquellen

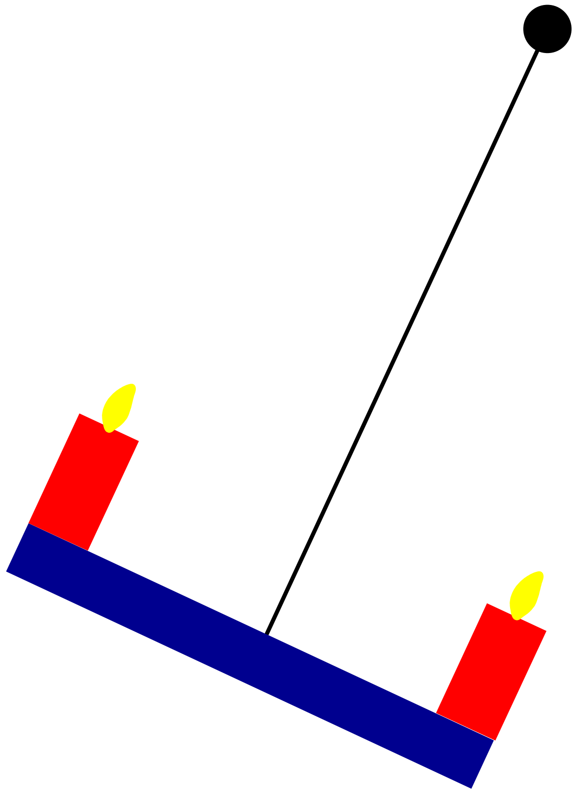
Unterschiede zwischen Experiment und Simulation haben verschiedene Gründe:

- *Modellfehler*: Ein relevanter Prozess wurde nicht oder ungenau modelliert (Temp. konstant, Luftwiderstand vernachlässigt, ...)
- *Datenfehler*: Messungen von Anfangsbedingungen, Randbedingungen, Werte für Parameter sind fehlerbehaftet.
- *Abschneidefehler*: Abbruch von Reihen oder Iterationsverfahren, Approximation von Funktionen (z.B. stückweise Polynome).
- *Rundungsfehler*: Reelle Zahlen werden im Rechner genähert dargestellt.

Untersuchung von Rundungsfehlern und Abschneidefehlern ist ein zentraler Aspekt der Vorlesung!

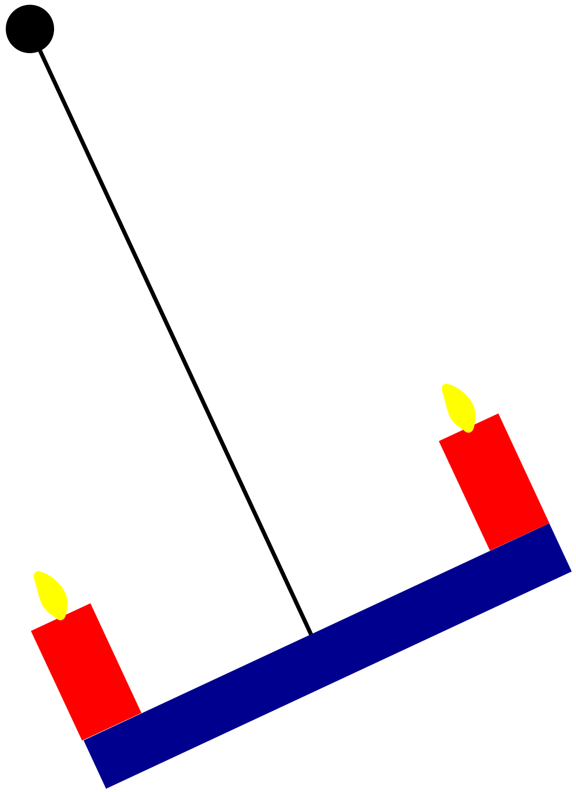
Pisa, 1582

Der Student Galileo Galilei sitzt in der Kirche und ihm ist langweilig. Er beobachtet den langsam über ihm pendelnden Kerzenleuchter und denkt: „Wie kann ich nur die Bewegung dieses Leuchters beschreiben?“.



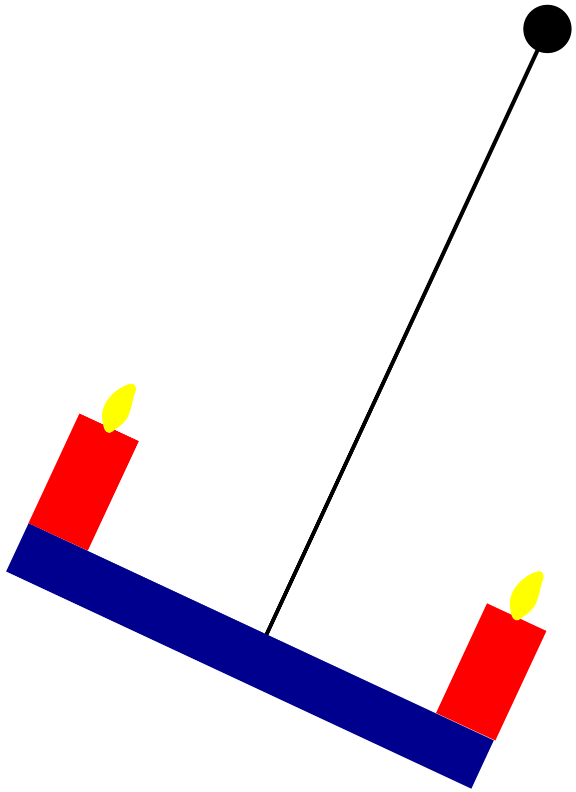
Pisa, 1582

Der Student Galileo Galilei sitzt in der Kirche und ihm ist langweilig. Er beobachtet den langsam über ihm pendelnden Kerzenleuchter und denkt: „Wie kann ich nur die Bewegung dieses Leuchters beschreiben?“.



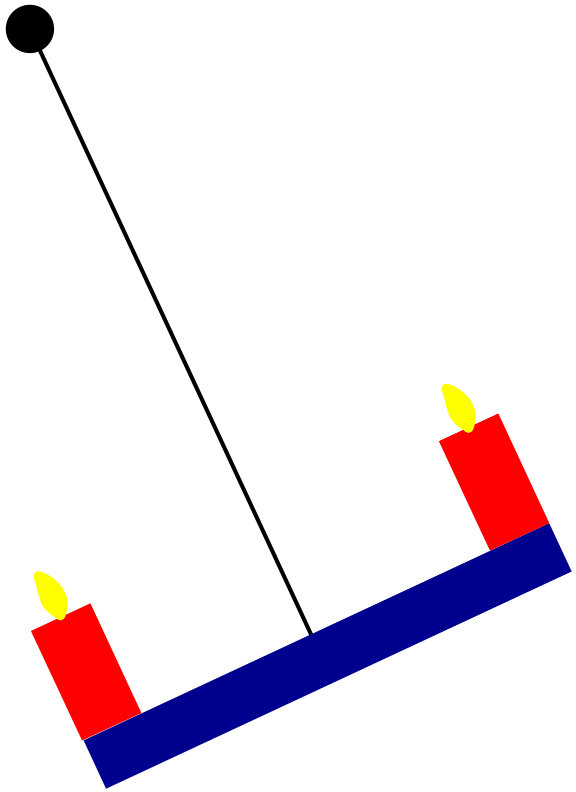
Pisa, 1582

Der Student Galileo Galilei sitzt in der Kirche und ihm ist langweilig. Er beobachtet den langsam über ihm pendelnden Kerzenleuchter und denkt: „Wie kann ich nur die Bewegung dieses Leuchters beschreiben?“.



Pisa, 1582

Der Student Galileo Galilei sitzt in der Kirche und ihm ist langweilig. Er beobachtet den langsam über ihm pendelnden Kerzenleuchter und denkt: „Wie kann ich nur die Bewegung dieses Leuchters beschreiben?“.

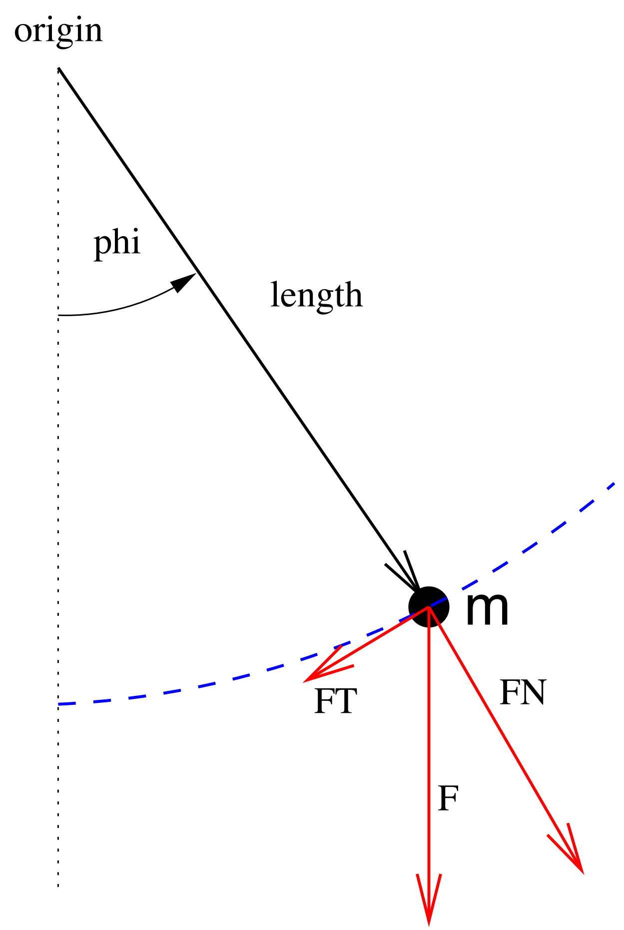


Konzeptionelles Modell

Welche Eigenschaften (physikalischen Prozesse) sind für die gestellte Frage relevant?

- Leuchter ist ein Massenpunkt mit der Masse m.
- Der Faden der Länge ℓ wird als rigide und masselos angenommen.
- Der Luftwiderstand wird vernachlässigt.

Nun entwickle mathematisches Modell.



Kräfte

- *Annahme*: Pendel läuft auf Kreisbahn: Nur *Tangentialkraft* ist relevant.
- Tangentialkraft bei Auslenkung ϕ:

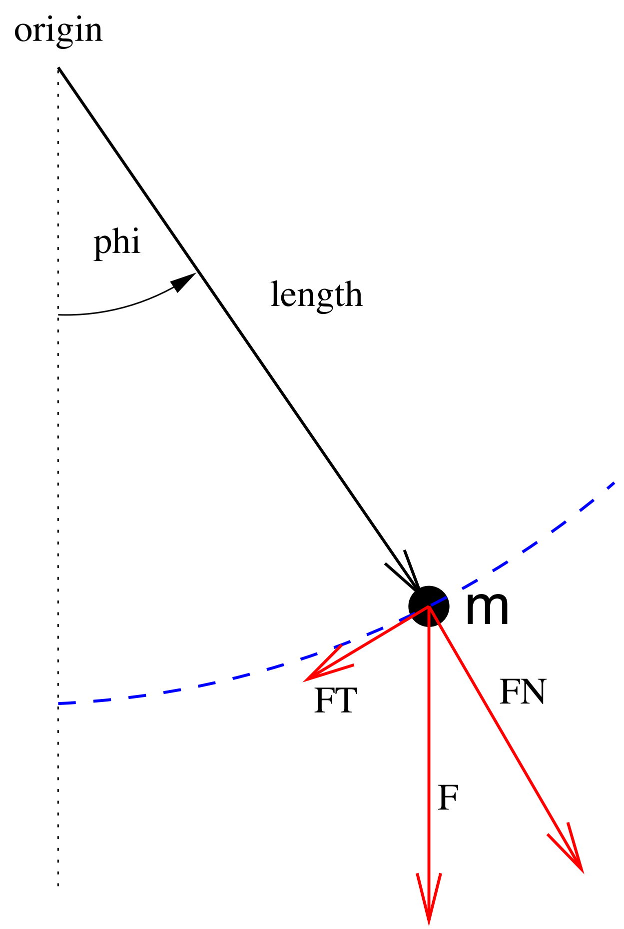
$$\vec{F}_T(\phi) = -m\,g\sin(\phi)\begin{pmatrix}\cos(\phi)\\ \sin(\phi)\end{pmatrix}.$$

- Also etwa:

$$\vec{F}_T(0) = -mg\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},$$

$$\vec{F}_T(\pi/2) = -mg\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

- Vorzeichen kodiert Richtung.



Weg, Geschwindigkeit, Beschleunigung

- Weg $s(t)$, Geschwindigkeit $v(t)$, Beschleunigung $a(t)$ erfüllen:

$$v(t) = \frac{ds(t)}{dt}, \qquad a(t) = \frac{dv(t)}{dt}.$$

- Für den zurückgelegten Weg (mit Vorzeichen!) gilt $s(t) = \ell\phi(t)$.
- Also für die Geschwindigkeit

$$v(t) = \frac{d\, s(\phi(t))}{dt} = \frac{d\, \ell\phi(t)}{dt} = \ell\frac{d\phi(t)}{dt}$$

- und die Beschleunigung

$$a(t) = \frac{d\, v(\phi(t))}{dt} = \ell\frac{d^2\phi(t)}{dt^2}.$$

Bewegungsgleichung

- Einsetzen in das 2. Newton'sche Gesetz $m\,a(t) = F(t)$ liefert nun:
$$m\ell \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -mg\sin(\phi(t)) \qquad \forall t > t_0.$$
- Die Kraft ist hier skalar (vorzeichenbehafteter Betrag der Tangentialkraft), da wir nur den zurückgelegten Weg betrachten.
- Ergibt *gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung* für die Auslenkung $\phi(t)$:
$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\frac{g}{\ell}\sin(\phi(t)) \qquad \forall t > t_0. \tag{1}$$
- Eindeutige Lösung erfordert *zwei* Anfangsbedingungen ($t_0 = 0$):
$$\phi(0) = \phi_0, \qquad \frac{d\phi}{dt}(0) = u_0. \tag{2}$$

Lösung bei kleiner Auslenkung

- Allgemeine Gleichung für das Pendel ist schwer „analytisch“ zu lösen.
- Für *kleine* Winkel ϕ gilt

$$\sin(\phi) \approx \phi,$$

  z.B. $\sin(0,1) = 0,099833417$.
- Diese *Näherung* reduziert die Gleichung auf

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\frac{g}{\ell}\phi(t).$$

- Ansatz $\phi(t) = A\cos(\omega t)$ liefert mit $\phi(0) = \phi_0$, $\frac{d\phi}{dt}(0) = 0$ dann die aus der Schule bekannte Formel

$$\phi(t) = \phi_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{\ell}}\,t\right) \tag{3}$$

Volles Modell; Verfahren 1

- Löse das volle Modell mit zwei numerischen Verfahren.
- Ersetze Gleichung zweiter Ordnung durch *zwei* Gleichungen *erster* Ordnung:

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = u(t), \qquad \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = \frac{du(t)}{dt} = -\frac{g}{\ell}\sin(\phi(t)).$$

- Ersetze Ableitungen durch Differenzenquotienten:

$$\frac{\phi(t+\Delta t) - \phi(t)}{\Delta t} \approx \frac{d\phi(t)}{dt} = u(t),$$
$$\frac{u(t+\Delta t) - u(t)}{\Delta t} \approx \frac{du(t)}{dt} = -\frac{g}{\ell}\sin(\phi(t)).$$

- Mit $\phi^n = \phi(n\Delta t)$, $u^n = u(n\Delta t)$ erhält man Rekursion (*Euler*):

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t\, u^n \qquad \phi^0 = \phi_0 \qquad (4)$$
$$u^{n+1} = u^n - \Delta t\, (g/\ell)\sin(\phi^n) \qquad u^0 = u_0 \qquad (5)$$

Volles Modell; Verfahren 2

- Nutze Näherungsformel für die zweite Ableitung, sog. *Zentraler Differenzenquotient*:

$$\frac{\phi(t+\Delta t) - 2\phi(t) + \phi(t-\Delta t)}{\Delta t^2} \approx \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\frac{g}{\ell}\sin(\phi(t)).$$

- Auflösen nach $\phi(t+\Delta t)$ ergibt Rekursionsformel ($n \geq 2$):

$$\phi^{n+1} = 2\phi^n - \phi^{n-1} - \Delta t^2 \,(g/\ell)\, \sin(\phi^n) \tag{6}$$

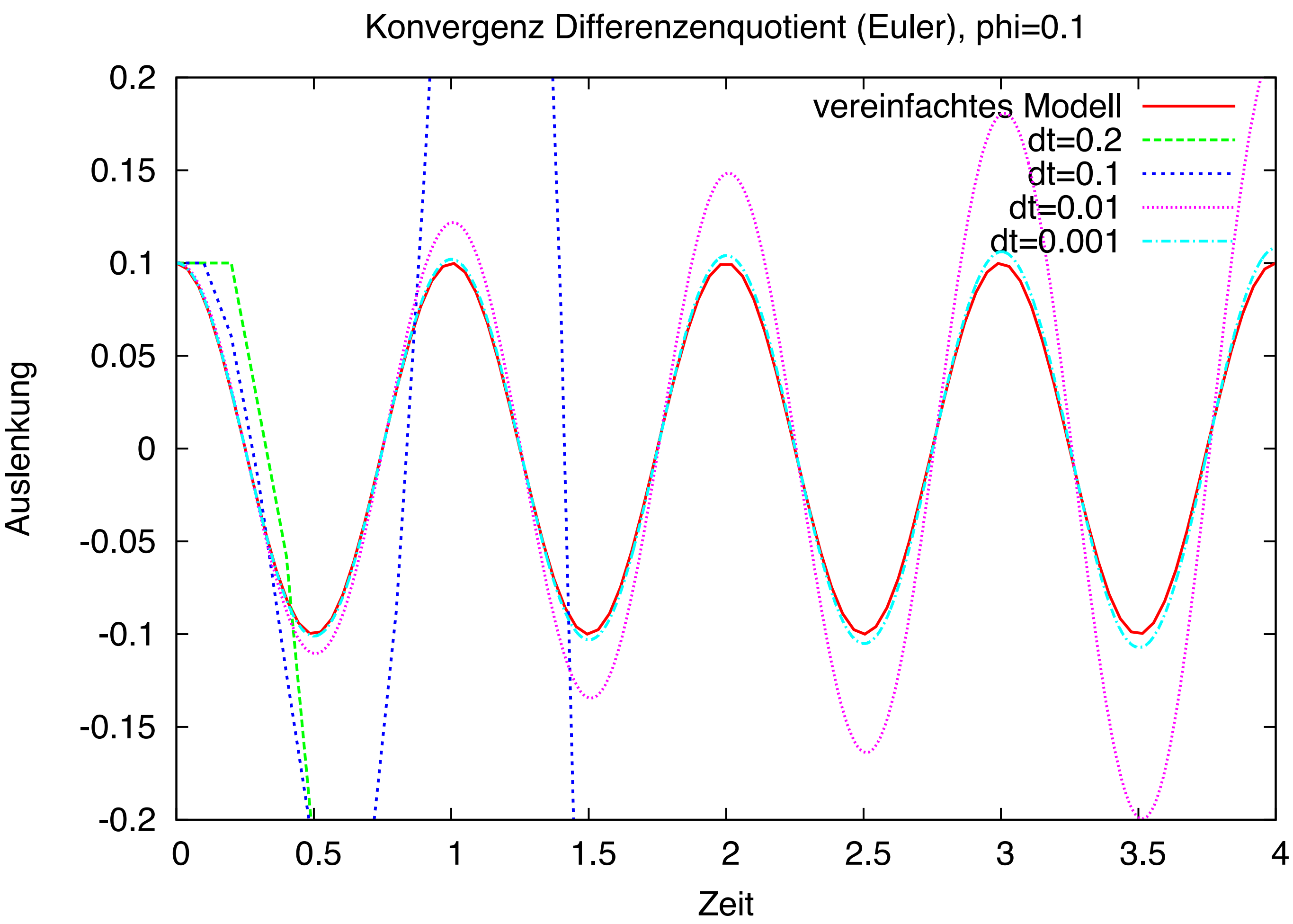
mit der Anfangsbedingung

$$\phi^0 = \phi_0, \qquad \phi^1 = \phi_0 + \Delta t\, u_0. \tag{7}$$

(Die zweite Bedingung kommt aus dem Eulerverfahren oben).

Experiment 1: $\phi_0 = 0.1 \approx 5.7°$

Differenzenquotient (Eulerverfahren)

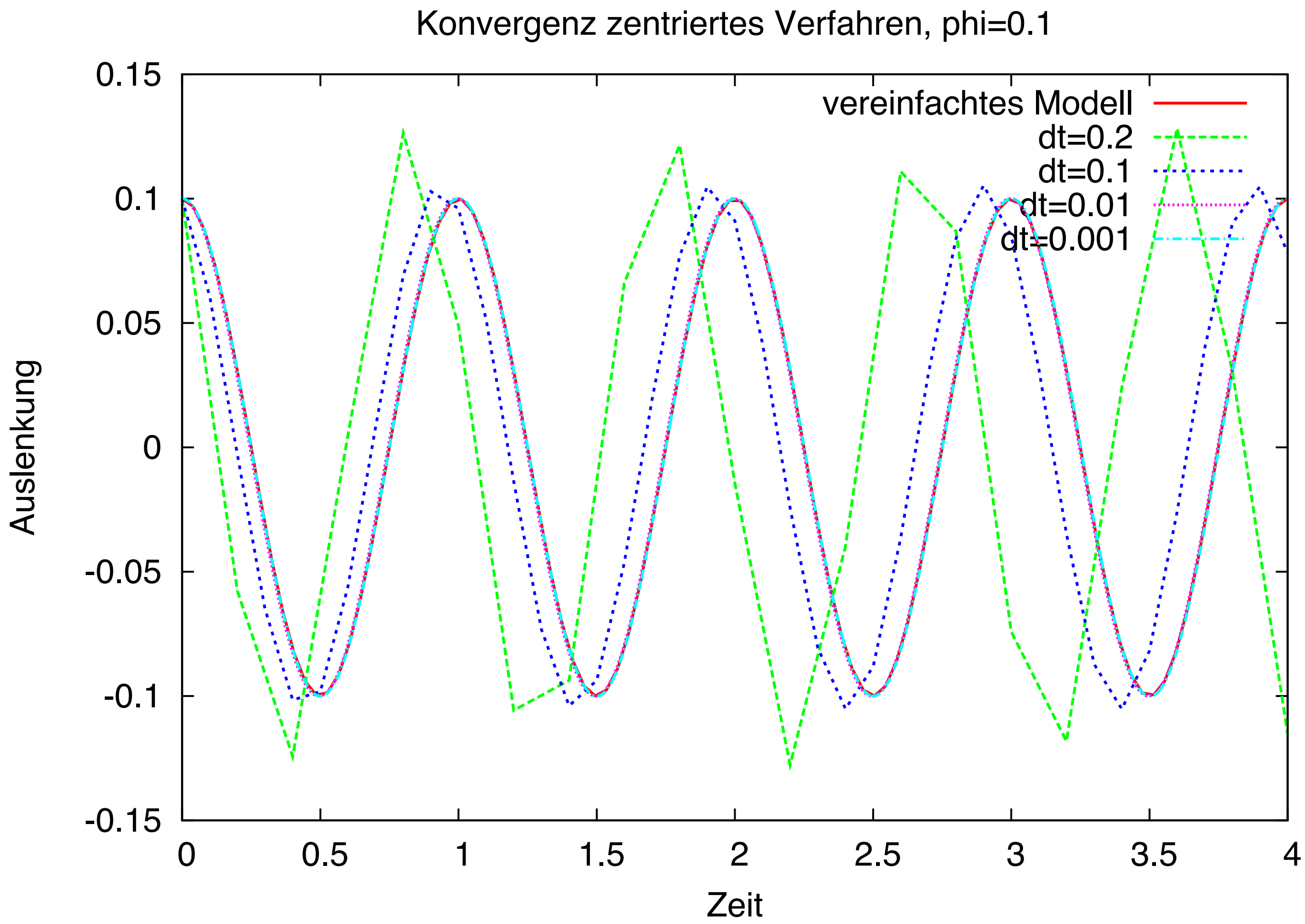


Für festen Zeitpunkt t und $\Delta t \to 0$ *konvergiert* das Verfahren.

Für festes Δt und $t \to \infty$ wächst der Fehler an.

Experiment 2: $\phi_0 = 0.1 \approx 5.7°$

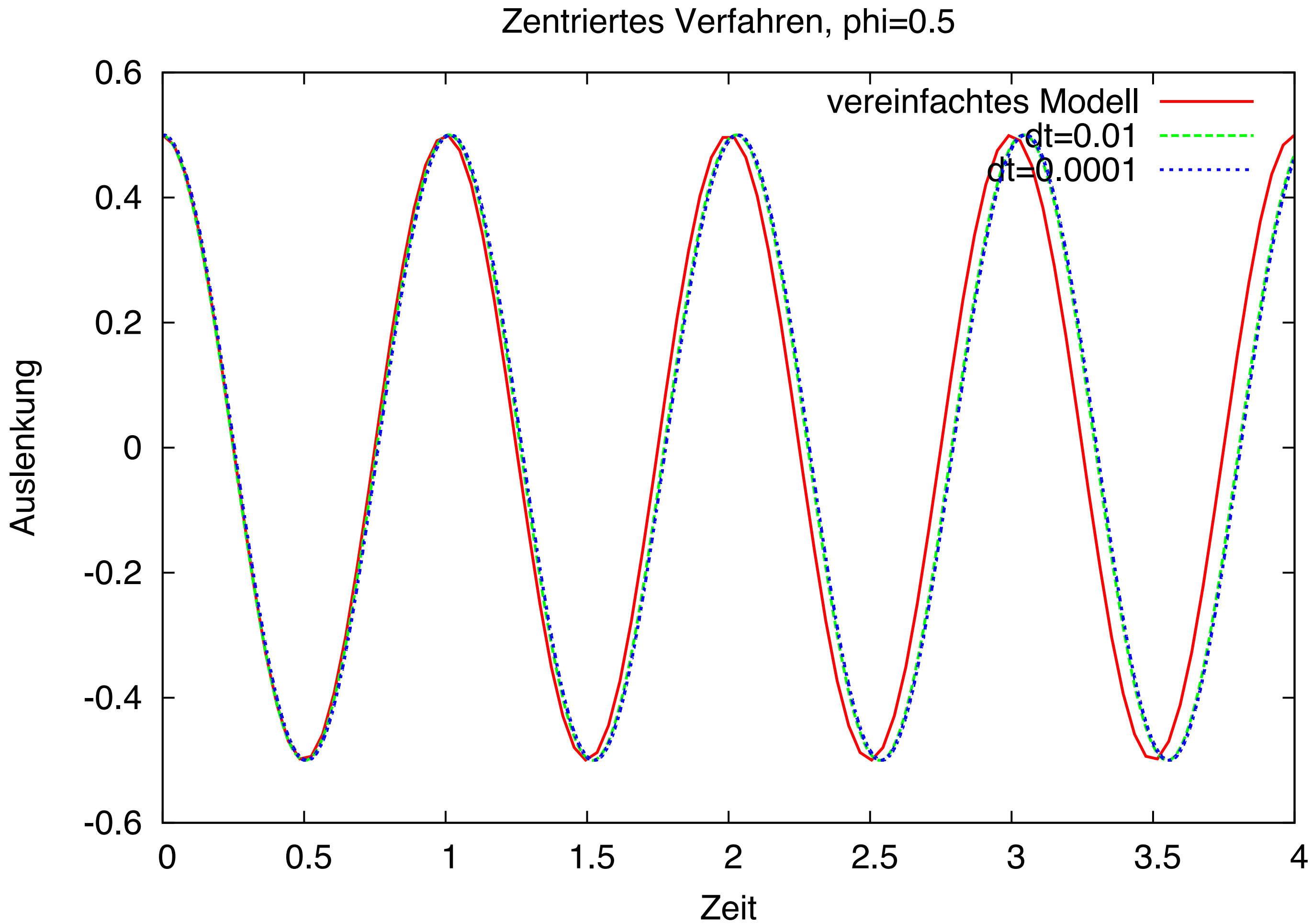
Zentrales Verfahren



Im Unterschied zum expliziten Euler scheint das Verfahren bei festem Δt und $t \to \infty$ nicht unbeschränkt zu wachsen.

Experiment 3: $\phi_0 = 0.5 \approx 28.6°$

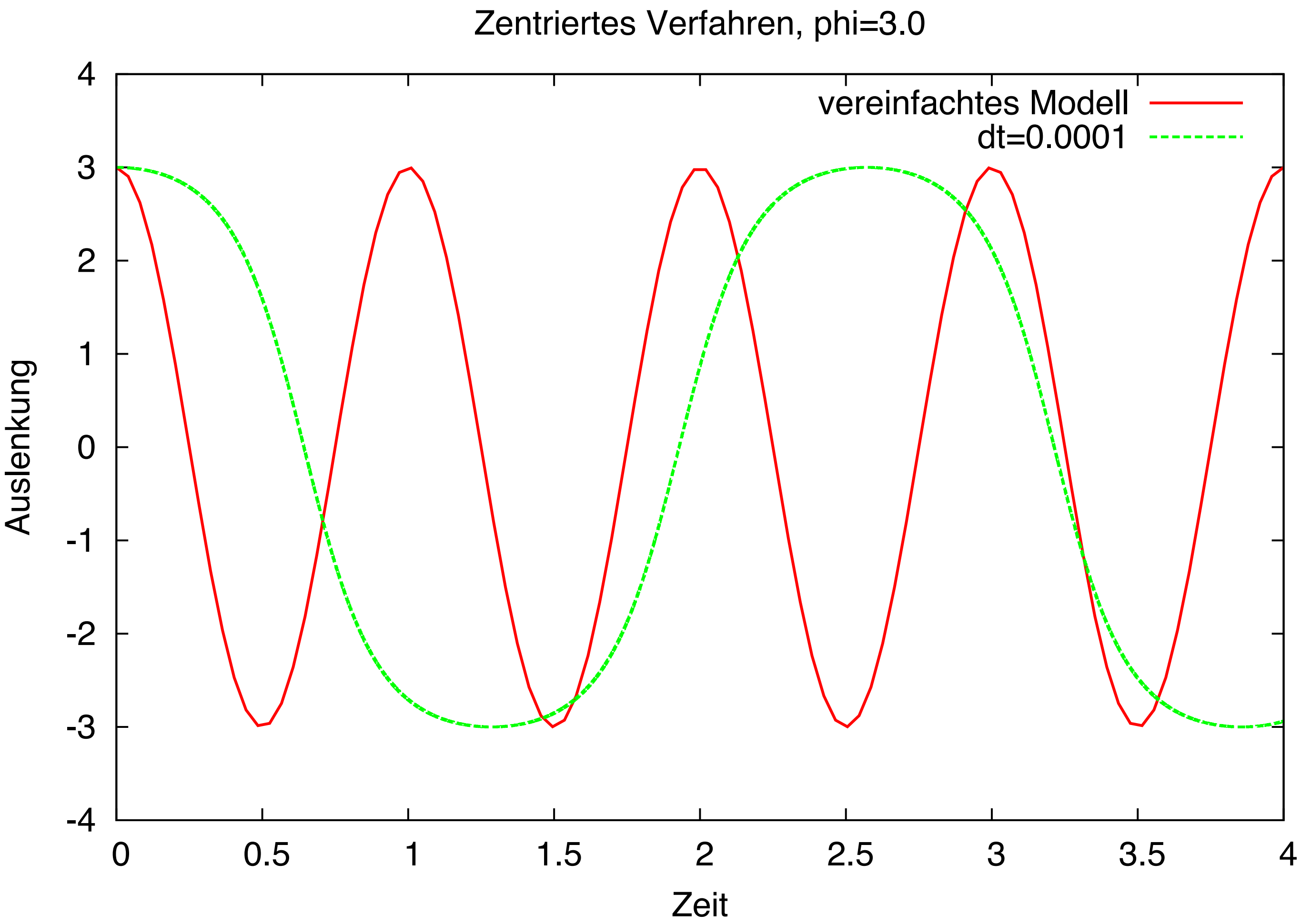
Zentrales Verfahren



Selbst bei 28.6° ist die Übereinstimmung noch einigermaßen passabel.

Experiment 4: $\phi_0 = 3.0 \approx 171°$

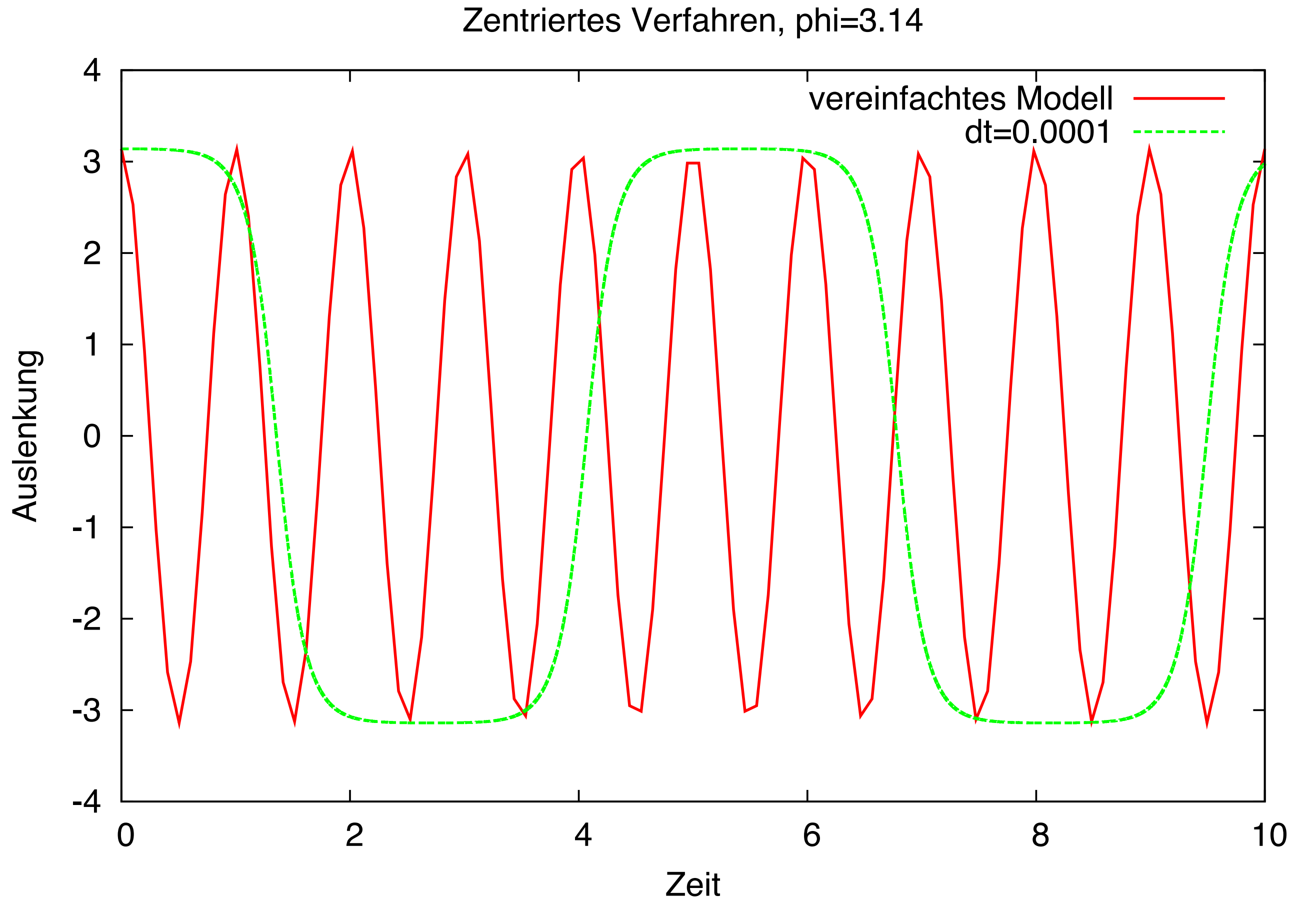
Zentrales Verfahren



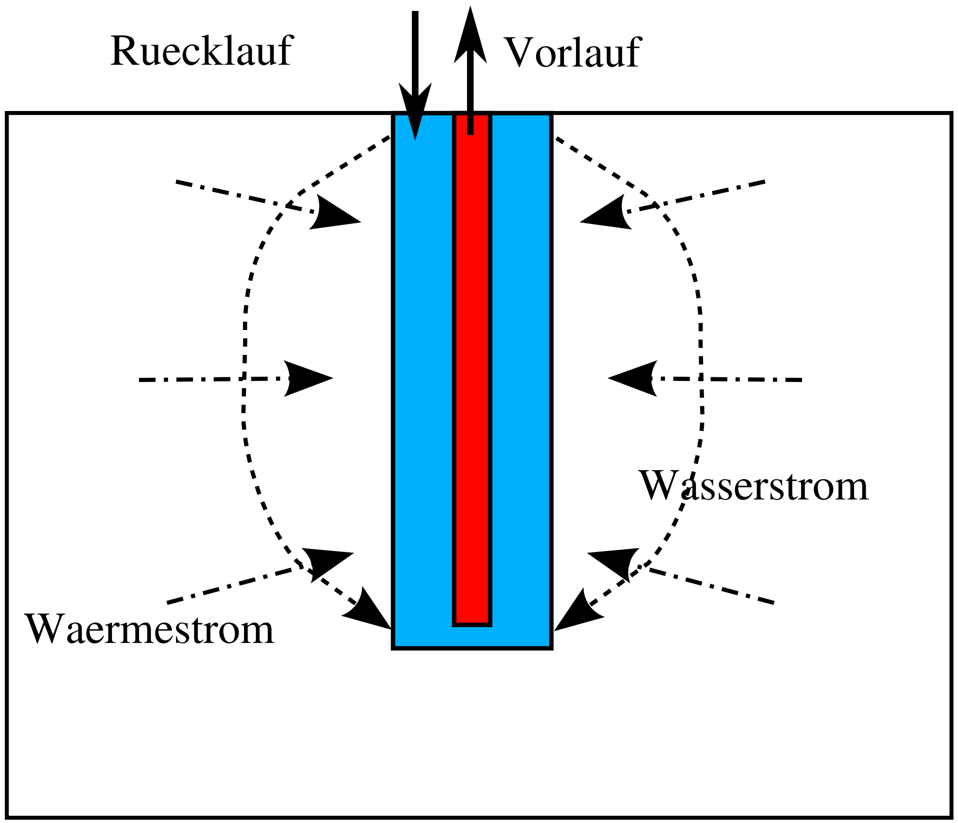
Für große Auslenkungen ist das vereinfachte Modell völlig unbrauchbar. Die Form der Schwingung ist kein Kosinus mehr.

Experiment 5: $\phi_0 = 3.14 \approx 179.91°$

Zentrales Verfahren



Das Pendel wird nahe π immer langsamer. Das ist die Schiffschaukel, die fast auf dem Kopf steht. Wie würde denn die Kurve bei einer umlaufenden Schiffschaukel aussehen?



- Grundwasserströmung gekoppelt mit Wärmetransport.
- Welche Leistung erzielt so eine Anlage?

Modell für eine Geothermieanlage

- *Strömung des Wassers* in und um das Bohrloch

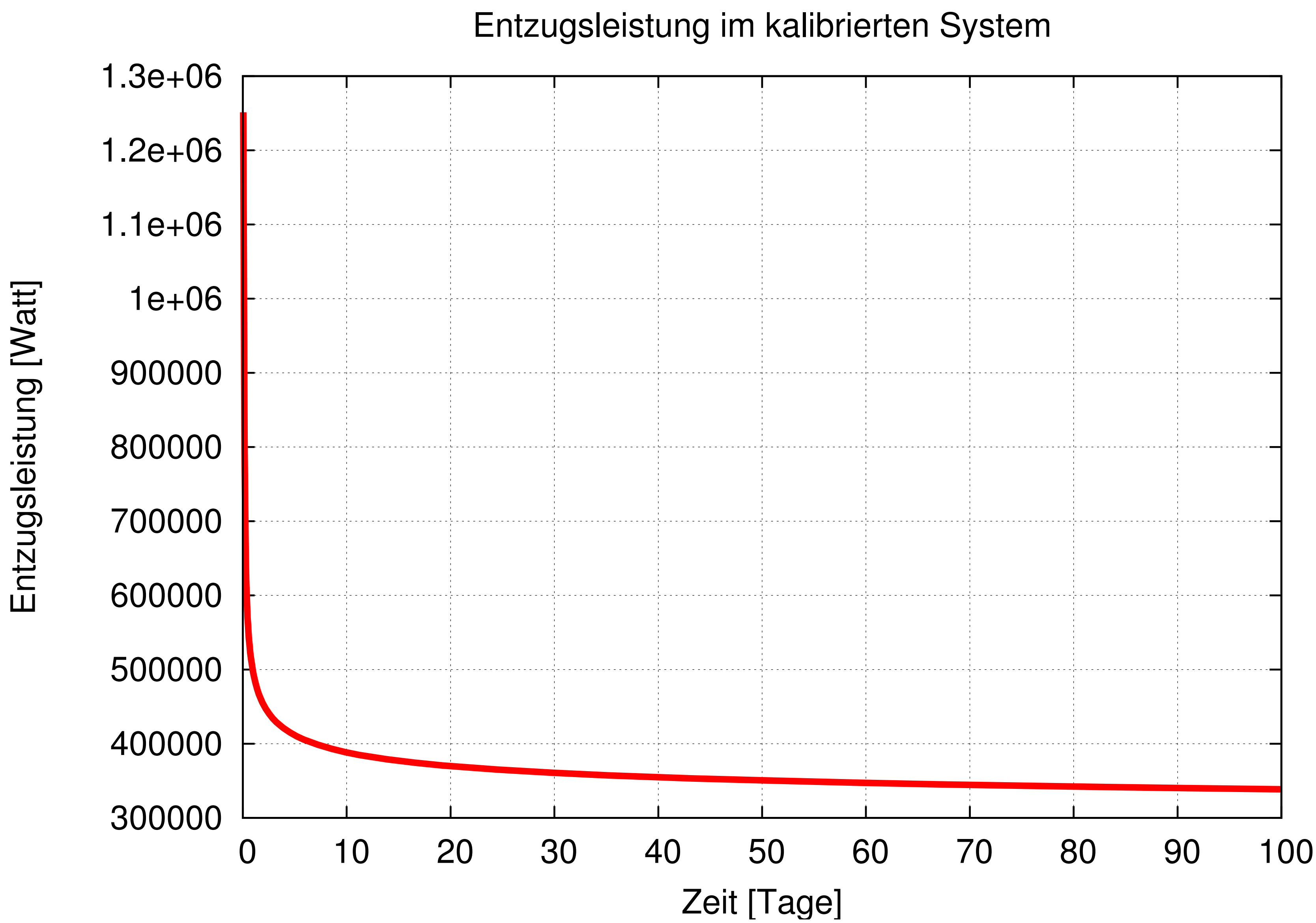
$$\begin{aligned} \nabla \cdot u &= f, \\ u &= -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \varrho_w G) \end{aligned}$$

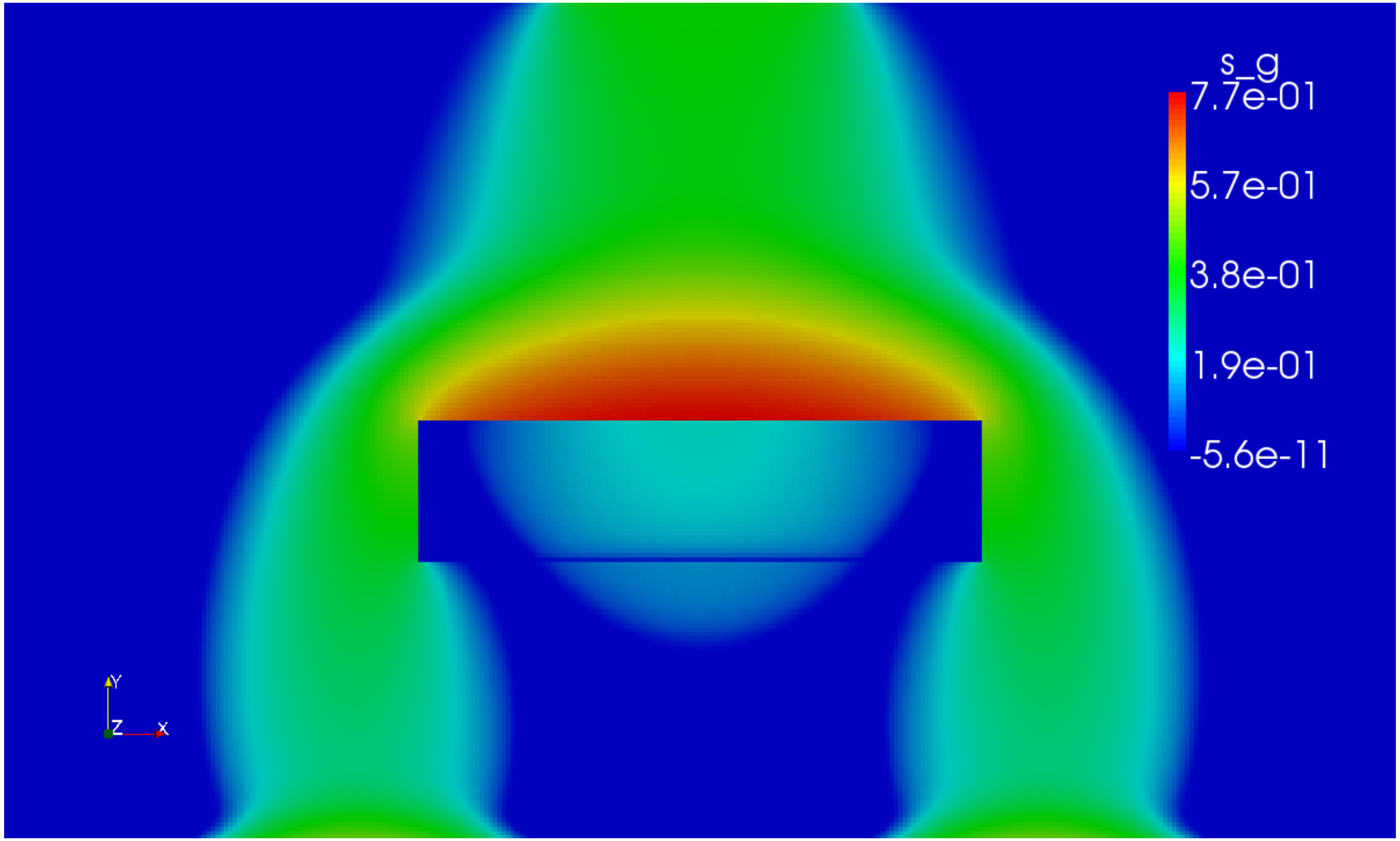
- Transport der Wärme durch *Konvektion* und *Wärmeleitung*

$$\begin{aligned} \frac{\partial(c_e \varrho_e T)}{\partial t} + \nabla \cdot q + c_w \varrho_w f\, T &= g, \\ q &= c_w \varrho_w u T - \lambda \nabla T \end{aligned}$$

in Abhängigkeit diverser *Parameter*: Bodendurchlässigkeit, Wärmekapazität, Dichte, Wärmeleitfähigkeit, Pumprate sowie Rand- und Anfangsbedingungen.

Entzugsleistung





- Wo erreicht der Schadstoff welche Konzentrationen?
- Wie bekommt man den Schadstoff wieder weg?
- Wohin bewegt sich gelöster Schadstoff?

Inhalt der Vorlesung

Wir werden in dieser Vorlesung die folgenden Themengebiete behandeln:

- Grundbegriffe, Gleitpunktzahlen, Gleitpunktarithmetik
- Direkte Methoden zur Lösung linearer Gleichungssysteme
- Interpolation und Approximation
- Numerische Integration
- Iterationsverfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme
- Iterationsverfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme
- Eigenwerte und Eigenvektoren