Einteilung der angewandten und numerischen Mathematik

0.1 Aufgaben

- Modellbildung (mathematische Formulierung für physikalische, technische, biologische, ökonomische, ... Prozesse)
- Diskretes Modell (Reduktion auf ein Modell mit endlich vielen zu bestimmenden Parametern)
- Algorithmenentwurf (Befehlsfolge zur Lösung des diskreten Problems)
- Nachweis der „Konvergenz“ und „Stabilität“
- Komplexität und Effizienz

0.2 Hilfsmittel

- Ana I-III, lineare Algebra, Funktionalanalysis, partielle Differentialgleichungen und andere „reine Mathematik“
- Programmiersprachen
- Rechnerarchitekturen
- Kenntnisse im Anwendungsgebiet
- Bandbreite: Numerische Analysis - wissenschaftliches Rechnen

1 Anwendungsbeispiele

1.1 ComputerTomographie

1.1.1 Modell

Tomographie-Problem:
Rekonstruiere aus den Intensitätsmessungen die innere Struktur von Ω.

1.1.2 Das Tomographie-Problem

x Koordinate längs eines Strahles S,
$I(x)$ Intensität in x, $I(0) = I_0$, $I_S = I(x_D)$, $S = [0, x_D]$
$\varrho(x)$ Absorptionskoeffizient in x: $\varrho(x) \geq 0$ für $x \in [0, x_D]$ und $\varrho = 0$ außerhalb von Ω

Modell der Absorption

Abnahme der Intensität zwischen x und $x+\Delta x$ (Δx klein) ist proportional zur Intensität

$$I(x+\Delta x) - I(x) \sim -I(x)\Delta x$$

Bildchen

Wir setzen daher $I(x+\Delta x) - I(x) = -\varrho(x)I(x)\Delta x + \underbrace{\mathcal{O}(\Delta x^2)}_{\leq C(\Delta x)^2}$.

Teilen durch Δx und $\Delta x \to 0$ führt auf

$$\frac{dI}{dx}(x) = I'(x) = -\varrho(x)I(x)\ \forall x \in S$$

Für $I(x) > 0$ gilt

$$(\log(I(x)))' = \frac{I'(x)}{I(x)} = -\varrho(x)$$

Integration von 0 nach x_D liefert:

$$\log\left(\frac{I_0}{I_S}\right) = \int\limits_0^{x_D} \varrho(x)\,\mathrm{d}x = \int\limits_S \varrho$$

Die Radontransformation

Zu einem Winkel φ betrachten wir ein Bündel von Parallelstrahlen, welche mittels s parametrisiert sind.

$$\omega(\varphi) = [\cos(\varphi); \sin(\varphi)]$$

d.h. $|\omega(\varphi)| = 1$. $\omega(\varphi)^\top$ sei der um $\frac{\pi}{2}$ gedrehte Vektor in mathematisch positiver Richtung (Gegenuhrzeigersinn)

Zu $\varrho : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, gegeben, mit Träger in Ω ($\operatorname{supp}(\varrho) := \overline{\{x \in \mathbb{R}^2 : \varrho(x) > 0\}}$) definieren wir die Radontransformierte $R_\varrho : \mathbb{R} \times [0, 2\pi] \to \mathbb{R}$ wie folgt:

$$R_\varrho(\delta, \varphi) = \int\limits_{\mathbb{R}} \varrho(\delta\omega(\varphi) + t\omega(\varphi)^\top)\,\mathrm{d}t$$

Bemerkung

Die Radontransformierte R ist linear: $R(\lambda\varrho_1 + \varrho_2) = \lambda R_{\varrho_1} + R_{\varrho_2}$ für alle $\lambda \in \mathbb{R}$ und Funktionen ϱ_1, ϱ_2.

Mathematisches Tomographie-Problem:

Finde zu gegebenem $f : \mathbb{R} \times [0, 2\pi) \to \mathbb{R}$ ein $\varrho : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ mit $R_\varrho = f$

Aufgabe:

Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung (unter Voraussetzungen). Diskutiere „Stabilität“: Ist Δf eine Störung des Datums f und $\Delta\varrho$ die daraus resultierende Störung der Lösung ϱ, gilt dann $\|\Delta\varrho\| \leq C\|\Delta f\|$ mit nicht zu großem C ($\|\cdot\|$ Abstand)

1.1.3 Ein diskretes Tomographie-Problem

Datenerhebung ist diskret
$s_1, \dots, s_n$ Parameter der Parallelstrahlen
$\varphi_1, \dots, \varphi_m$ Winkeleinstellungen

Problem: Zu gegebenem $f : \mathbb{R} \times [0, 2\pi) \to \mathbb{R}$ finde $\varrho : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ mit

$$R_\varrho(s_i, \varphi_j) = f(s_i, \varphi_j) \quad i = 1, \dots, n;\ j = 1, \dots, m$$

So nicht lösbar, denn es gibt unendlich viele ϱ, die dies lösen.
Wir benötigen ein endlich dimensionales Modell für ϱ

Idee: Führe Rasterungen ein (Fernsehen, Zeitung)

lexikographische Anordnung: Charakteristische Funktion einer Zeile Z_i : $\chi_{Z_i} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$

$$\chi_{Z_i} = \begin{cases} 1, & x \in Z_i \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Ansatz für $\tilde{\varrho}$ (diskretes Modell)

$$\tilde{\varrho}(x) = \sum_{i=1}^{M} \tilde{\varrho}_i \chi_{Z_i}(x)$$

Die Zahlen $\tilde{\varrho}_i$ sind zu bestimmen aus den Messdaten.
Einsetzen:

$$f(s_i, \varphi_j) \overset{!}{=} R_{\tilde{\varrho}}(s_i, \varphi_j) = R(\sum_{i=1}^{M} \tilde{\varrho}_i \chi_{Z_i})(s_i, \varphi_j) \overset{R \text{ linear}}{=} \sum_{i=1}^{M} \tilde{\varrho}_i (R\chi_{Z_i})(s_i, \varphi_j)$$

Lexikographische Anordnung der Punktepaare $[s_i, \varphi_j]$:

$$\underbrace{[s_1, \varphi_1]}_{=x_1}, \underbrace{[s_2, \varphi_1]}_{=x_2}, \dots, \underbrace{[s_n, \varphi_1]}_{=x_n}, \underbrace{[s_1, \varphi_2]}_{=x_{n+1}}, \dots, \underbrace{[s_n, \varphi_m]}_{=x_N}, \quad N = n \cdot m$$

Eineindeutige Zuordnung

$$x_k \leftrightarrow [s_i, \varphi_j],\ k = (j-1)n + i$$

Wir schreiben: $f_k := f(s_i, \varphi_j)$, $A_{kl} = R\chi_{Z_l}(x_k) = R\chi_{Z_l}(s_i, \varphi_j)$ und erhalten

$$\sum_{l=1}^{M} A_{kl} \tilde{\varrho}_l = f_k \ k = 1, \dots, N$$

Dies kann man als lineares Gleichungssystem $Au = b$ schreiben mit $A = [A_{kl}]_{kl} \in \mathbb{R}^{N,M};\ b = [f_k]_k \in \mathbb{R}^N;\ u = [\tilde{\varrho}_l]_l \in \mathbb{R}^M$

1.2 Wärmeleitung

1.2.1 Wärmeleitungsgleichung

Wärmetransport entlang eines Stabes oder Drahtes (Eindimensionale Struktur)
Bild
$\Omega = (0, 1)$, Variablen: t Zeit, x Ort
$q(t, x)$ Wärmestrom in x zur Zeit t

Erhaltungssatz
Die zeitliche Änderung des Energieinhaltes in $I \subset \mathbb{R}$ ist gleich der Wärmeflussbilanz über dem Rand von I zuzüglich der in I erzeugten oder verbrauchten Energie.

$$\partial_t \left(\int_I u(t, x) \,\mathrm{d}x \right) = q(t, x_+) + q(t, x_-) + \int_I \underbrace{\varrho(t, x)}_{\text{Quelldichte}} \,\mathrm{d}x$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\int_I \left[\partial_t u(t, x) - \partial_x q(t, x) - \varrho(t, x)\right] \mathrm{d}x = 0$$

$I = [x_-, x_+]$
Da I beliebig

$$\partial_t u(t, x) - \partial_x q(t, x) = \varrho(t, x) \quad \forall x \in (0, 1), t > 0$$

Fourier: $q(t, x) \sim \partial_x u(t, x)$, also zum Beispiel

$$q(t, x) = \underbrace{a(t, x)}_{\text{Wärmeleitkoeff.}} \partial_x u(t, x)$$

Wir erhalten dann die Wärmeleitungsgleichung:

$$\partial_t u(t, x) - \partial_x (a(t, x) \partial_x u(t, x)) = \varrho(t, x) \ (*)$$

Ziel: Gegeben $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $\varrho : \mathbb{R}_{>0} \times [0, 1) \to \mathbb{R}$, $\varphi : [0, 1] \to \mathbb{R}$, $a : \mathbb{R}_{>0} \times (0, 1) \to \mathbb{R}_{>0}$, finde $u : \mathbb{R}_{\geq 0} \times (0, 1) \to \mathbb{R}$, welches $(*)$ löst und $u(t, 0) = \alpha$, $u(t, 1) = \beta$ und $u(0, x) = \varphi(x)$

Beispiele:

- keine Erzeugung, kein Verbrauch: $\varrho(t, x) = 0$
- Wärmeabstrahlung: $\varrho(t, x) = \sigma u(t, x)^4$ (bei Draht)
- Chemische Reaktion: $\varrho(t, x) = \omega e^{-\lambda / u(t,x)}$ (Arrhenius Gesetz)

Fragestellungen der Analysis

- Formulierung der Gleichung
- Existenz von Lösungen
- Qualitative Eigenschaften der Lösung

stationäres Problem: Wir betrachten das zeitunabhängige Problem und lassen die Variable t weg (und $A = 1, a = 0, b = 1$). Es ergibt sich das RWP

$$\begin{cases} -u''(x) = \varrho(x) = \varphi(x, u(x)), & \forall x \in (0,1) \\ u(0) = \alpha, \ u(1) = \beta \end{cases}$$

1.2.2 Diskretisierung

Numerik des stationären Modells. Suchen endliches Modell.

Finite Differenzen: Wähle ein uniformes Gitter, d.h. zu $N \in \mathbb{N}$ wählen wir $h = \frac{1}{N+1}$ und „Gitterpunkte“ $x_i = ih$ für $i = 0, \dots, N+1$ ($N+2$ Punkte).
Wir suchen Approximationen u_i an $u(x_i)$.
Randbedingungen $u_0 = \alpha, \ u_{N+1} = \beta$

$$\begin{aligned} u'(x_i) &\approx \frac{u_i - u_{i-1}}{h} \\ u''(x_i) &\approx \frac{u'(x_{i+1}) - u'(x_i)}{h} \approx \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \end{aligned}$$

Also:

$$\begin{aligned} u_0 &= \alpha, \\ -u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1} &= h^2\varphi(x_i, u_i) \quad i = 1, \dots, N \\ u_{N+1} &= \beta \end{aligned}$$

Als Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} 0 \\ \varphi(x_1, u_1) \\ \vdots \\ \varphi(x_N, u_N) \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta \end{bmatrix}$$

$\Leftrightarrow Au_h = \Phi(u_h)$ mit $A \in \mathbb{R}^{N+2,N+2}, \ u_h \in \mathbb{R}^{N+2}, \ \Phi : \mathbb{R}^{N+2} \to \mathbb{R}^{N+2}$
Besteht rechts keine Abhängigkeit von u_h, so ist dies ein lineares Gleichungssystem. Andernfalls ist es ein Nullstellenproblem:

$$F(u_h) = Au_h - \Phi(u_h) \stackrel{!}{=} 0$$

Fragestellungen der Numerischen Analysis:

1. Gilt $u_n \to u$ für $N \to \infty$? In welchem Sinne?

2. Wie findet man Nullstellen von F (N groß)?

3. Wie löst man Gleichungssysteme für große N?

4. A ist „dünnbesetzt“, d.h. hat nur 3 Nichtnullelemente pro Zeile, unabhängig von N.

5. Lösbarkeit der diskreten Gleichung? Eigenschaften von u_h

6. Verfahren effizient? Wie viele Operationen braucht ein Algorithmus? Was wäre ggf. optimal?

7. Aussagen über die Güte des Resultats

1.3 Berechnung elektrostatischer Felder

Bild
$\Phi : \mathbb{R}^2 \setminus \Omega \to \mathbb{R}$ „Potenzial“, $\Phi(x) \to 0$ für $|x| \to \infty$
Elektrisches Feld: $E = -\nabla\Phi = \begin{bmatrix} -\partial_1\Phi \\ -\partial_2\Phi \\ -\partial_2\Phi \end{bmatrix}$

1.3.1 Elektrostatische Potenziale und Felder

Bild $\partial\Omega = \partial O \cup \Gamma$
Wir suchen Φ mit $\Phi = 0$ auf Γ, $\Phi = 1$ auf ∂O.
Φ heißt Porenzial und $E := -\nabla\Phi$ das elektrische Feld (oder $\operatorname{grad}(\Phi)$)

1.3.2 Das Prinzip der virtuellen Arbeit

Wie sieht Φ in Ω aus? Wir definieren eine Menge von Funktionen:

$$U := \{\varphi \in C^1(\Omega, \mathbb{R}) : \ \varphi = 0 \text{ auf } \Gamma, \ \varphi = 1 \text{ auf } \partial O\}$$

die Menge der zulässigen Potenziale. Das gesuchte Potenzial Φ ist dasjenige mit minimaler Feldenergie ε in U, d.h. mit $\varepsilon : U \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ def. durch

$$\varepsilon(\Psi) = \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla\Psi|^2 = \frac{1}{2}\int_\Omega |\partial_1\Psi|^2 + |\partial_2\Psi|^2$$

gilt $\varepsilon(\Phi) = \min_{\Psi\in U} \varepsilon(\Psi)$
Weiter def. wir $U_0 := \{\xi \in C^1(\Omega, \mathbb{R}) : \ \xi = 0 \text{ auf } \partial\Omega\}$. Dann gilt: mit $\Phi \in U$ ist auch

$\Phi + t\zeta \in U$, falls $\zeta \in U_0$ und $t \in \mathbb{R}$ ist. Ist Φ ein Minimum von ε, so wird die reellwertige Funktion $t \mapsto \varepsilon(\Phi + t\zeta)$ stationär in $t = 0$ sein.

$$\varepsilon'(\Phi)[\zeta] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varepsilon(\Phi + t\zeta)|_{t=0} \stackrel{!}{=} 0$$

Es folgt

$$\begin{aligned}
0 &\stackrel{!}{=} \frac{1}{2}\int\limits_\Omega |\nabla(\Phi + t\zeta)|^2 \\
&= \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \cdot \left(\int\limits_\Omega \left\{|\nabla\Phi|^2 + 2t\nabla\Phi\cdot\nabla\zeta + t^2 \cdot |\nabla\zeta|^2\right\}\right) \\
&= \int\limits_\Omega \left\{\nabla\Phi\cdot\nabla\zeta + t|\nabla\zeta|^2\right\}
\end{aligned}$$

d.h. für $t = 0$:

$$0 = \int\limits_\Omega \nabla\Phi\cdot\nabla\zeta \quad \forall \zeta \in U_0$$

„Das Prinzip der virtuellen Arbeit“, „Variatonsgleichung“ Erfüllt Φ die Variationsgleichung, ist es dann ein Minimum?
Sei $\Phi \in U$ beliebig. Dann ist $\Psi - \Phi \in U_0$. Es gilt:

$$\begin{aligned}
\varepsilon(\Psi) &= \varepsilon(\Phi + \underbrace{\Psi - \Phi}_{\in U_0}) \\
&= \varepsilon(\Phi) + \underbrace{\int\limits_\Omega \nabla\Phi\cdot\nabla(\Psi - \Phi)}_{=0} + \frac{1}{2}\int\limits_\Omega |\nabla(\Psi - \Phi)|^2 \varepsilon(\Phi) \\
&\geq \varepsilon(\Phi)
\end{aligned}$$

Sogar: $\varepsilon(\Psi) > \varepsilon(\Phi)$, falls $\Psi \neq \Phi$. Denn: $\int_\Omega |\nabla(\Psi - \Phi)|^2 = 0 \;\Rightarrow \nabla(\Psi - \Phi)(x) = 0 \;\forall x \in \Omega \;\Rightarrow (\Psi - \Phi)(x) = \text{const in } \Omega \;\Rightarrow \Psi = \Phi$ in Ω, da $\Psi - \Phi|_{\partial\Omega} = 0$ ist.

1.3.3 Das Poisson-Problem

Gaußscher Integralsatz:

$$\int\limits_\Omega \nabla\Phi\cdot\nabla\zeta = -\int\limits_\Omega \nabla\cdot\nabla\Phi\zeta \text{ , da } \zeta|_{\partial\Omega} = 0$$

Es gilt $\nabla\cdot\nabla = \operatorname{div}(\operatorname{grad}) = \Delta = \partial_1^2 + \partial_2^2 \;\Rightarrow \int\limits_\Omega \Delta\Phi\zeta = 0 \;\forall\zeta \in U_0$

$$\Rightarrow \Delta\Phi = \partial_1^2\Phi + \partial_2^2\Phi = 0$$

Allgemein: Posisson-Problem
Zu $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $r : \Omega \to \mathbb{R}$ finde $u : \Omega \to \mathbb{R}$ mit

$$\begin{aligned} -\Delta u &= f \text{ in } \Omega \\ u &= r \text{ auf } \Omega \end{aligned}$$

1.3.4 Diskretisierung des Poissonproblems

$\Omega = (0,1)^2$. Gitter sei $z_{ij} = \left[\frac{i}{n+1}, \frac{j}{n+1}\right] = h \cdot [i,j],\ n \in \mathbb{N},\ i,j = 0,\dots,n+1,\ h = \frac{1}{n+1}$
Bild
Ist x_k ein Randpunkt, so gelte $u_k = r(x_k)$ $(u_k \approx u(x_k))$. Für die zweite Ableitung verwenden wir die Formeln aus dem eindimensionalen.

$$\begin{aligned} \partial_1^2 u(x_k) + \partial_2^2 u(x_k) &\approx \frac{1}{h^2}(u_{k+1} - 2u_k + u_{k-1}) + \frac{1}{h^2}\left((u_{k+(n+2)} - 2u_k + u_{k-(n+2)}\right) \\ &= \frac{1}{h^2}\left(u_{k+(n+2)} + u_{k+1} - 4u_k + u_{k-1} - u_{k-(n+2)}\right) \end{aligned}$$

für x_k im Inneren von Ω. Wir erhalten das Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} -u_{k+(n+2)} - u_{k+1} + 4u_k - u_{k-1} - u_{k-(n+2)} &= h^2 f(x_k) \text{ für } x_k \in \Omega \\ u_k &= r(x_k) \text{ für } x_k \in \partial\Omega \end{aligned}$$

Formuliere dies als ein Gleichungssystem in Matrixschreibweise für den Vektor $[u_1, \dots, u_N]$
Differenzenstern (hier „5-Punkte-Stern“)

Bild

Das Gleichungssystem in lexikographischer Anordnung

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & -1 & & -1 & 4 & 1 & -1 \\ & & & & & & \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{n+3} \\ u_{n+4} \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{n+3} \\ h^2 f_{n+4} \\ \end{bmatrix}$$

Reduktion der Randwerte: Ziel: Eliminiere die trivialen Gleichungen
Beispiel: 1d

1. $u_0 = \alpha$
2. $-u_2 + 2u_1 - u_0 = h^2 f_1$