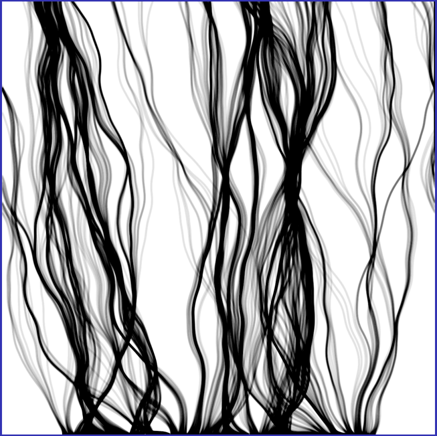
Angewandte Mathematik



Dr. rer. nat. Johannes Riesterer

Algorithmus

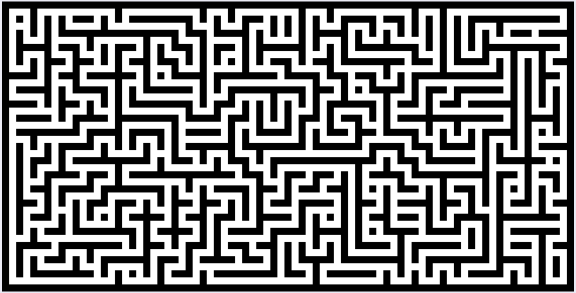
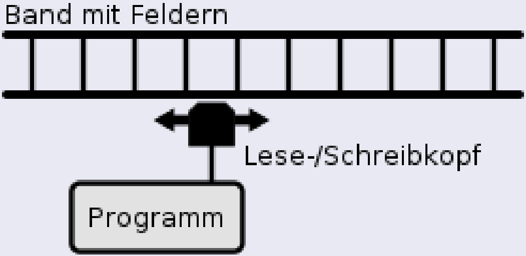


Figure: Quelle: Wikipedia

Algorithmus Informell

Ein Algorithmus ist eine eindeutige, endliche Handlungsvorschrift zur Lösung eines Problems oder einer Klasse von Problemen. Algorithmen bestehen aus endlich vielen, wohldefinierten Einzelschritten.

Algorithmus Formal



Algorithmus

Figure: Quelle: Wikipedia

Gleitkommazahl

Eine Gleitkommazahl ist eine Zahl z der Form

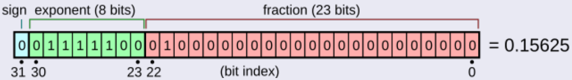
$$z = ad^e; \quad a = (\pm) \sum_{i=1}^{l} c_i d^{-i}$$

$$e, c_i \in \{e_{min}, \cdots, e_{max}\} \subset \mathbb{Z}$$

Gleitkommazahl $d = 10$

$$0.314156 \cdot 10^1$$

Gleitkommazahl Darstellung $d = 2$



Schaltwerke

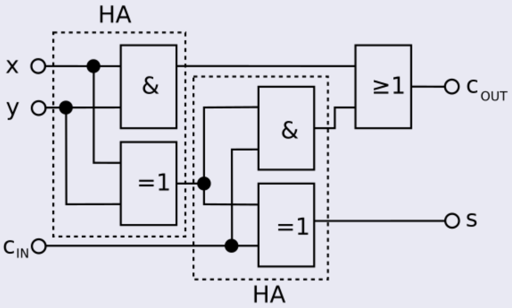


Figure: Quelle: Wikipedia

Gleitkommazahl

Ist x eine reelle Zahl so gibt es eine Gleitkommazahl $fl(x)$ mit

$$\frac{|x - fl(x)|}{|x|} \leq eps := d^{1-l}/2$$

Gleitkommazahl

Für eine exakte Operation $\circ \in \{+, -, \cdot, :\}$ gilt für die entsprechende Ausführung $\hat{\circ}$ auf einem Computer

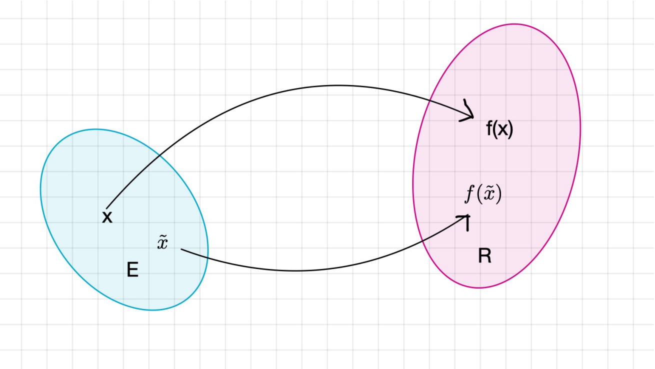
$$a \hat{\circ} b = (a \circ b)(1 + \epsilon), \;\; \epsilon \leq eps$$

Eingabe - > Algorithmus -> Ausgabe

Eingabe mit Fehler	->	Algorithmus mit Fehler	->	Ausgabe mit Fehler

Konditionszahl

Die Kondition beschreibt die Abhängigkeit der Lösung eines Problems von der Störung der Eingangsdaten. Die Konditionszahl stellt ein Maß für diese Abhängigkeit dar. Sie beschreibt das Verhältnis von $E := \{\tilde{x} \mid ||\tilde{x} - x|| \leq eps||x||\}$ zu $R := \{f(\tilde{x}) \mid \tilde{x} \in E\}$.



Kondition eines Problems

Die absolute Konditionierung eines Problems (f, x) ist die Kleinste Zahl κ_{abs} mit

$$||f(x) - f(\tilde{x})|| \leq \kappa_{abs} ||x - \tilde{x}||, \; \tilde{x} \to x$$

Kondition eines Problems

Die relative Konditionierung eines Problems (f, x) ist die Kleinste Zahl κ_{rel} mit

$$\frac{||f(x) - f(\tilde{x})||}{||f(x)||} \leq \kappa_{rel} \frac{||x - \tilde{x}||}{||x||}, \; \tilde{x} \to x$$

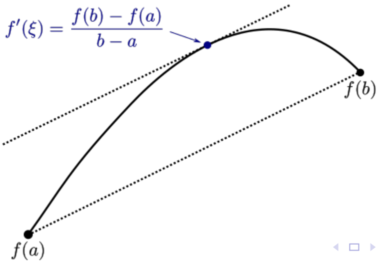
Mittelwertsatz

Ist $f : U \to \mathbb{R}$ eine differenziertere Funktion und $a, b \in U$ Punkte, deren Verbindungsstrecke in U verläuft. Dann gibt gibt es einen Punkt ξ auf dieser Verbindungsstrecke mit

$$f(b) - f(a) = df(\xi)(b - a) = f'(\xi)(b - a)$$

Beweis Mittelwertsatz

Die Verbindungsstrecke ist gegeben durch $\gamma(t) := a + t(b-a)$ mit $t \in [0,1]$. Für $F := f \circ \gamma : [0,1] \to \mathbb{R}$ gilt $f(b) - f(a) = F(1) - F(0)$. Nach der Kettenregel ist F differenzierbar. Mit dem eindimensionalen Mittelwertsatz gibt es also ein $\tau \in (0,1)$ mit $F(1) - F(0) = F'(\tau)$. Mit der Kettenregel folgt $F'(\tau) = df(\gamma(\tau))(b-a)$ und somit folgt mit $\xi = \gamma(\tau)$ die Behauptung.



Konditionszahl

Ist $f : U \to \mathbb{R}^m$ differnzierbar, so lässt dich mit dem Mittelwertsatz die Konditionszahlen berechnen durch

$$\kappa = ||f'(x)||$$

$$\kappa_{rel} = \frac{||x||}{||f(x)||}||f'(x)||$$

mit der Operatornorm $||h|| := \sup_{||x||=1} ||h(x)||$

Konditionszahl Addition/Subtraction

Für $f : (x, y) := x \pm y$ ist $f'(x, y) = (1, \pm 1)$ und dem Betrag als Norm auf $\mathbb{R}$ und der Norm $||(x, y)|| := |x| + |y|$ ist

$$\kappa = 2$$

$$\kappa_{rel} = 2\frac{|a| + |b|}{|a \pm b|}$$

Für die Addition ist $\kappa_{rel} = 2$ und damit gut konditioniert. Für die Subtraktion zweier fast gleich großer Zahlen ist $|a - b| << |a| + |b|$ und damit ist in diesem Fall $\kappa_{rel} >> 1$ und damit schlecht konditioniert.

Message Passing Interface (MPI)

MPI ist ein Standard für die Kommunikation zwischen Prozessen in einem parallelen Rechensystem. Es ermöglicht die Entwicklung von standardtisierten parallelen Anwendungen, die auf verschiedenen Rechnerarchitekturen laufen können.

Message Passing Interface (MPI)

- **Punkt-zu-Punkt-Kommunikation:** Direkte Kommunikation zwischen zwei Prozessen mittels Senden und Empfangen von Nachrichten.
- **Kollektive Kommunikation:** Kommunikation zwischen einer Gruppe von Prozessen, z.B. Broadcast, Scatter, Gather und Reduce.
- **Synchronisation:** Mechanismen zur Synchronisation von Prozessen, z.B. Barrieren.
- **Kommunikatoren:** Gruppen von Prozessen, die miteinander kommunizieren können.
- **Rang:** Jeder Prozess in einem Kommunikator hat einen eindeutigen Rang, der zur Identifikation dient.

Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation (PETSc)

PETSc ist eine Bibliothek für die Lösung wissenschaftlicher Rechenprobleme, die auf parallelen und verteilten Systemen ausgeführt werden. Bietet Werkzeuge für die Entwicklung von skalierbaren und effizienten numerischen Anwendungen.

- PETSc nutzt MPI für die Kommunikation zwischen Prozessen in parallelen Umgebungen.
- Unterstützt Punkt-zu-Punkt- und kollektive Kommunikation, um Daten zwischen Prozessen auszutauschen.
- Ermöglicht die Verteilung von Matrizen und Vektoren über mehrere Prozesse.
- Lineare und nichtlineare Gleichungslöser
- Eigenwertproblemlöser
- Zeitabhängige Probleme
- Preconditioner für die Beschleunigung der Konvergenz

NumPy

NumPy ist eine Bibliothek für die Programmiersprache Python, die Unterstützung für große, mehrdimensionale Arrays und Matrizen bietet. Ermöglicht effiziente numerische Berechnungen und Datenmanipulationen.

Grundprinzipien von NumPy

- **Arrays:** NumPy bietet das ‘ndarray‘-Objekt, das effiziente Speicher- und Rechenoperationen ermöglicht.
- **Broadcasting:** Ermöglicht die Durchführung von Operationen auf Arrays unterschiedlicher Größe.
- **Vektorisierung:** Vermeidet explizite Schleifen durch die Anwendung von Operationen auf ganze Arrays.
- **Universelle Funktionen (ufuncs):** Funktionen, die elementweise Operationen auf Arrays durchführen.

Vorteile und Anwendungsgebiete von NumPy

- Hohe Leistung durch Implementierung in C
- Umfangreiche Bibliothek von mathematischen Funktionen
- Integration mit anderen wissenschaftlichen Python-Bibliotheken wie SciPy und Matplotlib