

## 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  $\Omega$ .

#### 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  $\Omega$

### Modell der Absorption

Abnahme der Intensität zwischen  $x$  und  $x + \Delta x$  ( $\Delta x$  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  $\Delta x$  und  $\Delta x \rightarrow 0$  führt auf

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

Für  $I(x) > 0$  gilt

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

Integration von 0 nach  $x_D$  liefert:

$$\log\left(\frac{I_0}{I_S}\right) = \int_0^{x_D} \varrho(x) dx = \int_S \varrho$$

### Die Radontransformation

Zu einem Winkel  $\varphi$  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 (Gegenuhreigersinn)

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

$$R_\varrho(\delta, \varphi) = \int_{\mathbb{R}} \varrho(\delta\omega(\varphi) + t\omega(\varphi)^\top) dt$$

### 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  $\varrho_1, \varrho_2$ .

### Mathematisches Tomographie-Problem:

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

### Aufgabe:

Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung (unter Voraussetzungen). Diskutiere „Stabilität“: Ist  $\Delta f$  eine Störung des Datums  $f$  und  $\Delta\varrho$  die daraus resultierende Störung der Lösung  $\varrho$ , 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  $f : \mathbb{R} \times [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}$  finde  $\varrho : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  mit

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

So nicht lösbar, denn es gibt unendlich viele  $\varrho$ , die dies lösen.

Wir benötigen ein endlich dimensionales Modell für  $\varrho$

**Idee:** Führe Rasterungen ein (Fernsehen, Zeitung)

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

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

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:

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

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

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

Eindeutige Zuordnung

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

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

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

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 Wärmefflussbilanz über dem Rand von  $I$  zuzüglich der in  $I$  erzeugten oder verbrauchten Energie.

$$\begin{aligned}\partial_t \left( \int_I u(t, x) \, dx \right) &= q(t, x_+) - q(t, x_-) + \int_I \underbrace{\varrho(t, x)}_{\text{Quelldichte}} \, dx \\ &\Leftrightarrow \\ \int_I [\partial_t u(t, x) - \partial_x q(t, x) - \varrho(t, x)] \, dx &= 0\end{aligned}$$

$I = [x_-, x_+]$

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:

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

Ziel: Gegeben  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ ,  $\varrho : \mathbb{R}_{>0} \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\varphi : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $a : \mathbb{R}_{>0} \times (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$ , finde  $u : \mathbb{R}_{\geq 0} \times (0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$ , 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

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

### 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  $A \in \mathbb{R}^{N+2, N+2}$ ,  $u_h \in \mathbb{R}^{N+2}$ ,  $\Phi: \mathbb{R}^{N+2} \rightarrow \mathbb{R}^{N+2}$

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  $u_n \rightarrow u$  für  $N \rightarrow \infty$ ? 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

$\Phi : \mathbb{R}^2 \setminus \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  „Potenzial“,  $\Phi(x) \rightarrow 0$  für  $|x| \rightarrow \infty$

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  $\Phi$  mit  $\Phi = 0$  auf  $\Gamma$ ,  $\Phi = 1$  auf  $\partial O$ .

$\Phi$  heißt Potenzial und  $E := -\nabla\Phi$  das elektrische Feld (oder  $\text{grad}(\Phi)$ )

#### 1.3.2 Das Prinzip der virtuellen Arbeit

Wie sieht  $\Phi$  in  $\Omega$  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  $\Phi$  ist dasjenige mit minimaler Feldenergie  $\varepsilon$  in  $U$ , d.h. mit  $\varepsilon : U \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$  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  $\Phi$  ein Minimum von  $\varepsilon$ , so wird die reellwertige Funktion  $t \mapsto \varepsilon(\Phi + t\zeta)$  stationär in  $t = 0$  sein.

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

Es folgt

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

d.h. für  $t = 0$  :

$$0 = \int_{\Omega} \nabla\Phi \cdot \nabla\zeta \quad \forall \zeta \in U_0$$

**„Das Prinzip der virtuellen Arbeit“, „Variationsgleichung“** Erfüllt  $\Phi$  die Variationsgleichung, ist es dann ein Minimum?

Sei  $\Phi \in U$  beliebig. Dann ist  $\Psi - \Phi \in U_0$ . Es gilt:

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

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

### 1.3.3 Das Poisson-Problem

Gaußscher Integralsatz:

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

Es gilt  $\nabla \cdot \nabla = \text{div}(\text{grad}) = \Delta = \partial_1^2 + \partial_2^2 \Rightarrow \int_{\Omega} \Delta\Phi \zeta = 0 \quad \forall \zeta \in U_0$

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

### Allgemein: Poisson-Problem

Zu  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  und  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $r : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  finde  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  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.

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

für  $x_k$  im Inneren von  $\Omega$ . 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

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

**Reduktion der Randwerte:** Ziel: Eliminiere die trivialen Gleichungen

Beispiel: 1d

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