

# Wissenschaftliches Rechnen: Alles ist Approximation

*oder:*

*‘geschickt falsch’ und ‘richtig falsch’ rechnen  
als Paradigma des Scientific Computing*

Winfried Auzinger

Institut für Analysis und Scientific Computing  
Technische Universität Wien

[www.math.tuwien.ac.at/~winfried](http://www.math.tuwien.ac.at/~winfried)

Woche der freien Bildung  
Resselpark, Wien, 18. Mai 2010

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: ‘Alles  
ist Zahl’ am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Überblick

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

## Ganze Zahlen (*integer*)

- Ganze Zahlen am Computer (Digitalrechner) intern in festen Format dargestellt – nicht dezimal sondern *binär*:
- Es gibt nur zwei Ziffern (= bits): 0 und 1.
- Beispiel:  
dezimal  $123 = 1 \cdot 10^2 + 2 \cdot 10^1 + 3 \cdot 10^0 = \dots$   
 $\dots =$  binär  $1111011 =$   
 $1 \cdot 2^6 + 1 \cdot 2^5 + 1 \cdot 2^4 + 1 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0$
- Standardformat: z.B. 32 bit – maximal etwa 10-stellige Dezimalzahlen darstellbar.
- $+$ ,  $-$ ,  $*$  eingeschränkt auf diesem Bereich exakt – darüber hinaus nicht durchführbar.
- Genügt für einfache Zahlenrechnungen, Buchhaltung, etc. ...

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

## Exakte Arithmetik

- ¿ Kann man am Computer *exakt* rechnen ?
- *Im Prinzip ja* – nur dauert es unendlich lange und benötigt unendlich viel Speicher.
- Kleine Einschränkung: Mit *rationalen* Zahlen (Brüchen) kann man in endlicher Zeit und mit endlichem Speicheraufwand exakt rechnen, z.B.

$$\frac{1231}{98098} \cdot \frac{98877}{6565} = \frac{121717587}{644013370}$$

- Das Problem: Die Brüche werden immer komplizierter – für viele Rechenoperationen steigt Rechen- und Speicheraufwand extrem schnell an. Man kann keine festen Zahlenformate verwenden.
- Wurzeln,  $\pi$ , etc. sind rational zu approximieren.

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

## Gleitpunkt-Arithmetik

- ¿ Ist es *notwendig*, am Computer exakt zu rechnen ?
  - *Im Prinzip nein* – aber im Parteiprogramm steht 'ja'.
- ¿ Was tut der Klassenfeind ?
  - Er verwendet Gleitpunktarithmetik – ein durch und durch reaktionäres Konzept.
- ¿ Ist das *exakt* ?
  - *Im Prinzip nein* – aber die Numeriker behaupten, das ist O.K.
- ¿ Hat der Parteitag Beschlüsse gefasst ?
  - *Im Prinzip ja* – nur kümmert sich niemand darum. Alle verwenden Gleitpunktarithmetik.

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

## Gleitpunkt-Arithmetik als Approximation

- ¿ Was heißt überhaupt *exakt* ?
- Jede praktische Berechnung geht von *Daten* aus (Messwerte, Materialparameter, Naturkonstanten)
- 'Exakte' Daten hat man so gut wie nie. Wozu mit inexakten Daten exakt rechnen?
- *Gleitpunktarithmetik* bedeutet:
  - Verwende ein festes Zahlenformat
  - Von jeder Zahl wird nur eine gewisse Anzahl von Stellen berücksichtigt. Z.B.:

$$x = \frac{2142714234234}{7698798765} = 278.31799474680775085826002882931568610755862508$$

wird ersetzt durch

$$\tilde{x} = 278.3179947468078 = 0.2783179947468078 \cdot 10^3$$

- Arithmetik ist nicht exakt: Jedes Einzeloperation wird auf gewähltes Format *gerundet*. Abgesehen von Spezialfällen ist jede einzelne Basisoperation eine (sehr genaue) *Approximation*.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159 \dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

*Gleitpunkt-Arithmetik: Industriestandard (double)*

- Ca. 16 Dezimalstellen: Industriestandard gemäß ANSI/IEEE 754-1985; IEC 60559-1989  
... *double precision*, 64 bit Binärcodierung
- 'Stellen' und 'Exponent' (d.h. die Position des Dezimalpunktes) werden separat gespeichert
- Sehr, sehr kleine und sehr, sehr große Zahlen nicht darstellbar (Grenze ca. bei  $10^{\pm 300}$ )
- Auf modernen Computerchips: Arithmetik (+, -, \*, /,  $\sqrt{\cdot}$ , ...) sind 'fest verdrahtete' Instruktionen (Maschinenbefehle)  
(/ und  $\sqrt{\cdot}$  beruhen auf Approximationsverfahren!)
- Kompliziertere mathematische Funktionen (sin, cos, exp, ...) sind als Softwarebausteine in Anwendungsprogramme integriert – auf Basis von analytisch/numerischen Approximationsalgorithmen.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

## Gleitpunkt-Arithmetik: Anmerkungen

- Frage: Ich habe mir heimlich einen Computer mit Gleitpunktarithmetik besorgt. Er kann in einer Sekunde eine Milliarde Rechenoperationen ausführen. Ich hab's probiert. Ist das Ergebnis O.K. ?
  - *Im Prinzip ja* – es sei denn, das Gegenteil trifft zu.
- ¿ Ist das eine Frage der Politik ?
  - Im Prinzip nein – es sei denn, Sie halten Bildungspolitik für wichtig.
- ¿ Können Sie mich genauer instruieren?
  - *Im Prinzip ja* – aber wir haben jetzt Dienstschluss, und die Ministerin ist anderweitig beschäftigt.

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159\dots$$

Wie war das nochmal mit der Zahl  $\pi$  ?

≈1

- Die Zahl

$$\pi = 3.141592653589793\dots$$

entspricht der Fläche bzw. dem halben Umfang des Kreises mit Radius 1.

- $\pi$ :  $\infty$  viele Dezimalstellen (*transzendente Zahl*)
- 16 Dezimalstellen  $\approx$  verfügbare Rechengenauigkeit auf handelsüblichem Computer (*double*)
- Fehler dieser Approximation ca. im Bereich von Milliardstel von Milliardstel (irrelevant für übliche praktische Anwendungen)
- $\pi$  kann nicht exakt als endliche Dezimal- bzw. Binärzahl angegeben werden. Dies gilt aber bereits für die meisten rationalen Zahlen, z.B.:  $1/3 = 0.3333333333333333\dots$

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159\dots$$

## Eine Approximationsformel

- ¿Wie erhält man 16 Dezimalstellen von  $\pi$  (oder wieviele auch immer) ?
- ... viele Möglichkeiten. Auf **Archimedes von Syrakus** (287–212 v. Chr.) geht eine geometrische Konstruktion zurück (Beispiel für Vorläufer der modernen Integralrechnung):
- *Schreibe dem Kreis ein regelmäßiges 4-Eck, 8-Eck, 16-Eck, etc. ein, berechne die Flächen und verfeinere je nach gewünschter Genauigkeit.*
- Für die Flächen  $\pi_n$  der  $2^n$ -Ecke gibt Archimedes eine *Rekursionsformel* an ( $\pi_2 = 2\sqrt{2}$ ):

$$\pi_{n+1} = 2^n \sqrt{2 \left( 1 - \sqrt{1 - \left( \frac{\pi_n}{2^n} \right)^2} \right)}, \quad n = 2, 3, \dots$$

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159 \dots$$

## Anmerkungen zur Approximationsformel

- ... Das generiert die richtigen Flächenformeln  
Z.B. Fläche des 128-Ecks ( $n = 7$ ):

$$\pi_7 = 64 \sqrt{2 - \sqrt{2 + \sqrt{2 + \sqrt{2 + \sqrt{2 + \sqrt{2}}}}}} \approx 3.1412 \dots$$

(=  $\pi$  auf 4 Stellen genau). Beachte die Asymptotik dieser Formel für  $n \rightarrow \infty$  (eine der vielen bekannten asymptotischen Darstellungen für  $\pi$ ).

- Dabei sind sind Wurzeln auszuwerten – geht nicht exakt. Für Archimedes war das Handarbeit; für den PC ist es Routine (Näherungsalgorithmus fest am Chip ‘verdrahtet’).
- Die Methode ist relativ ‘langsam’ (gute Genauigkeit erfordert eine sehr feine Abtastung des Kreises).

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159\dots$$

## Durchführung am Computer

- ... Rechnung am PC mit 16-stelliger double-Arithmetik in jedem einzelnen Rechenschritt (inklusive den Wurzelauswertungen):
- ...  
n=15: 3.141592654807589  
...  
n=20: 3.141596553704820  
...  
n=25: 3.142451272494134  
...  
n=30: 0.0000000000000000
- ... 9 richtige Dezimalstellen für  $n = 15$ ; danach sukzessiver Genauigkeitsverlust bis hin zu 0.00...  
Kein Programmierfehler!

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159 \dots$$

## Kommentar

- *Also:* Genauigkeit des Endresultates *nicht automatisch garantiert*, obwohl jeder einzelne Schritt auf 16 Dezimalstellen korrekt gerechnet (mit je einem sehr kleinen Rundungsfehler).
- Hätten wir  $\pi_{30}$  sehr genau ausgewertet (d.h. mit sehr hoher Rechengenauigkeit – das geht nur mit spezieller Computeralgebra-Software und ist vergleichsweise ‘langsam’ bzw. ‘teuer’), hätten wir knapp 16 richtige Dezimalstellen von  $\pi$  erhalten.
- *Folgerung:* Ein – im Prinzip korrekter – Algorithmus kann am Computer total scheitern.
- Es gibt auch viele Beispiele für *exakte* Algorithmen (im Gegensatz zu Approximationsformeln wie bei Archimedes), die am Computer genauso scheitern. Beispiel folgt.

# Archimedes und die Berechnung von

$$\pi = 3.14159 \dots$$

*Kann man das reparieren ?*

- Archimedische Formel lässt sich (mathematisch äquivalent) umformen – dann funktioniert es perfekt.
- Wie und warum? – das lernt in den LVAs über Numerische Mathematik.

- Einige Schritte der Archimedes-Approximation umfassen nur 'eine Handvoll' Rechenoperationen.

*Zum Vergleich:* Lösung eines Systems von **1,000** Gleichungen in **1,000** Unbekannten dauert am PC weit unter 1 Sekunde. Dabei werden mehr als **300,000** Rechenoperationen ausgeführt –  
¿ Endgenauigkeit ?

- Wie und warum das O.K. geht – auch das lernt man bei uns.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159 \dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Das leidige Integral

Beispiel: Exakte Lösungsformel unbrauchbar

- Wir alle wissen:

$$\int_a^b \cos x \, dx = \sin b - \sin a$$

- Beispiel (in `double`-Arithmetik:  $a = 1$ ,  $b = 1 + \varepsilon \approx a$  ( $\varepsilon \approx 10^{-10}$ ,  $b$  exakte `double`-Zahl)

- $\rightsquigarrow$

$$\sin b - \sin a = 5.403022473871033 \cdot 10^{-11}$$

- ... nur **6** statt 16 richtige Stellen: 'Auslöschung'
- **sin** wurde korrekt ausgewertet (gerundet)!
- Einen *korrekten* `double`-Wert für das Integral erhält man durch geeignete *Approximation* der Fläche unter dem Integranden.
- **Also**: Die exakte Formel ist hier unbrauchbar. **Man muss approximieren** für ein korrektes Resultat.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159 \dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Das kriechende Pendel

## Einfachste mathematische Beschreibung

- Ein Anwendungsproblem:  
Berechne den Schwingsverlauf eines gedämpften ('abgebremsten') Pendels; Auslenkung (klein) und Drehimpuls am Anfang vorgegeben (Zeitpunkt  $t = 0$ )
- Mathematische Beschreibung ('Kraft = Masse  $\times$  Beschleunigung') führt auf *Differentialgleichung* für den gesuchten Auslenkungswinkel  $\varphi = \varphi(t)$  (z.B. Zeit  $t$  in s):

$$\ddot{\varphi}(t) + \rho \dot{\varphi}(t) + \omega^2 \varphi(t) = 0$$

- $\dot{\varphi}(t)$ : Winkelgeschwindigkeit
- $\ddot{\varphi}(t)$ : Winkelbeschleunigung
- $\rho$  charakterisiert Intensität der Dämpfung (gegeben)
- $\omega$  ergibt sich aus Länge und Masse des Pendels (= Eigenfrequenz bei Abwesenheit von Dämpfung)

# Das kriechende Pendel

## Exakte Lösung

- Je nach Intensität der Dämpfung:  
'Schwingen' oder 'Kriechen'
- Wir betrachten 'Kriechen': Für  $\rho > 2\omega \rightsquigarrow$  Lösung

$$\varphi(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t}$$

- $c_1, c_2$  errechnen sich aus Anfangszustand
- 'Abklingparameter'  $\lambda_1, \lambda_2$ :

$$\lambda_{1,2} = -\frac{\rho}{2} \pm \sqrt{\frac{\rho^2}{4} - \omega^2} < 0$$

- $e^x = \exp(x)$  ... Exponentialfunktion  
(abklingend für  $x < 0$ )
- Anmerkung: 'Schwingen' wäre Kombination aus Exponentialtermen und periodischem Anteil  
(dargestellt mittels [sin](#), [cos](#))

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

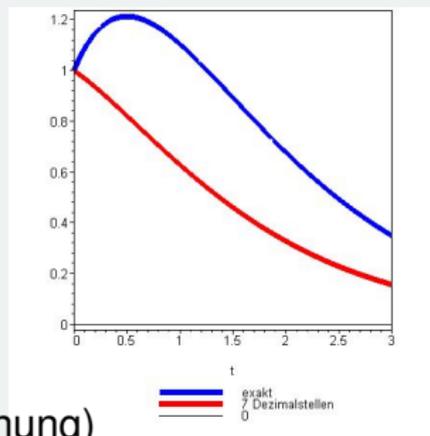
Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Das kriechende Pendel

## Lösung am Computer: Zahlenbeispiel

- Anmerkung:  $\rho = 2\omega$  ist Grenzfall (andere Lösungsformel)
- Wähle  $\rho = 2$  und  $\omega = 1 - \epsilon$ ,  $0 < \epsilon \ll 1$  (Kriechen, nahe am Grenzfall)
- Lösung ( $\epsilon = 10^{-14}$ ), 'exakt' (sehr genau) und in **single precision** (ca. 7 Dezimalstellen) ausgewertet:



rot: qualitativ falsch (Auslöschung)

# Das kriechende Pendel

## Lösung am Computer: Folgerungen

- Eine mathematisch korrekt in ein Computerprogramm umgesetzte Lösungsformel garantiert nicht immer eine genaue Lösung.
- Es ist 'zusätzliches Know-how' zu investieren, etwa Fallunterscheidungen im Code.
- Manchmal helfen rein algebraische Umformungen ('vgl. 'Archimedes'). Im allgemeinen jedoch gilt

### Satz (Auzinger, 2010)

Numerisch umsetzbare und verlässliche Lösungen für (insbesondere analytische, aber auch viele algebraische) Probleme erhält man nur mittels *Approximation*.

- Man *muss* sozusagen falsch rechnen. Aber wir rechnen ohnehin immer 'falsch' (siehe oben).
- Man muss '*richtig falsch rechnen*', d.h. numerisch korrekt und stabil approximieren.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

kriechende  
lel

Exponentialion

ponentialfunktion  
Pendel

roximation als  
parmaßnahme

Anhang

# Das kriechende Pendel

Lösung am Computer: Wie ist das mit **Artificial Intelligence** ?

- Stand der Technik: Lösungsalgorithmen sind im Detail genau zu programmieren, mit verschiedensten Fallunterscheidungen je nach Problem, Problemgröße und -struktur, Hardware, ...
- Fallunterscheidung, Reagieren auf *exceptions* usw.
- Was braucht man dazu?  $\rightsquigarrow$  Kompetenz in mathematischen Methoden, Numerischen Algorithmen, Programmierung.
- Später vielleicht (?) Der Rechner reagiert 'selbständig' auf Ausnahmesituationen und ergreift die richtige Maßnahme ... bedeutet Programmieren auf höherer Ebene.
- Beispiel: Moderne mathematische Software ist teilweise auch heute schon so programmiert, dass sie viele Fallunterscheidungen automatisch richtig vornimmt.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Die Exponentialfunktion

oder: von der getakteten zur 'infinitesimalen' Verzinsung

- ¿ Was ist das eigentlich:

$$\exp(x) = e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \dots ?$$

- Nehme  $E = E(0) = 1$  EUR und trage ihn auf die Bank, zu 100% Verzinsung.

- Nach einem Jahr: Verzinstes Kapital

$$E(1) = 1 \cdot (1 + 1) = 2 \text{ EUR.}$$

- Das Kapital liegt bleibt 1 Jahr lang 'eingefroren', dann wird verzinst.

- Der Zinssatz ist mir zu niedrig; einen höheren genehmigt mir die Bank nicht.

- Ich fordere jedoch:

Aufzinsung jedes halbe Jahr (mit halbem Zinssatz):

$$E\left(\frac{1}{2}\right) = \left(1 + \frac{1}{2}\right)E(0) = 1.5$$

$$E(1) = \left(1 + \frac{1}{2}\right)E\left(\frac{1}{2}\right) = \left(1 + \frac{1}{2}\right)^2 E(0) = 2.225$$

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

# Die Exponentialfunktion

Denke Verzinsungsintervall beliebig klein

- Ich fordere: Aufzinsung jeden Monat (1/12 Zinssatz):

$$E(1) = \left(1 + \frac{1}{12}\right)^{12} E(0) \approx 2.613$$

- Denke Verzinsungsintervall beliebig klein:  $n$  mal verzinsen mit Zinssatz  $1/n \cdot 100\%$ ;  $n \rightarrow \infty \rightsquigarrow$

$$E(1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n E(0) = 1 + 1 + 1/2 + 1/6 + \dots = e$$

mit  $e = 2.718281828459045235360287471 \dots$

(Euler'sche Zahl).

- allgemein: 'kontinuierliche Verzinsung' eines Anfangskapitals  $E(0)$  über allgemeinen Zeitraum  $x$ , mit Zinssatz  $100p\%$ :

$$\begin{aligned} E_p(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \underbrace{\left(1 + \frac{px}{n}\right)^n}_{\text{}} \cdot E(0) \\ &= 1 + \frac{(px)^2}{2} + \frac{(px)^3}{6} + \dots = e^{px} \end{aligned}$$

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159 \dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Die Exponentialfunktion

## Approximation von $e^x$

- $e^x$  ist unendliche Reihe (bzw. unendliches Produkt);  
 $e^x$  mit  $x < 0$  entspricht Abklingen statt Aufklingen
- Algebraische approximation mittels Abbruch für  
endliches  $n$ : O.K., aber nur brauchbar für kleine  $x$
- Approximation nur *lokal* z.B. für  $x = 0 \dots 1$
- Fehler berechenbar (bzw. abschätzbar) – Analysis!
- Rückrechnung für beliebige  $x$  unter Ausnützung der  
Eigenschaften der Exponentialfunktion.
- ¿ ‘lokale Genauigkeit O.K.’  $\Rightarrow$   
‘globale Genauigkeit O.K.’ ?  
... erfordert *numerische Stabilität* der Rückrechnung.  
... ähnlich wie bei Pendel: kritische Sonderfälle.
- Lokale Approximation kann noch wesentlich  
effizienter ( ‘billiger’ ) erfolgen –  
ein Thema der *Approximationstheorie*.

# Exponentialfunktion und Pendel

Beispiel für sinnvolle Abstraktion in der Mathematik

- Betrachte Winkel  $\varphi = \varphi(t)$  aus Pendelbeispiel
- Fasse  $\varphi$  und  $\dot{\varphi}$  zu einem Objekt zusammen ('Vektor'):  $\Phi = (\varphi, \dot{\varphi})$
- $\rightsquigarrow$  Pendelgleichung in 'Vektorform':

$$\dot{\Phi}(t) = P \cdot \Phi(t)$$

mit einer 'Abbildung' (Matrix)  $P$ ,  
die das Bewegungsgesetz repräsentiert. Lösung:

$$\Phi(t) = e^{tP} \cdot \Phi(0)$$

mit *matrix exponential*  $e^{tP} = I + P + \frac{P \cdot P}{2} + \dots$

- Approximation von  $e^{tP}$  (ähnlich wie oben angedeutet für  $e^x$ ) liefert *perfekte numerische Lösung*.
- *Hier*: Übergang zu abstrakterer Formulierung plus kompetente Approximation löst das Problem.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Approximation als Sparmaßnahme

Wenn der Rechenaufwand aus dem Ruder läuft...

- Beispiel: Berechnung einer dreidimensionalen Temperaturverteilung  $T(t; x)$  unter gegebenen atmosphärischen Bedingungen ( $t$  = Zeit,  $x$  = Raumvariable);  $\rightsquigarrow$  *partielle Differentialgleichung* für Wärmeleitungsprozess.

- Lösung unter vereinfachten Annahmen:

$$T(t; x) = e^{tP} \cdot T(0; x)$$

mit noch abstrakter definiertem  $P$  und  $e^{tP}$ .

- 'Runterkochen' auf numerischen Algorithmus (per Approximation, insbesondere *Diskretisierung* der Raum- und Zeitvariablen) führt auf eine Folge von Standardproblemen.
- Das Standardproblem: Löse (z.B.) ein System von  $N = 1,000,000$  linearen Gleichungen in  $N = 1,000,000$  Unbekannten (in jedem Zeitschritt!).

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Approximation als Sparmaßnahme

## Ein Lösungsalgorithmus

- Das lineare Gleichungssystem:  $M u = c$ 
  - $M$  ... Koeffizientenmatrix (gegeben,  $N \times N$ )
  - $c$  ... gegebener Vektor (Länge  $N$ )
  - $u$  ... *gesuchter* Vektor (Länge  $N$ )
- Wärmeleitungsproblem:  $M$  hat spezielle Struktur (*positiv definit*), und  $M$  ist 'dünn besetzt'.
- Algorithmus (*Hestenes, Lanczos, Stiefel, ca. 1950*):

### Conjugate Gradient Alg. (CG):

```
 $u_0 := 0; d_0 := r_0 := c;$   
for  $i = 0, 1, \dots$  do  
   $\alpha_i := (r_i \cdot r_i) / (M d_i \cdot d_i);$   
   $u_{i+1} := u_i + \alpha_i d_i$   
   $r_{i+1} := r_i - \alpha_i M d_i;$   
   $\beta_i := (r_{i+1} \cdot r_{i+1}) / (r_i \cdot r_i);$   
   $d_{i+1} := r_{i+1} + \beta_i d_i;$   
end do
```

# Approximation als Sparmaßnahme

*CG-Iteration ist konvergent*

- CG: Beispiel dafür, wie die Existenz des Digitalrechners 'neue Mathematik generiert' hat
- CG ist ein exakter Algorithmus: liefert exakte Lösung nach  $N$  Schritten (abgesehen von Rundung).
- CG ist ein *konvergenter* Algorithmus:
  - Vernünftige Approximation auch bereits bei vorzeitiger Beendigung (nach  $m \ll N$  Schritten)!
  - Ein Maß für die erzielte Genauigkeit wird in jedem Schritt mitgeliefert (Residuum).
- CG ist ein *selbstkorrigierender* Algorithmus: Rundungsfehler verzögern lediglich die Konvergenz, aber zerstören sie nicht.
- Schritte problemlos vektorisier- bzw. parallelisierbar.

Wissenschaftliches Rechnen:  
Alles ist Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles ist Zahl' am Digitalcomputer

Archimedes und die Berechnung von  $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige Integral

Das kriechende Pendel

Die Exponentialfunktion

Exponentialfunktion und Pendel

Approximation als Sparmaßnahme

Anhang

# Approximation als Sparmaßnahme

*CG-Iteration: Nachteile und Optimierungspotential. Der 'Heilige Gral'*

- Algorithmus 'nimmt an', dass vorhergehende Schritte exakt ausgeführt wurden.
  - Dies ist nicht der Fall (Rundung)
  - Wird jedoch durch 'Selbstkorrektur' entschärft.
- CG: Konvergenz *beliebig langsam* für 'hinreichend schwierige', realistische Probleme (typisch:  $N \rightarrow \infty$ )
- 'Heiliger Gral': Will Problem der Dimension  $N$  mittels  $\mathcal{O}(N)$  bzw. Rechenoperationen lösen
  - Weniger geht nicht (auf jede Variable muss mindestens einmal zugegriffen werden)
  - Erfordert *Konvergenzgeschwindigkeit unabhängig von  $N$*  – ist für CG normalerweise nicht gegeben.
- *Abhilfe*: Löse ein modifiziertes Problem: Verschiedenste Techniken zur 'Vorskalierung' der Gleichungen. Erfordert präzises Verständnis der mathematischen Struktur der Aufgabenstellung.

Wissenschaftliches  
Rechnen:  
Alles ist  
Approximation

Winfried Auzinger

Einleitung: 'Alles  
ist Zahl' am  
Digitalcomputer

Archimedes und  
die Berechnung  
von  
 $\pi = 3.14159\dots$

Das leidige  
Integral

Das kriechende  
Pendel

Die Exponential-  
funktion

Exponentialfunktion  
und Pendel

Approximation als  
Sparmaßnahme

Anhang

- Was so alles passieren kann:  
Der Absturz der ersten **Ariane 5** der ESA.
- Ursache: Programmierfehler  
(eher: Schlamperei bzw. Versehen)
- Zitat:  
*The internal SRI\* software exception was caused during execution of a data conversion from 64 bit floating point to a 16 bit signed integer value. The floating point number which was converted had a value greater than what could be represented by a 16 bit signed integer.*
- Was ist passiert: Eine unzulässige Datenkonversion im internen Kontrollsystem (integer overflow) führte zu einer *exception* und damit zum Absturz der Software und damit auch der Rakete.

- Unverzichtbare Grundlagen:  
Lineare Algebra, Analysis, Geometrie, diskrete Mathematik, samt ihrer wichtigsten Algorithmen
- Numerische Methoden nur auf dieser Basis verstehbar.
- Formeln und Rechnen sind wichtig. Aber Formeln sind nur die 'Syntax' der Mathematik. Wichtiger:
  - Inhaltliches, soweit möglich anschauliches Denken
  - Abstraktion ist wertvoll, um allgemeine Strukturen zu erkennen, aber kontraproduktiv, wenn man statt über das Kaninchen nur mehr über den Hut redet ...
  - Denken in Analogien und Anwendungen (Bezug zur 'physikalischen' Realität)
  - Lebenslanges, berufsbegleitendes Lernen; Neugier, Interesse (an Neuem und Alten!); Demut gepaart mit Frustrationstoleranz und Hartnäckigkeit
- Kompetenter Einsatz des Computers: Der Rechner ist das 'Labor' des angewandten Mathematikers. Ein gesundes Maß an Misstrauen ist jedoch angebracht.
- *Kreatives Denken* – was ist das? ... ein schönes Thema ...