Numerische Simulation

Numerische Simulation ist die dritte Säule der Wissenschaft und Technik neben Theorie und Experiment, um Erkenntnisse zu gewinnen, z.B., wenn

- Eigenschaften/Strukturen nicht experimentell zugänglich sind
- Experimente teuer sind (und deshalb nur wenige durchgeführt werden können)
- Theorien durch ihre Vorhersagen gestestet werden sollen

- Ingenieurwissenschaften: Festkörper- und Strömungsmechanik, Optimierung, Materialwissenschaften, Ausbreitung elektromagnetischer Wellen, . . .
- Physik: Astrophysik, Quantenmechanik
- Chemie: Medikamententwicklung, Strukturanalyse von Proteinen
- Medizin: Computertomographie, d.h. inverse Probleme
- Geologie: seismische Analyse/inverse Probleme
- Ökologie: Schadstofftransport, Klima- und Wettervorhersagen

Gegenstand der Numerik ist die Entwicklung und Analyse von Algorithmen, mit denen mathematische Berechnungen und Verfahren auf Computern umgesetzt werden.

Einordnung der Numerik im Gesamtbild

Gegenstand der Numerik ist die Entwicklung und Analyse von Algorithmen, mit denen mathematische Berechnungen und Verfahren auf Computern umgesetzt werden.

Gesamtbild:

Realität → math. Modell → numer. Simulation → Bewertung

einige Kernfragen der Numerik:

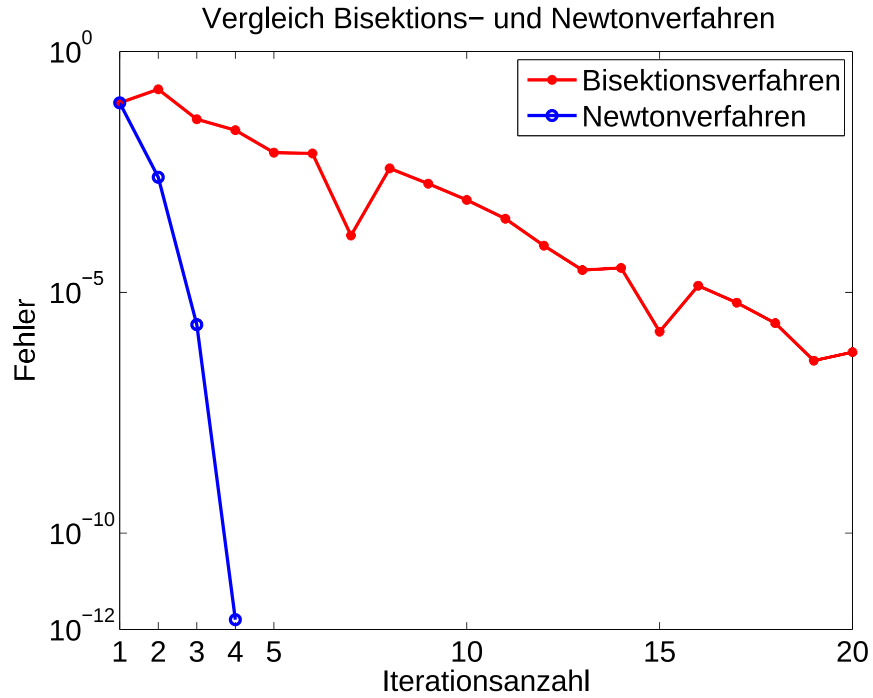
- Konvergenz von Algorithmen; *a priori* Fehlerabschätzungen
- Effizienz von Algorithmen
- Zuverlässigkeit von Algorithmen; *a posteriori* Fehlerschätzung

Konvergenz und Effizienz am Beispiel der Nullstellensuche

Beispiel: Bisektionsverfahren und das Newtonverfahren zum Lösen von $x^2 - 2 = 0$

$$x_{i+1} := \frac{1}{2}\left(x_i + \frac{2}{x_i}\right), \qquad i = 0, 1, \ldots,$$

	Newtonverfahren ($x_0 = 2$)	Bisektionsverfahren ($I_0 = [1, 2]$)
x_1	1.5	1.5
x_2	**1.41**6666666666667	**1**.250000000000000
x_3	**1.41421**5686274510	**1**.375000000000000
x_4	**1.41421356237**4690	**1.4**37500000000000
$\vdots$		$\vdots$
x_{10}		**1.41**5039062500000
$\vdots$		$\vdots$
x_{15}		**1.41421**5087890625
$\vdots$		$\vdots$
x_{37}		**1.41421356237**697
	quadr. Konvergenz	lineare Konvergenz



Kosten pro Schritt:

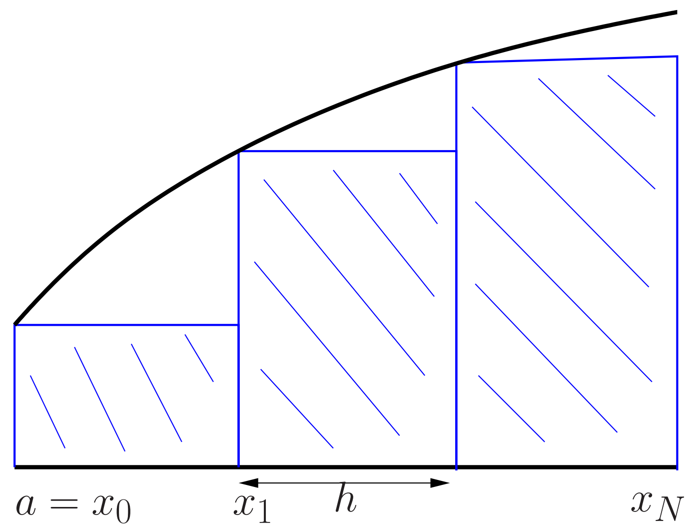
Bisektionsverfahren	1 Addition, 1 Division durch 2, 1 Multiplikation, 1 Vergleich
Newtonverfahren	1 Addition, 1 Division durch 2, 1 Division

Konvergenz, Effizienz, Fehlerschätzung bei Quadratur

Ziel: approximiere $\int_a^b f(x)\,dx$, wobei $f \in C^2([a,b])$.
Zerlege $[a,b]$ in N Teilinteralle $[x_i, x_{i+1}]$ der Länge h mit

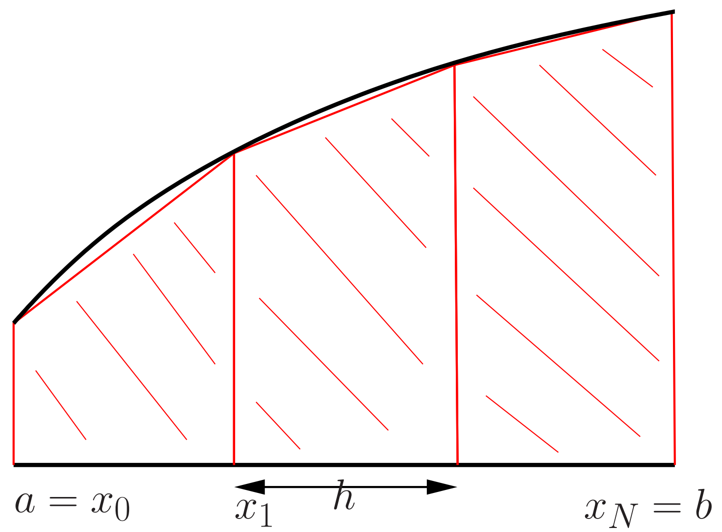
$$x_i = a + ih, \qquad i = 0, \ldots, N, \qquad h = \frac{b-a}{N}$$

Rechtecksregel



$$R(h) := \sum_{i=0}^{N-1} h f(x_i)$$

Trapezregel



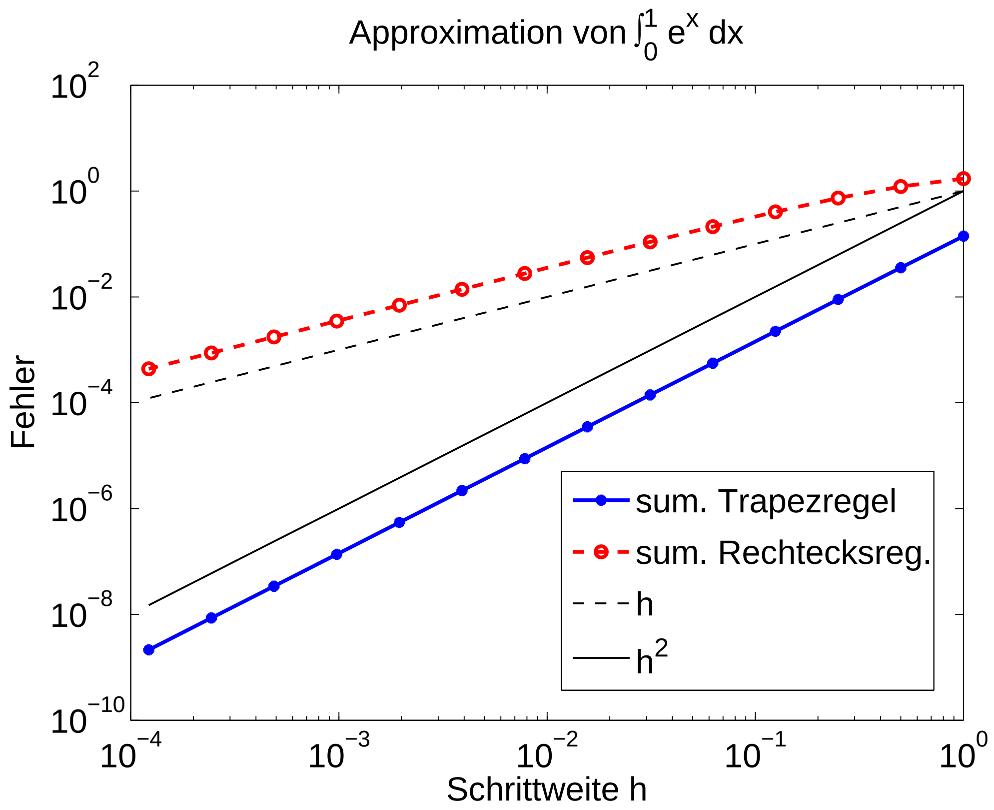
$$T(h) := \sum_{i=0}^{N-1} \frac{h}{2} [f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

Konvergenz der Trapezregel und Rechtecksregel

a priori Abschätzungen:

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - R(h) \right| \leq \frac{b-a}{2} h \|f'\|_{C([a,b])}$$

$$\left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| \leq \frac{b-a}{6} h^2 \|f''\|_{C([a,b])}$$



Effizienz der Trapezregel (im Unterschied zur Rechtecksregel)

Anzahl benötigter Funktionsauswertungen F ist:

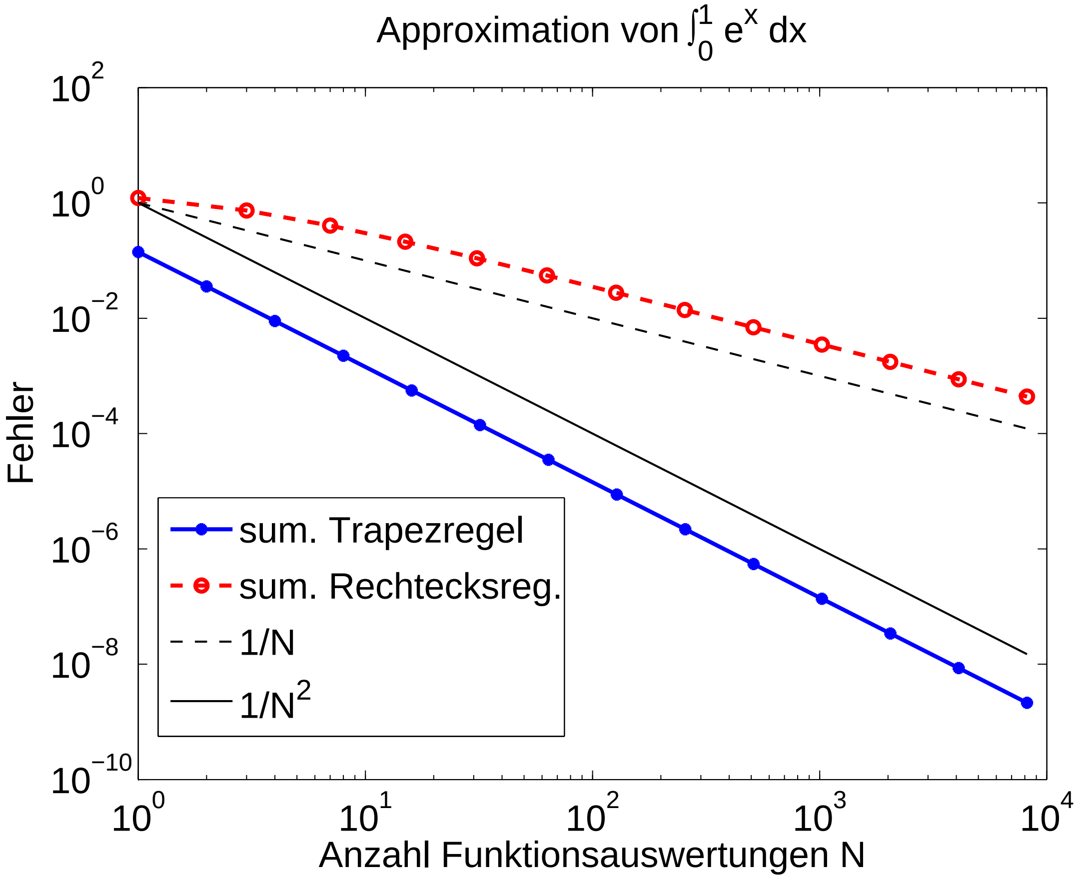
$$\begin{aligned} F &= N-1 \text{ für das Rechtecksregel} \\ F &= N \text{ für das Trapezregel} \end{aligned}$$

In beiden Fällen also $F \approx N$. Aus $h = \frac{b-a}{N}$ folgt damit:

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b f(x)\,dx - R(h) \right| &\leq C_{Rechteck} F^{-1} \|f'\|_{C([a,b])} \\ \left| \int_a^b f(x)\,dx - T(h) \right| &\leq C_{Trapez} F^{-2} \|f''\|_{C([a,b])} \end{aligned}$$

Effizienz der Trapezregel (im Unterschied zur Rechtecksregel)

Zusammenfassung: die Trapezregel ist effizienter als die Rechtecksregel in dem Sinn, daß (zumindest asymptotisch) weniger Funktionsauswertungen benötigt werden, um eine gegebene Genauigkeit zu erreichen.



Fehlerschätzung bei Rechtecksregel mittels Extrapolation

Es gilt: $\int_a^b f(x)\,dx - R(h) \approx Ch$ für alle hinreichend kleine h und C geeignet.

Idee: Schätze C. Mache hierzu Annahme $\int_a^b f(x)\,dx - R(h) = Ch$. D.g.:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,dx - R(h) &= Ch\\ \int_a^b f(x)\,dx - R(h/2) &= Ch/2\end{aligned}$$

Also durch Subtraktion: $R(h/2) - R(h) = Ch/2$. Mithin erhalten wir

$$\underbrace{\int_a^b f(x)\,dx - R(h)}_{\text{nicht berechenbar}} \approx Ch = \underbrace{2\,[R(h/2) - R(h)]}_{\text{berechenbar!}}$$

Fehlerschätzung bei Rechtecksregel mittels Extrapolation

Wir haben erhalten:

$$\underbrace{\int_a^b f(x)\,dx - R(h)}_{\text{wahrer Fehler: nicht berechenbar}} \approx Ch = \underbrace{2\,[R(h/2) - R(h)]}_{\text{Fehlerschätzer: berechenbar!}}$$

Numerisches Beispiel:

h	2^0	2^{-1}	2^{-2}	2^{-3}	2^{-4}	2^{-5}	2^{-6}	2^{-7}	2^{-8}	2^{-9}
$2\frac{R(h/2)-R(h)}{\int_0^1 e^x\,dx - R(h)}$	0.6	0.8	0.89	0.95	0.97	0.99	0.99	0.997	0.998	0.999

Zuverlässigkeit, Fehlerschätzung

Sleipner Bohrinsel 1991

Schaden: \$ 700 Mio.

Ursache: Unterschätzung der Belastung eines Bauteils bei numerischer Simulation

Simulation: kommerzieller FE-code NASTRAN <u>ohne</u> Fehlerschätzer und adaptive Steuerung der Simulation für Zuverlässigkeit der Ergebnisse