

# 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 getestet 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:



einige Kernfragen der Numerik:

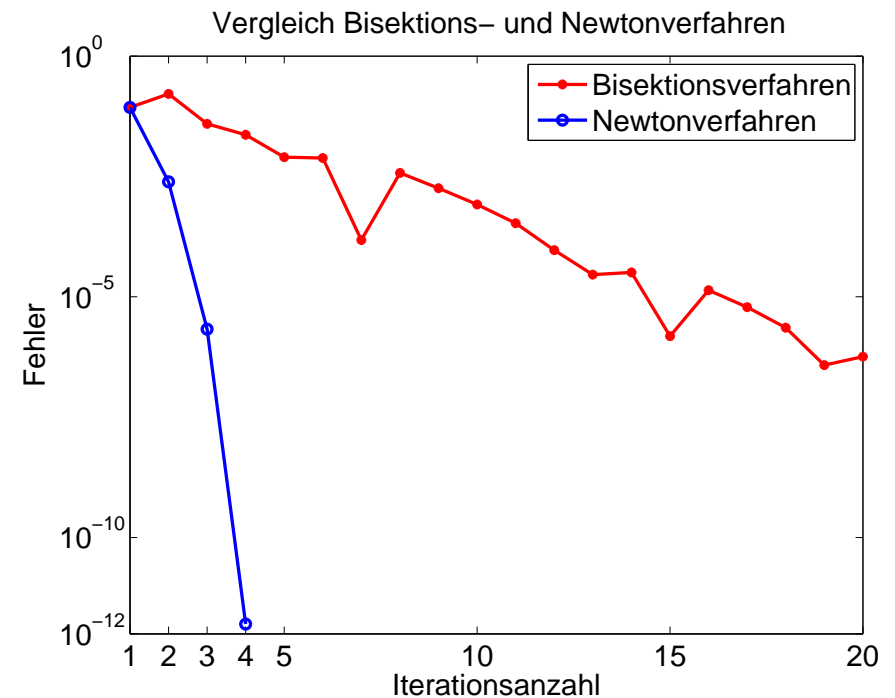
- **Konvergenz** von Algorithmen; *a priori* Fehlerabschätzungen
- Effizienz von Algorithmen
- Zuverlässigkeit von Algorithmen; *a posteriori* Fehlerschätzung

# Konvergenz und Effizienz am Beispiel der Nullstellensuche

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

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

	Newtonverfahren ( $x_0 = 2$ )	Bisektionsverfahren ( $I_0 = [1, 2]$ )
$x_1$	1.5	1.5
$x_2$	<b>1.4166666666666667</b>	1.2500000000000000
$x_3$	<b>1.414215686274510</b>	1.3750000000000000
$x_4$	<b>1.414213562374690</b>	1.4375000000000000
⋮		⋮
$x_{10}$		<b>1.4150390625000000</b>
⋮		⋮
$x_{15}$		<b>1.414215087890625</b>
⋮		⋮
$x_{37}$		<b>1.41421356237697</b>
	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

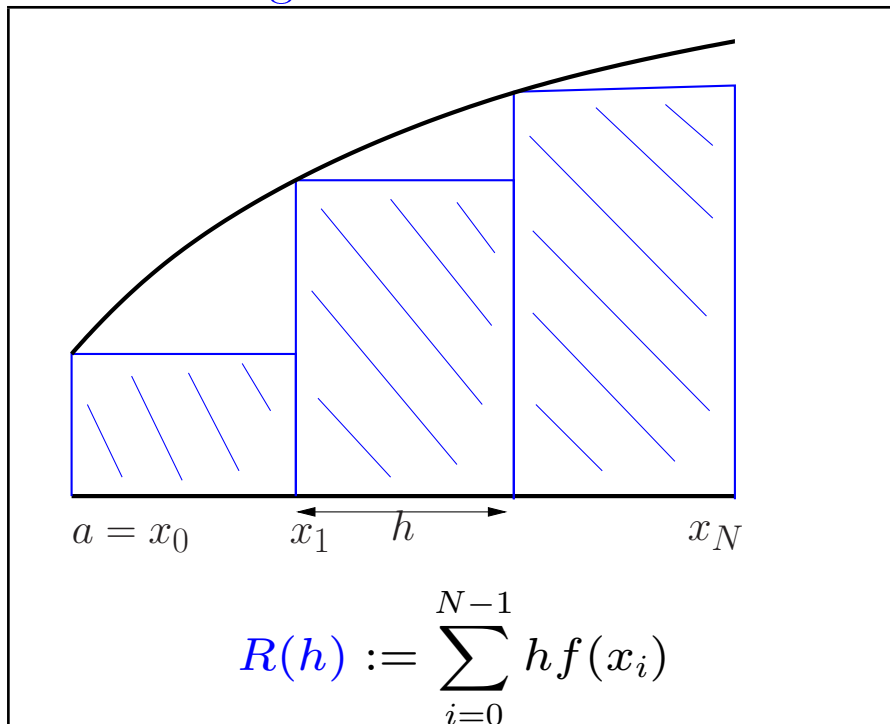
# Konvergenz, Effizienz, Fehlerschätzung bei Quadratur

Ziel: approximiere  $\int_a^b f(x) dx$ , wobei  $f \in C^2([a, b])$ .

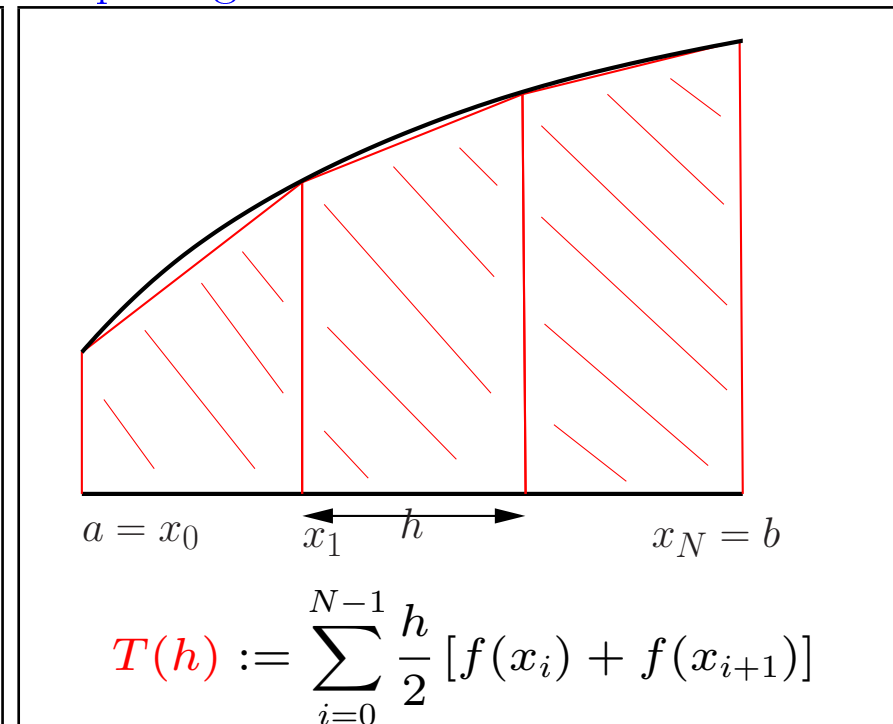
Zerlege  $[a, b]$  in  $N$  Teilintervalle  $[x_i, x_{i+1}]$  der Länge  $h$  mit

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

Rechtecksregel



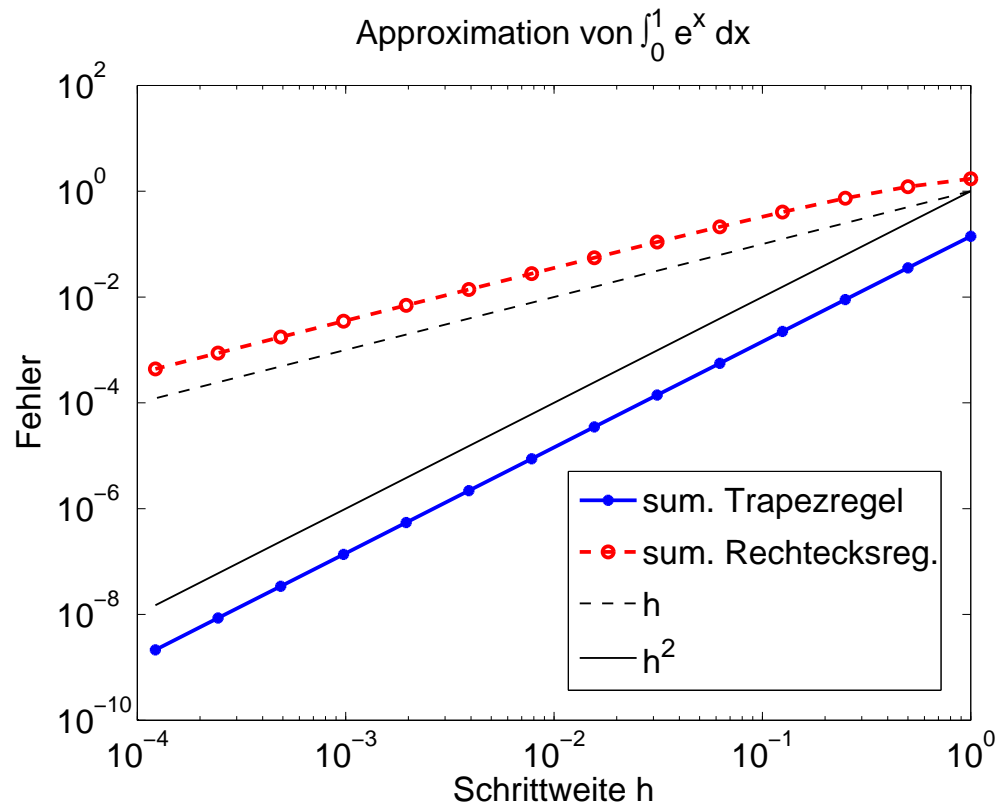
Trapezregel



# 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:

$$F = N - 1 \text{ für das Rechtecksregel}$$

$$F = N \text{ für das Trapezregel}$$

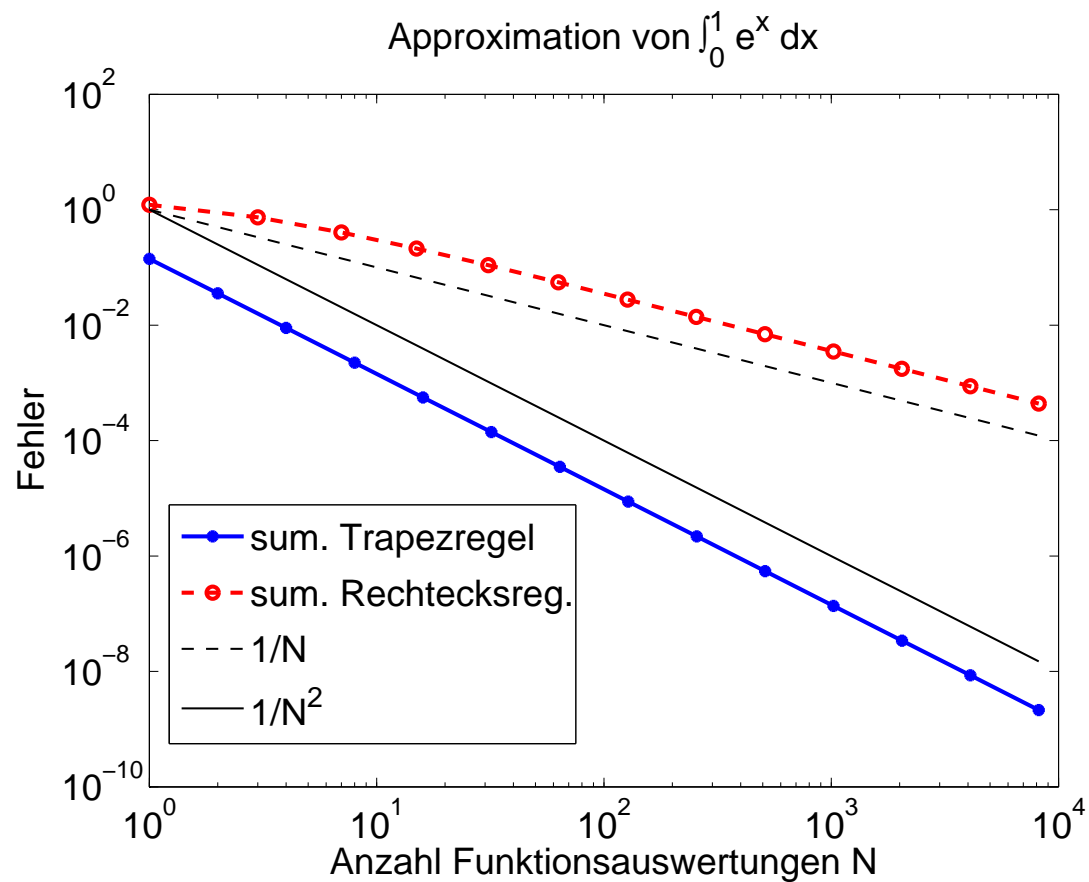
In beiden Fällen also  $F \approx N$ . Aus  $h = \frac{b-a}{N}$  folgt damit:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - R(h) \right| \leq C_{Rechteck} F^{-1} \|f'\|_{C([a,b])}$$

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

## 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 Bohrinself 1991

**Schaden:** \$ 700 Mio.

**Ursache:** Unterschätzung der Belastung eines Bauteils bei numerischer Simulation

**Simulation:** kommerzieller FE-code NASTRAN ohne Fehlerschätzer und adaptive Steuerung der Simulation für Zuverlässigkeit der Ergebnisse

