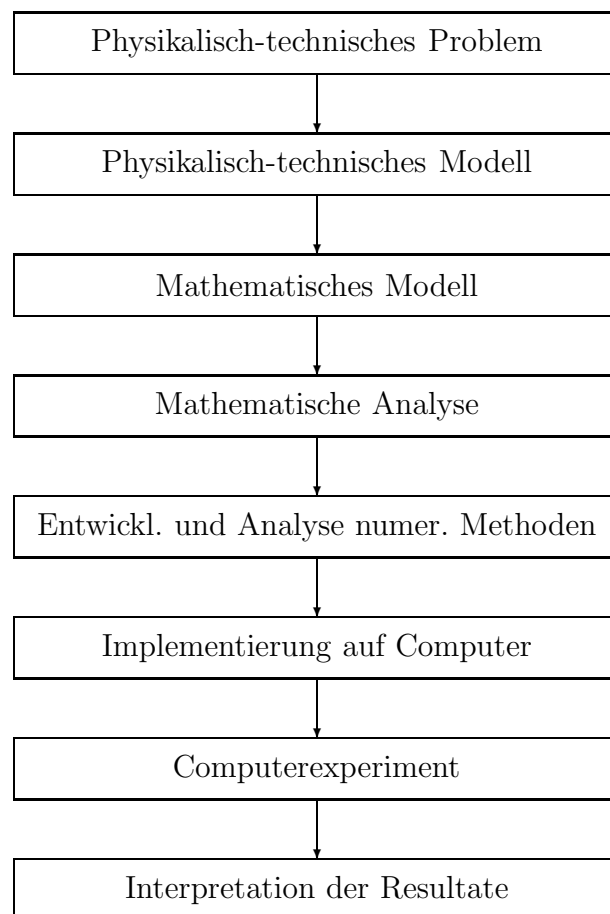


Kapitel 1

Einleitung

1.1 Der Problemlösungsprozess

Der Prozess des Lösen eines Anwendungsproblems mit numerischen Methoden lässt sich grob in folgende Stufen einteilen:



Das physikalisch-technische Modell berücksichtigt z.B. die relevanten Bilanzgleichungen, Materialgesetze, Minimalprinzipien, u.ä.

Dabei ist zu beachten, dass beim Übergang von einer realen Problemstellung auf ein Modell, also beim Modellieren, zwangsweise eine Reihe von Vereinfachungen zu treffen sind. Hier passiert bereits ein erster Fehler (**Modellfehler**) durch die gerechtfertigten oder ungerechtfertigten Modellannahmen.

Der Übergang vom physikalisch-technischen Modell zum mathematischen Modell ist fließend. Die getroffene Unterscheidung soll nur den unterschiedlichen Grad der Mathematisierung des Modells zum Ausdruck bringen. Am Ende steht im Idealfall ein wohldefiniertes mathematisches Problem, wie z.B. ein Anfangsrandwertproblem für eine partielle Differentialgleichung mit vorgegebenen Eigenschaften.

Der zentrale Begriff der mathematischen Analyse ist das korrekt gestellte Problem, d.h., eine Lösung des Problems existiert, sie ist eindeutig und sie hängt stetig von den Daten ab. Die in vielen Fällen als selbstverständlich geltende Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung des realen Problems bedeutet keineswegs, dass auch ein Modell diese Eigenschaften besitzen muss. Gelingt der Nachweis der Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung, so ist eine Mindestanforderung an ein „sinnvolles“ Modell erfüllt. Die stetige Abhängigkeit von den Daten sichert die Richtigkeit einer Lösung auch bei kleinen Störungen in den Daten. Solche **Datenfehler** können z.B. durch Messfehler oder durch Fehler aufgrund einer vorangegangenen Rechnung entstanden sein.

Eine numerische Methode muss natürlich vor allem konstruktiv sein und in vernünftiger Zeit zu einem Ergebnis führen. Das hat häufig zur Folge, dass man sich mit einer Näherung der Lösung begnügen muss. Der in Kauf genommene Fehler wird **Verfahrensfehler** genannt.

Die Realisierung einer numerischen Methode auf dem Computer führt zu einer weiteren Verfälschung der Ergebnisse. Zahlen lassen sich nicht exakt darstellen und die Operationen können nicht exakt durchgeführt werden. Fehler dieser Art werden als **Rundungsfehler** bezeichnet.

Steht schließlich ein Berechnungsprogramm zur Verfügung, so ist es ein (weiteres) Werkzeug, das zur Analyse oder Verbesserung von Produkten oder Prozessen eingesetzt werden kann. Durch Variation der Daten lassen sich Experimente am Computer durchführen, die gewonnenen Erkenntnisse ergänzen (gelegentlich ersetzen sogar) Kenntnisse aus realen Experimenten.

Schließlich erhält man konkrete Zahlen als Resultat eines Programms, deren Aussagekraft in Beziehung zu den gemachten Fehlern bewertet werden muss. Dies kann zu Modellmodifikationen, anderen numerischen Methoden oder deren besserer Implementierung auf einem Computer führen.

1.2 Ein Beispiel

Problemstellung:

Es soll die zeitliche Entwicklung der Abkühlung eines Metallstabes bei gegebenem Anfangszustand vorhergesagt werden.

Modellierung:

Für die Modellierung wird angenommen, dass der Stab ein homogenes eindimensionales Kontinuum der Länge L ist, und dass der Wärmestrom nur in axialer Richtung zu berücksichtigen ist. Der Stab habe konstante Materialeigenschaften und keine inneren Wärmequellen. Es wird angenommen, dass Wärmetransport nur durch Wärmeleitung erfolgt.

Der Stab sei durch ein Intervall $[a, b]$ mit $L = b - a$ auf der x -Achse dargestellt. $|S|$ sei die konstante Querschnittsfläche. Der Stab besitze eine bekannte Temperaturverteilung $T_A(x)$ im Anfangszeitpunkt t_A . Die Temperaturverteilung $T(x, t)$ bis zu einem Endzeitpunkt t_E ist gesucht.

In einem beliebigen Abschnitt $[x_1, x_2]$ mit $\Delta x = x_2 - x_1$ wird die Wärmemenge für ein beliebiges Zeitintervall $[t_1, t_2]$ mit $\Delta t = t_2 - t_1$ bilanziert:

Der Unterschied der Wärmemenge zu den Zeitpunkten t_1 und t_2 , gegeben durch

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho c T(x, t_2) |S| dx - \int_{x_1}^{x_2} \rho c T(x, t_1) |S| dx$$

mit der Dichte ρ und der spezifischen Wärmekapazität c , muss gleich der Wärmemenge sein, die durch die Querschnitte bei x_1 und x_2 im Zeitintervall $[t_1, t_2]$ einfließt.

Die Gültigkeit des Fourierschen Gesetzes wird vorausgesetzt:

$$\dot{q}_n = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n},$$

\dot{q}_n bezeichnet die Wärmestromdichte im betrachteten Querschnitt mit Richtung n , λ ist die Wärmeleitfähigkeit, $\partial T / \partial n$ ist die Richtungsableitung der Temperatur in Richtung n .

Daraus ergibt sich für die einfließende Wärmemenge durch den Querschnitt bei x_2 :

$$\int_{t_1}^{t_2} \lambda \frac{\partial T}{\partial x}(x_2, t) |S| dt$$

bzw. durch den Querschnitt bei x_1 :

$$- \int_{t_1}^{t_2} \lambda \frac{\partial T}{\partial x}(x_1, t) |S| dt.$$

Es wird vorausgesetzt, dass keine Wärmemenge durch den Mantel fließt und dass keine zusätzlichen Wärmequellen im Stab vorhanden sind.

Somit erhält man das folgende erste Modell:

Gesucht ist die Temperaturverteilung $T(x, t)$, sodass

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho c (T(x, t_2) - T(x, t_1)) |S| dx = \int_{t_1}^{t_2} \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x}(x_2, t) - \frac{\partial T}{\partial x}(x_1, t) \right) |S| dt \quad (1.1)$$

für alle $x_1, x_2 \in (a, b)$, $t_1, t_2 \in (t_A, t_E)$. Zusätzlich werden folgende Randbedingungen

$$\begin{aligned} T(a, t) &= T_a(t) \quad \text{für alle } t \in (t_A, t_E) \\ T(b, t) &= T_b(t) \quad \text{für alle } t \in (t_A, t_E) \end{aligned}$$

mit gegebenen (Umgebungs-)Temperaturen $T_a(t)$ und $T_b(t)$ und die Anfangsbedingung

$$T(x, t_A) = T_A(x), \quad \text{für alle } x \in [a, b]$$

mit gegebener Anfangstemperatur $T_A(x)$ vorausgesetzt.

Damit diese Gleichungen Sinn machen, muss offensichtlich $T(x, t)$ bezüglich x und t stetig auf $\bar{Q} = [a, b] \times [t_A, t_E]$ sein, kurz $T \in C^{0,0}(\bar{Q})$, und zusätzlich bezüglich x auf $Q = (a, b) \times (t_A, t_E)$ stetig differenzierbar sein, kurz $T \in C^{1,0}(Q)$, insgesamt also $T \in C^{0,0}(\bar{Q}) \cap C^{1,0}(Q)$. Man spricht von einem Modell in integraler Form.

Wählt man für beliebige Werte $x \in (a, b)$ und $t \in (t_A, t_E)$ und hinreichend kleine Werte $\Delta x > 0$ und $\Delta t > 0$ speziell

$$x_1 = x - \frac{\Delta x}{2}, \quad x_2 = x + \frac{\Delta x}{2}, \quad t_1 = t - \frac{\Delta t}{2}, \quad t_2 = t + \frac{\Delta t}{2},$$

so erhält man aus (1.1) nach Division mit $\Delta x \Delta t$ und dem Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ das folgende zweite Modell:

Gesucht ist die Temperaturverteilung $T(x, t)$, sodass

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t}(x, t) = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x, t) \quad \text{für alle } (x, t) \in Q.$$

Zusätzlich werden wie vorhin folgende Randbedingungen

$$\begin{aligned} T(a, t) &= T_a(t), \quad \text{für alle } t \in (t_A, t_E) \\ T(b, t) &= T_b(t), \quad \text{für alle } t \in (t_A, t_E) \end{aligned}$$

mit gegebenen (Umgebungs-)Temperaturen $T_a(t)$ und $T_b(t)$ und die Anfangsbedingung

$$T(x, t_A) = T_A(x), \quad \text{für alle } x \in [a, b]$$

mit gegebener Anfangstemperatur $T_A(x)$ vorausgesetzt.

Damit diese Gleichungen Sinn machen, muss offensichtlich $T(x, t)$ bezüglich x und t stetig auf $\bar{Q} = [a, b] \times [t_A, t_E]$, bezüglich x auf $Q = (a, b) \times (t_A, t_E)$ zweimal stetig differenzierbar und bezüglich t auf $Q = (a, b) \times (t_A, t_E)$ einmal stetig differenzierbar sein, kurz $T \in C^{0,0}(\bar{Q}) \cap C^{2,1}(Q)$. Man spricht bei diesem Modell in differentieller Form von einem Anfangsrandwertproblem für eine partielle Differentialgleichung.

Mathematische Analyse:

In Räumen geeignet oft differenzierbarer Funktionen lässt sich die Korrektgestelltheit des Problems bei hinreichend glatten Daten nachweisen.

Im Weiteren gelten ohne Beschränkung der Allgemeinheit folgende Setzungen: $a = 0$, $b = L$, $t_A = 0$. Zusätzlich wird ab nun mit a die Temperaturleitzahl bezeichnet: $a = \lambda/(\rho c)$.

Numerische Methode:

In einem ersten Schritt wird das im Ort kontinuierliche (unendlichdimensionale) Problem durch ein im Ort diskretes (endlichdimensionales) Problem approximiert. Man spricht von Semidiskretisierung bezüglich der Ortsvariablen:

Das kontinuierliche Intervall $[0, L]$ wird durch eine endliche Punktmenge (Gitterpunkte), z.B. $x_i = ih$, $i = 0, 1, \dots, N, N + 1$ mit $h = L/(N + 1)$ ersetzt.

Die 2. Ortsableitung in einem Gitterpunkt x_i wird durch Differenzenquotienten approximiert:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_i, t) &\approx \frac{1}{h} \left[\frac{\partial T}{\partial x}(x_i + \frac{1}{2}h, t) - \frac{\partial T}{\partial x}(x_i - \frac{1}{2}h, t) \right] \\ &\approx \frac{1}{h} \left[\frac{T(x_{i+1}, t) - T(x_i, t)}{h} - \frac{T(x_i, t) - T(x_{i-1}, t)}{h} \right] \\ &= \frac{1}{h^2} [T(x_{i-1}, t) - 2T(x_i, t) + T(x_{i+1}, t)]. \end{aligned}$$

Ersetzt man in der ursprünglichen Differentialgleichung die 2. Ortsableitung durch die obige Differenzenapproximation, so entsteht folgendes System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Näherungen $T_i(t)$ von $T(x_i, t)$:

$$\frac{dT_i}{dt}(t) = \frac{a}{h^2} [T_{i-1}(t) - 2T_i(t) + T_{i+1}(t)] \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, N$$

mit den Randbedingungen (Dirichlet-Randbedingungen)

$$T_0(t) = T_a(t), \quad T_{N+1}(t) = T_b(t)$$

und der Anfangsbedingung

$$T_i(0) = T_A(x_i) \quad \text{für } i = 0, 1, \dots, N + 1.$$

Bemerkung: Die hier vorgestellte Methode der Diskretisierung bezüglich der Ortsvariablen ist eine so genannte Finite Differenzen Methode (FDM). Sie ist nur eine von vielen Möglichkeiten, eine endliche Zahl von Ortsfreiheitsgraden zu erhalten. Andere Techniken sind u.a. Finite Elemente Methoden (FEM), Randelementemethoden (BEM) und Finite Volumen Methoden (FVM).

Im nächsten Schritt wird die Zeit diskretisiert:

Das interessierende Zeitintervall $[0, t_E]$ wird durch eine endliche Zahl von Zeitpunkten $t_j = j \tau$, $j = 0, 1, \dots, m$ mit $\tau = t_E/m$ ersetzt.

Für die Approximation der Zeitableitung wird der so genannte Vorwärtsdifferenzenquotient verwendet:

$$\frac{dT_i}{dt}(t_j) \approx \frac{T_i(t_{j+1}) - T_i(t_j)}{\tau}.$$

Ersetzt man im obigen System gewöhnlicher Differentialgleichungen die 1. Zeitableitung durch diesen Differenzenquotienten, so erhält man für die Näherungen T_i^j von $T(x_i, t_j)$:

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau} = \frac{a}{h^2} (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j) \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 0, 1, \dots, m.$$

Also:

$$T_i^{j+1} = T_i^j + r (T_{i-1}^j - 2T_i^j + T_{i+1}^j) \quad \text{für } i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 0, 1, \dots, m.$$

mit $r = a\tau/h^2$.

Zusammen mit den Randbedingungen

$$T_0^j = T_a(t_j) \quad T_{N+1}^j = T_b(t_j) \quad \text{für } j = 1, 2, \dots, m$$

und der Anfangsbedingung

$$T_i^0 = T_A(x_i) \quad \text{für } i = 0, 1, \dots, N + 1$$

kann die obige Differenzengleichung dazu benutzt werden, um Näherungen T_i^j für die Temperatur im Punkt x_i zur Zeit t_j schichtweise in der Zeit zu berechnen.

Die vorgestellte numerische Methode lässt sich leicht implementieren.

Computorexperiment:

Für einen Kupferstab ($\rho = 8930 \text{ kg m}^{-3}$, $c = 394 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $\lambda_K = 385 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, mantelisoliert, wärmequellenfrei) der Länge $L = 1 \text{ m}$, der an beiden Randpunkten die fixierten Temperaturwerte $T_a = 20^\circ$, $T_b = 40^\circ$ und zum Zeitpunkt $t_A = 0$ die Temperaturverteilung

$$T_A(x) = T_a + (T_b - T_a) \left[\frac{x}{L} + \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right]$$

besitzt, soll die Temperatur nach zwei Stunden ($t_E = 7220 \text{ s}$) ermittelt werden.

Abbildung 1.1 zeigt neben der Anfangstemperaturverteilung das Ergebnis der numerischen Methode zum Zeitpunkt $t = 5220 \text{ s}$ für $h = 10 \text{ cm}$ und $\tau = 1 \text{ min}$. Der Versuch, das Ergebnis durch kleinere Schrittweiten $h = 1 \text{ cm}$ und $\tau = 1 \text{ s}$ scheitert bereits nach 30 Sekunden, wie Abbildung 1.2 belegt. Hingegen erhält man mit der geringfügigen Modifikation $h = 10 \text{ cm}$ und $\tau = 50 \text{ s}$ ein sinnvolles Resultat, nämlich den erwarteten (annähernd) linearen Temperaturverlauf zwischen den beiden vorgegebenen Randtemperaturen, siehe

Abbildung 1.3. Hätte man das Ergebnis nach der scheinbar besseren (weil kleineren) Wahl $h = 1$ cm und $\tau = 1$ s beurteilt, wäre man zu einer völlig falschen Interpretation der Resultate gekommen. Offensichtlich dominiert bei dieser Parameterwahl der numerische Verfahrensfehler, sodass keine sinnvollen Rückschlüsse auf das physikalisch richtige Ergebnis gezogen werden können. Die Vorlesung soll unter anderem dazubeitragen, solche möglichen Falschinterpretationen zu vermeiden. Dazu ist es notwendig, die numerischen Methoden besser zu verstehen.

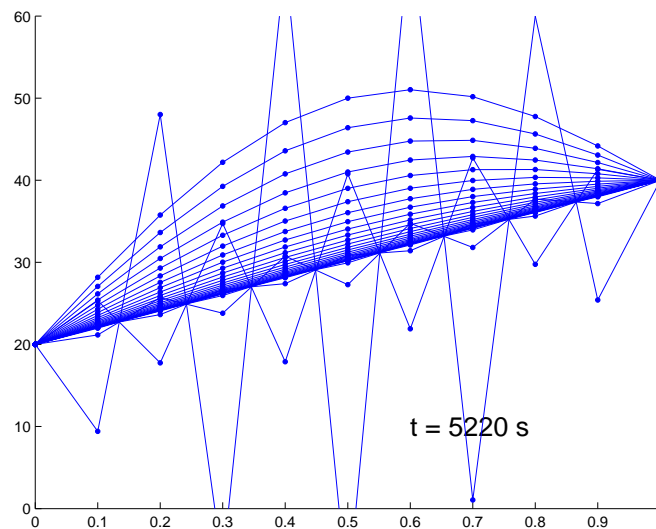


Abbildung 1.1: $h = 10$ cm, $\tau = 60$ s

1.3 Problemstellungen

Einige wichtige Modellgleichungen aus den verschiedensten Bereichen sind die Wärmeleitgleichung, die Naviersche Gleichungen (in der Festigkeitslehre), die Navier-Stokes-Gleichungen (in der Strömungsmechanik), die Maxwell-Gleichungen (Elektromagnetismus), Dynamische Systeme (Automatisierungstechnik), u.s.w.

Solche und andere Problemstellungen können grob unterschieden werden in:

- Ortskontinuierliche und ortsdiskrete Probleme.
- Stationäre und instationäre Probleme.

Die wichtigste Unterscheidung bezüglich der Komplexität von Problemen ist die Einteilung in

- lineare und nichtlineare Probleme.

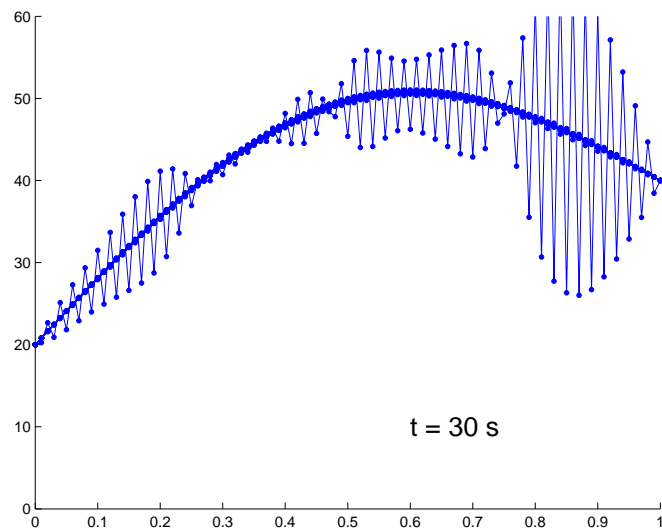


Abbildung 1.2: $h = 1 \text{ cm}$, $\tau = 1 \text{ s}$

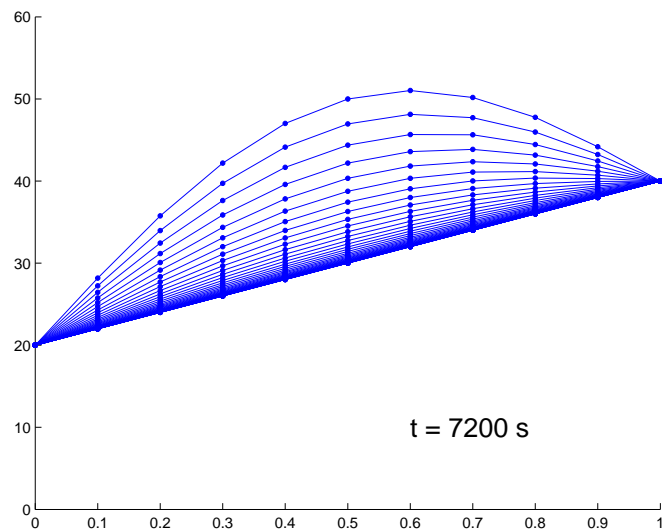


Abbildung 1.3: $h = 10 \text{ cm}$, $\tau = 50 \text{ s}$

Nach einem einführenden Kapitel über Besonderheiten des Numerischen Rechnens werden folgende typische Problemstellungen näher untersucht:

- Lineare Gleichungssysteme (Sie treten bei linearen stationären Problemen auf, sie

sind aber auch ein wichtiger Baustein bei den anderen Problemstellungen.)

- Nichtlineare Gleichungen (zur Beschreibung nichtlinearer stationärer Probleme)
- Gewöhnliche Differentialgleichungen (zur Beschreibung instationärer Probleme)