# Einführung in die Numerische Mathematik

Jochen Garcke

universitätbonn

Fraunhofer SCAI

# Einführung in die Numerische Mathematik

- Inhalte
  - Nichtlineare Optimierung
  - Numerik von gewöhnlichen Differentialgleichungen
  - (Splines)
- Vorkenntnisse (laut Modulbeschreibung)
  - Algorithmische Mathematik I + II
- benötigt **nicht** die Einführung in die Grundlagen der Numerik
- zur Prüfungszulassung wie gehabt Theorie- und Praxisaufgaben
- es soll ein Skript zur Vorlesung geben
- eine SHK-Stelle zur Skripterstellung ist zu besetzen
-
- zur Vorlesung gibt es ein **Seminar**, Anmeldung per EMail
  Vorbesprechung ist vorgesehen für Anfang des nächsten Semesters

# Nichtlineare Optimierung

Man unterscheidet zwei unterschiedliche Situationen

- Finde für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ einen Punkt $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n$$

- Finde für $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ einen Punkt $x^* \in \Omega$, so dass

$$f(x^*) \leq f(x) \text{ für alle } x \in \Omega$$

  mit

$$\Omega := \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) = 0, i \in \mathcal{I}_{\mathcal{G}}, \text{ und } g_i(x) \geq 0, i \in \mathcal{I}_{\mathcal{U}}\}$$

  wobei

$$g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$$

Für beide Fälle betrachten wir Verfahren und deren Eigenschaften (unter geeigneten Bedingungen)

# Nichtlineare Optimierung - Beispielfunktionen

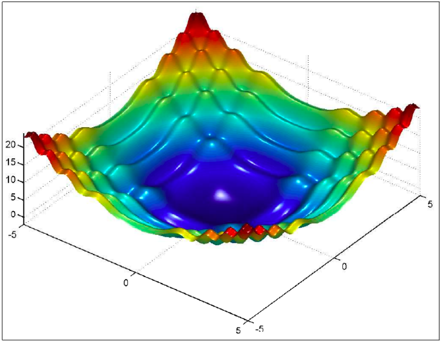



**Abbildung 1.2:** Funktion mit vielen lokalen Minima

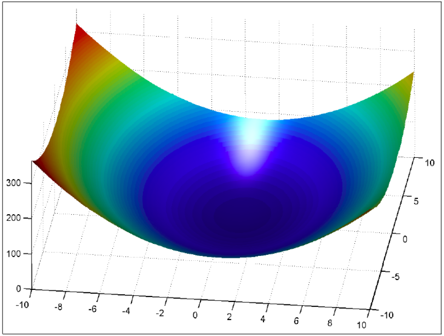
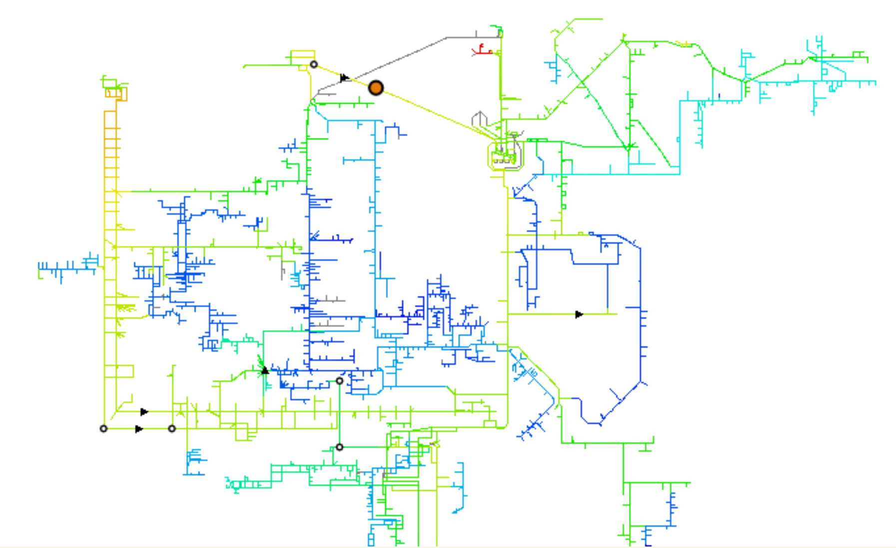



**Abbildung 1.5:** Quadratische Funktion aus Beispiel 1.2.6

# Beispielanwendungen der Nichtlinearen Optimierung

- Index-Tracking, d.h. nachbilden eines großen Aktienindex mit möglichst wenigen Aktien
- Verdichtung von Versichungsbeständen, d.h. mit wenigen Versicherungen die relevanten Kennzahlen eines großen Versichungsbestands gut zu beschreiben
- Planung von z.B. Materialeinsatz in der Produktionsplanung oder Produktplanung

# Beispielanwendungen der Nichtlinearen Optimierung - Gasnetze



# Gewöhnliche Differentialgleichungen

Wir betrachten Probleme der Art

$$\dot{x}(t) = f(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0$$

mit $f : [t_0, T] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

- gibt Aussagen über die Existenz und Eindeutigkeit einer Lösung $x(t)$
- es gibt in manchen Fällen analytische Lösungen (siehe Analysis)
- betrachten numerische Verfahren zur Berechnung einer Lösung $x(t)$
- Anwendungen z.B.
  - Ausbreitung von Infektionskrankheiten
  - chemische Reaktionskinetik
  - Lorentz-Oszillator (System von 3 Dgl. / Lorentz-Attraktor)
  - instationäre Wärmeleitung

# Numerik von gewöhnlichen Differentialgleichungen

- Grundprinzip: in Schritten durch die Zeit gehen
- dazu diskretisieren wir die Zeit

$$h := \frac{T - t_0}{N} > 0, \quad \text{und } t_k := t_0 + k \cdot h$$

- z.B. bei Einschrittverfahren rechnen wir dann die Rekursion

$$x_{k+1} = x_k + h\Phi(t_k, t_{k+1}, x_k, x_{k+1}, h), \quad , k = 0, \dots, N-1$$

- je nach $\Phi$
  - wird anders gerechnet
  - funktioniert das Verfahren unterschiedlich gut (oder auch gar nicht)
  - sind die Ergebnisse unterschiedlich genau (z.B. welche Rolle spielt $h$ ?)

# Euler-Verfahren

- explizites Euler-Verfahren

$$x_{k+1} = x_k + hf(t_k, x_k)$$

- implizites Euler-Verfahren

$$x_{k+1} = x_k + hf(t_{k+1}, x_{k+1})$$

# Chemical Master Equation

- change in state of system (number of molecules of each species) through $k$ reaction channels , e.g. bimolecular reaction

$$S_i + S_j \to S_k$$

- case of LOW copy numbers:
  - inherent randomness of chemical reaction systems
  - $\to$ probability that a reaction takes place
- chemical master equation (CME) arises as time-evolution equation
- $p(\underline{x}, t)$ probability $\underline{x}$ molecules of each species are present at time $t$
- chemical master equation for time evolution

$$\boxed{\frac{dp}{dt} = \sum_{j=1}^{k} (S_{\underline{z}_j} - I)\, \lambda_j \circledast p,}$$

  - $\lambda_j(\underline{x})dt$ probability reaction $j$ occurs in infinitesimal time interval $dt$
  - $\underline{z}_j$ transition from $\underline{x}$ to $\underline{x} + \underline{z}_j$ due to reaction $j$ (stoichiometric vector)
  - $S_{\underline{z}}u(\underline{x}) = u(\underline{x} + \underline{z})$ denotes shift along $z$
  - $p \circledast q$ is Hadamard or point-wise product