

Inhaltsverzeichnis

Vorwort *XIII*

1	Prinzipien der mathematischen Modellierung	1
1.1	Eine komplexe Welt braucht Modelle	2
1.2	Systeme, Modelle, Simulationen	4
1.2.1	Der teleologische Aspekt	5
1.2.2	Das MoSim-Schema	5
1.2.3	Simulation	8
1.2.4	System	8
1.2.5	Konzeptionelle und physikalische Modelle	9
1.3	Mathematik als natürliche Modellsprache	10
1.3.1	Input-Output-Systeme	10
1.3.2	Allgemeine Form experimenteller Daten	11
1.3.3	Bedeutung numerischer Daten	12
1.4	Definition mathematischer Modelle	13
1.5	Beispiele und weitere Definitionen	15
1.5.1	Zustandsvariablen und Systemparameter	17
1.5.2	Verwendung von Computeralgebrasystemen	20
1.5.3	Strategien für das Aufstellen einfacher Modelle	21
1.5.4	Lineare Programmierung	33
1.6	Noch mehr Definitionen	35
1.6.1	Phänomenologische und mechanistische Modelle	35
1.6.2	Stationäre und instationäre Modelle	39
1.6.3	Verteilte und aggregierte Modelle	40
1.7	Wenn alles wie ein Nagel aussieht ...	41
2	Phänomenologische Modelle	43
2.1	Elementare Statistik	44
2.1.1	Deskriptive Statistik	44
2.1.1.1	Einfache Anwendungen von <i>Calc</i> und <i>R</i>	45
2.1.1.2	Anwendung des <i>R-Commanders</i>	49
2.1.2	Zufallsprozesse und Wahrscheinlichkeit	50
2.1.2.1	Zufallsvariablen	51

2.1.2.2	Wahrscheinlichkeit	51
2.1.2.3	Wahrscheinlichkeitsdichte und Verteilungen	53
2.1.2.4	Die Gleichverteilung	55
2.1.2.5	Die Normalverteilung	55
2.1.2.6	Erwartungswert und Standardabweichung	57
2.1.2.7	Mehr zu Verteilungen	58
2.1.3	Induktive Statistik	59
2.1.3.1	Ist der Ertrag von Saatgut A wirklich höher?	59
2.1.3.2	Aufbau eines Hypothesentests	60
2.1.3.3	Der t-Test	60
2.1.3.4	Der Shapiro-Test	62
2.1.3.5	Test der Regressionskoeffizienten	63
2.1.3.6	Varianzanalyse	63
2.1.3.7	Der Tukey-Test	67
2.2	Lineare Regression	68
2.2.1	Das lineare Regressionsproblem	68
2.2.2	Lösung mittels Software	70
2.2.3	Das Bestimmtheitsmaß	71
2.2.4	Interpretation der Regressionskoeffizienten	73
2.2.5	LinRegEx1.r verstehen	74
2.2.6	Nichtlineare lineare Regression	75
2.3	Multiple lineare Regression	78
2.3.1	Das multilineare Regressionsproblem	78
2.3.2	Lösung mittels Software	80
2.3.3	Kreuzvalidierungsverfahren	82
2.4	Nichtlineare Regression	85
2.4.1	Das nichtlineare Regressionsproblem	85
2.4.2	Lösung mit Software	85
2.4.3	Multiple nichtlineare Regression	88
2.4.4	Implizite und vektorwertige Probleme	91
2.4.5	Regressions-Splines	91
2.5	Statistische Versuchsplanung	94
2.5.1	Vollständig randomisierter Versuchsplan	95
2.5.2	Randomisierte Blockpläne	98
2.5.3	Lateinische Quadrate und erweiterte Pläne	99
2.5.4	Faktorielle Versuchspläne	101
2.5.5	D-optimale Versuchsplanung	104
2.5.6	Optimaler Stichprobenumfang	107
3	Mechanistische Modelle I: ODEs	109
3.1	Besondere Bedeutung von Differentialgleichungen	109
3.2	Einführende Beispiele	110
3.2.1	Archäologie-Analogie	110
3.2.2	Körpertemperatur	112
3.2.3	Wecker	114

- 3.3 Aufstellen von ODE-Modellen 122
- 3.3.1 ODE-Modell zum Körpertemperaturbeispiel 123
- 3.3.2 ODE-Modell zum Weckerbeispiel 125
- 3.4 Etwas Theorie, die jeder kennen sollte 127
- 3.4.1 Grundlegende Konzepte 127
- 3.4.2 Gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung 130
- 3.4.3 Autonome, implizite und explizite gewöhnliche Differentialgleichungen 131
- 3.4.4 Anfangswertproblem 131
- 3.4.5 Randwertprobleme 132
- 3.4.6 Beispiel zur Nichteindeutigkeit 134
- 3.4.7 Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen 135
- 3.4.8 Linear im Vergleich zu nichtlinear 137
- 3.4.9 Analytische Lösungsmethoden 138
- 3.5 Numerische Lösungen 140
- 3.5.1 Algorithmen 141
- 3.5.2 Gewöhnliche Differentialgleichungen mit *Maxima* lösen 147
- 3.5.3 Gewöhnliche Differentialgleichungen mit *R* lösen 151
- 3.6 Beispiele für ODE-Modelle 161
- 3.6.1 Weingärung 161
- 3.6.2 Pflanzenwachstum 168

- 4 Mechanistische Modelle II: PDEs 173**
- 4.1 Einführung 173
- 4.1.1 Begrenzte Anwendbarkeit von ODE-Modellen 173
- 4.1.2 Ein Überblick: eigenartige Tiere, Laute und Düfte 174
- 4.1.3 Zwei Probleme, die jeder lösen können sollte 175
- 4.2 Die Wärmeleitungsgleichung 178
- 4.2.1 Fouriersches Gesetz 179
- 4.2.2 Energieerhaltung 179
- 4.2.3 Wärmeleitungsgleichung = fouriersches Gesetz + Energieerhaltung 181
- 4.2.4 Wärmeleitungsgleichung in mehreren Dimensionen 182
- 4.2.5 Anisotroper Fall 183
- 4.2.6 Verstehen der nichtdiagonalen Leitfähigkeiten 184
- 4.3 Etwas Theorie, die jeder kennen sollte 186
- 4.3.1 Partielle Differentialgleichungen 186
- 4.3.2 Anfangs- und Randbedingungen 191
- 4.3.3 Symmetrie und Dimensionalität 193
- 4.3.4 Stationarität und Rotationsbewegungen 199
- 4.4 Analytische Lösungen einer PDE 200
- 4.4.1 Problem 1 201
- 4.4.2 Trennung der Variablen 202
- 4.4.3 Eine spezielle Lösung zur Validierung 203
- 4.5 Numerische Lösungen einer PDE 204

- 4.6 Die Finite-Differenzen-Methode 205
 - 4.6.1 Ableitungen durch Finite-Differenzen ersetzen 205
 - 4.6.2 Formulierung eines Algorithmus 206
 - 4.6.3 Implementierung in *R* 208
 - 4.6.4 Fehler und Stabilitätsanalyse 209
 - 4.6.5 Explizite und implizite Schemas 210
 - 4.6.6 Berechnung eines elektrostatischen Potentials 211
 - 4.6.7 Iterative Methoden für lineare Gleichungssysteme 212
 - 4.6.8 Milliarden von Unbekannten 213
- 4.7 Die Finite-Elemente-Methode 214
 - 4.7.1 Schwache Formulierung von PDEs 215
 - 4.7.2 Approximation einer schwachen Formulierung 217
 - 4.7.3 Geeignete Wahl von Basisfunktionen 218
 - 4.7.4 Verallgemeinerung ins Mehrdimensionale 220
 - 4.7.5 Zusammenfassung der wesentlichen Schritte 220
- 4.8 Die Finite-Volumen-Methode 223
 - 4.8.1 Schwache Formulierung von Erhaltungsgleichungen 223
 - 4.8.2 Diskretisierungsprozesse 224
 - 4.8.3 Auswertung der Flüsse 226
 - 4.8.4 Einfaches 1D-Finite-Volumen-Verfahren 227
 - 4.8.5 Fehler und Stabilitätsanalyse 230
 - 4.8.6 Anmerkungen zur Finite-Volumen-Methode 231
- 4.9 Software zum Lösen von PDEs 232
- 4.10 Eine Beispielsitzung zur numerischen Berechnung der Wärmeleitung 234
 - 4.10.1 Geometrierstellung 235
 - 4.10.2 Gittergenerierung 240
 - 4.10.3 Problemdefinition und Lösungsschritt 241
 - 4.10.4 Postprocessing 243
- 4.11 Ein Blick hinter die Wärmeleitungsgleichung 246
 - 4.11.1 Diffusion und Konvektion 246
 - 4.11.2 Strömungen in porösen Medien 248
 - 4.11.3 Imprägnierprozesse 250
 - 4.11.4 Zweiphasenströmungen in porösen Medien 252
 - 4.11.5 Retention und relative Permeabilität 253
 - 4.11.6 Tropfbewässerung von Spargel 254
 - 4.11.7 Mehrphasenströmung und Poroelastizität 255
 - 4.11.8 Numerische Strömungsmechanik (CFD) 256
 - 4.11.9 Navier-Stokes-Gleichungen 256
 - 4.11.10 Gekoppelte Probleme 259
- 4.12 Eine Beispielsitzung zur numerischen Berechnung einer Einphasenströmung 260
 - 4.12.1 Das rückwärts gewandte Stufenproblem 261
 - 4.12.2 Preprocessing mit Salome und HelyxOS 262

- 4.12.3 Problemdefinition und Berechnung mit OpenFOAM 264
- 4.12.4 Postprocessing mit ParaView 265
- 4.13 Eine Beispielsitzung zur numerischen Berechnung einer
Zweiphasenströmung 269
- 4.13.1 Problemstellung 269
- 4.13.2 Preprocessing mit Salome und HelyxOS 269
- 4.13.3 Problemdefinition und Berechnung 270
- 4.13.4 Postprocessing mit ParaView 271

- 5 Systemanalyse, Problemlösung und Prozessoptimierung in der
Praxis 273**
- 5.1 Big Data: Moderne Analyseverfahren für hochdimensionale Daten
(*Kai Velten, Rolf Reinicke*) 274
- 5.1.1 Fragestellung 274
- 5.1.2 Künstlicher Datensatz 275
- 5.1.3 Einflussfaktoren und Interaktionen für z1 276
- 5.1.4 Einflussfaktoren und Interaktionen für z2 und z3 278
- 5.1.5 Dimensionsreduktion und Klassifikation 280
- 5.1.6 Folgerungen 284
- Literatur 284
- 5.2 Crashkurs R 286
- 5.2.1 Download, Installation, Betriebsmodi, Pakete 286
- 5.2.2 Elementare Operationen mit Daten 292
- 5.2.3 Weitere wichtige R-Kommandos 297
- 5.2.4 Datenbanken 300
- 5.3 Crashkurs Maxima 304
- 5.3.1 Download, Installation, Betriebsmodi, Pakete 304
- 5.3.2 Wichtigste Kommandos 305
- 5.4 Dokumentation und Präsentation mit *Gm.HYDRA* 307
- 5.4.1 Was ist *Gm.HYDRA*? 307
- 5.4.2 Leistungsmerkmale 308
- 5.4.3 Workflow 309
- 5.5 Statistische Prozesskontrolle, Projekt- und Qualitätsmanagement:
SixSigma und Co. 310
- 5.5.1 DMAIC 310
- 5.5.2 Sigma-Scores und Prozessfähigkeitsindizes in der
Getränkeabfüllung 311
- 5.6 Wissenschaftliche Systemanalyse und Modellentwicklung im
Gartenbau
- (*Kai Velten, Markus Kasnitz, Peter Braun*) 316
- 5.6.1 *Literate Programming* und *Reproducible Research* im Gartenbau 316
- 5.6.2 Daten 317
- 5.6.3 Analysejournal 317
- 5.6.4 Langfristiges Modell 320

- 5.6.5 Kurzfristiges Modell 321
- 5.6.6 Folgerungen 323
- Literatur 323

Anhang A Gm.Linux und die Buchsoftware 325

Anhang B Referenzkarten 327

- B.1 Installation *Gm.Linux* 327
 - B.1.1 Systemvoraussetzungen, Passwort 327
 - B.1.2 Download der ISO-Datei 327
 - B.1.3 Nutzung als Live-Betriebssystem 327
 - B.1.4 Alternative 1: Installation auf USB-Stick 328
 - B.1.5 Alternative 2: Virtualisierte Installation 328
 - B.1.6 Alternative 3: Installation auf Desktoprechner 328
 - B.1.7 Alternative 4: Installation auf Server 328
- B.2 Gm.HYDRA 329
 - B.2.1 Template 1: TeX und R 329
 - B.2.2 Template 2: Tex und Maxima 330
 - B.2.3 Template 3: Tex, Hyperlinks und Literaturliteraturdatenbank 332
 - B.2.4 Dokumente kompilieren 334
- B.3 D-optimale Versuchspläne 336
 - B.3.1 Beispiel 336
 - B.3.2 Erstellung eines vollfaktoriellen Versuchsplans 336
 - B.3.3 Erstellung des D-optimalen Versuchsplans 337
- B.4 Berechnung einer Temperaturverteilung 338
 - B.4.1 Beispiel 338
 - B.4.2 Geometrie erzeugen 339
 - B.4.3 Gitter erzeugen 339
 - B.4.4 Definition und Lösung des Problems 340
 - B.4.5 Postprocessing 340
 - B.4.6 Prüfung der Ergebnisse 340
- B.5 Visualisierung mit ParaView 341
 - B.5.1 Beispiel: „Rohr mit Verzweigung“ 341
 - B.5.2 Startprozedur 341
 - B.5.3 Bedienung Graphikfenster 341
 - B.5.4 Einstellung Farben, Lichteffekte 342
 - B.5.5 Strömungsraum mit Drahtgitterdarstellung 342
 - B.5.6 Stromlinien 342
 - B.5.7 „Dicke“ Stromlinien 342
 - B.5.8 Anzeige von Strömungspfeilen 343
 - B.5.9 Strömungsrichtungen nur im Inneren der Geometrie 343
 - B.5.10 Ausgabe von Bildern in hoher Qualität 344
 - B.5.11 Druck ggf. korrigieren 344
- B.6 Berechnung einer Einphasenströmung 344
 - B.6.1 Beispiel 344

B.6.2	Geometrie erzeugen	345
B.6.3	Gitter erzeugen	345
B.6.4	Definition und Lösung des Problems	345
B.6.5	Postprocessing	346
B.6.6	Prüfung der Ergebnisse	346
B.7	Berechnung einer Zweiphasenströmung	346
B.7.1	Beispiel	346
B.7.2	Geometrie erzeugen	347
B.7.3	Gitter erzeugen	347
B.7.4	Definition und Lösung des Problems	348
B.7.5	Postprocessing	348
B.7.6	Prüfung der Ergebnisse	348
B.8	Virtualisierung	349
B.8.1	Voraussetzungen	349
B.8.2	Live-Betriebssystem	349
B.8.3	Betriebssystem installieren und ausführen	349
B.8.4	Dateiaustausch mit virtuellem System	350
B.8.5	Alternativen	351

Literaturverzeichnis	353
-----------------------------	-----

Stichwortverzeichnis	361
-----------------------------	-----

