

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 Literaturdatenbank 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