

Peter Junglas

Sinn und Unsinn der “Iterationsmethode”

Auszug. Ingenieure verwenden zur Lösung nichtlinearer Gleichungen häufig Fixpunkt-Iterationen, ohne sich um Fragen der Konvergenz zu kümmern. An einigen Beispielen aus der Thermodynamik wird gezeigt, dass dies nicht immer gerechtfertigt ist. Dagegen ist das Dekker-Brent-Verfahren hier als universell einsetzbare Methode geeignet. Es sollte daher in mathematischen Vorlesungen entsprechend vorgestellt und eingesetzt werden.

Gleichungslösung in der Praxis

In ingenieurwissenschaftlichen Anwendungen treten häufig nichtlineare Gleichungen auf, die sich aufgrund komplexer Materialgesetze analytisch nicht auflösen lassen. In vielen Lehrbüchern (etwa [1], [2]), aber auch in der Praxis (vgl. [3]) werden solche Gleichungen meistens in die Fixpunktform $x = g(x)$ gebracht und mit Hilfe einfacher Iterationen gelöst, wobei Startwerte aus der Erfahrung heraus oder mit Hilfe vereinfachter Beziehungen abgeschätzt werden.

Diese Methode ist bei Mathematikern beliebt, weil sie auf abstrakte Räume verallgemeinerbar ist und in wichtigen Beweisen (etwa bei Picard-Lindelöf) verwendet wird. Sie konvergiert aber nur unter strengen Voraussetzungen: Notwendig ist bei differenzierbaren Funktionen die Beschränktheit der Ableitung

$$|g'(x^*)| \leq 1 \tag{1}$$

am Fixpunkt x^* , hinreichend etwa

$$|g'(x)| \leq q < 1 \tag{2}$$

für x aus einem geeignetem Intervall. Diese werden aber in der Praxis nicht überprüft.

I. F. wird anhand einiger Beispiele aus der technischen Thermodynamik untersucht, ob bzw. wann die typischerweise verwendete Fixpunkt-Iteration konvergiert. Zum Vergleich werden dabei die Gleichungen jeweils

auch als Nullstellenproblem umformuliert und mit dem Dekker-Brent-Verfahren [4] gelöst, das etwa in Matlab unmittelbar mit Hilfe der `fzero`-Funktion verfügbar ist.

Beispiel 1: Endtemperatur bei Wärmezufuhr

Einem Körper der Masse m werde eine Wärmemenge $Q > 0$ zugeführt, worauf seine Temperatur von T_1 auf die gesuchte Endtemperatur T_2 steigt. Die entscheidende Stoffgröße ist die spezifische Wärmekapazität $c_p(T)$ als Funktion der Temperatur T . Definiert man noch den Mittelwert $\overline{c_p}|_{T_1}^{T_2}$ von c_p über das Intervall $[T_1, T_2]$, erhält man T_2 aus der Beziehung [1]

$$Q = m \overline{c_p}|_{T_1}^{T_2} (T_2 - T_1) \quad (3)$$

Zur Lösung mit Hilfe der Nullstellensuche definiert man

$$f(T) := Q - m \overline{c_p}|_{T_1}^T (T - T_1) \quad (4)$$

Aufgrund thermodynamischer Stabilität ist $\overline{c_p}|_{T_1}^T$ immer positiv. In vielen Fällen ist es auch monoton mit T steigend, aber das gilt nicht für alle Stoffe. Dagegen ist es immer nach unten beschränkt: $\overline{c_p}|_{T_1}^T \geq c_{p,min} > 0$. Damit kann man leicht zeigen, dass die Nullstellenfunktion $f(T)$ monoton fallend ist und dass gilt:

$$f(T_1) > 0, \quad f\left(T_1 + \frac{Q}{m c_{p,min}}\right) < 0 \quad (5)$$

Deswegen funktioniert das Dekker-Brent-Verfahren zuverlässig mit dem A-Priori-Intervall

$$\left[T_1, T_1 + \frac{Q}{m c_{p,min}} \right] \quad (6)$$

Bei der Lösung mithilfe der Fixpunkt-Iteration wird argumentiert, dass man $\overline{c_p}$ als "näherungsweise konstant" ansieht und (3) nach T_2 auflöst:

$$T_2 = T_1 + \frac{Q}{m \overline{c_p}|_{T_1}^{T_2}} =: g(T_2) \quad (7)$$

Man beginnt nun mit einem (beliebigen) Startwert für T_2 und iteriert, bis der Fehler klein genug wird. Das funktioniert für viele Stoffe, aber es

ist nicht grundsätzlich garantiert. Verwendet man für die Wärmekapazität etwa die Funktion

$$c_p(T) := \frac{1}{10} c_{Fe}(T), \quad (8)$$

wobei c_{Fe} die Werte für Eisen sind, divergiert die Iteration explizit. Leider ist dem Autor kein Material bekannt, bei dem es direkt divergiert, aber das konstruierte Beispiel zeigt, dass an der allgemeinen Konvergenz des “Iterationsverfahrens” hier zumindest starke Zweifel angebracht sind.

Beispiel 2: Druckabfall bei turbulenter Rohrströmung

Zur Berechnung des Druckabfalls bei der Strömung durch ein kreisrundes Rohr formuliert man das Problem zunächst um, indem man die interessierenden Größen durch dimensionslose Kennzahlen ersetzt, nämlich die Reynoldszahl Re , die relative Wandrauheit k_r und die Rohrreibungszahl λ . Gesucht ist dann der Zusammenhang $\lambda(Re, k_r)$. Für turbulente Strömungen ($Re > 2300$) verwendet man als Näherungsformel häufig die Colebrook-Beziehung [5]:

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2 \lg \left(\frac{k_r}{3.71} + \frac{2.51}{Re\sqrt{\lambda}} \right) \quad (9)$$

Die Lösung über Nullstellensuche funktioniert problemlos, wobei physikalisch sinnvolle Randbedingungen auch ein A-priori-Intervall liefern. Stattdessen wird aber üblicherweise wieder eine Fixpunkt-Iteration verwendet mit der naheliegenden Iterationsfunktion

$$g(\lambda) := \left[-2 \lg \left(\frac{k_r}{3.71} + \frac{2.51}{Re\sqrt{\lambda}} \right) \right]^{-2} \quad (10)$$

Numerische Untersuchungen zeigen, dass $|g'(\lambda)| < 1$ gilt außer für sehr kleine Werte von λ . Die Iteration konvergiert hier aber sogar für sehr kleine Startwerte, weil dann die erste Iteration in das Attraktionsintervall hinein führt.

Beispiel 3: Vermischung feuchter Luftströme

In der Klimatechnik untersucht man die Mischung zweier Luftströme mit Temperaturen t_i und relativen Feuchten φ_i ($i = 1, 2$) [1]. Das Verhältnis der Massenströme $q := \dot{m}_{L1}/\dot{m}_{L2}$ sei bekannt, ebenso wie der konstante Umgebungsdruck p_0 . Gesucht sind dann Temperatur t_3 und relative Feuchte φ_3 der Mischluft. Der die algebraische Auflösung verhindernde Faktor ist hier die Dampfdruckkurve $p_S(t)$ des Wassers, die den Zusammenhang zwischen Siedetemperatur und Druck angibt. Sie wird in der Regel durch eine an Messwerte angepasste Fitfunktion definiert.

Zur Lösung geht man von den anschaulichen, aber unpraktischen Größen t und φ über zu den Größen x (Feuchtegehalt) und h_{1+x} (spezifische Enthalpie). Dazu ermittelt man zunächst die Feuchtegehalte x_i der Eingangsströme mit

$$x(t, \varphi) := \frac{m_W}{m_L} = \frac{M_W}{M_L} \frac{\varphi p_S(t)}{p_0 - \varphi p_S(t)} \quad (11)$$

Außerdem definiert man noch den Sättigungswert

$$x_S(t) := x(t, 1), \quad (12)$$

der den Feuchtegehalt bei $\varphi = 1$, also 100 % Luftfeuchtigkeit, angibt. Ist $x > x_S$, wird Wasser kondensieren und sich Nebel bilden (Sättigung). Bei der Berechnung der spezifischen Enthalpie muss man den Fall der Sättigung extra behandeln:

$$h_{1+x}(t, x) = \begin{cases} c_{p,L} t + x(r_{0^\circ\text{C}} + c_{p,D} t) & | x \leq x_S(t) \\ c_{p,L} t + x_S(t)(r_{0^\circ\text{C}} + c_{p,D} t) + (x - x_S(t))c_{p,W} t & | x > x_S(t) \end{cases} \quad (13)$$

Alle in den Gleichungen (11) und (13) auftretenden Größen, die hier nicht definiert wurden, sind bekannte Stoffkonstanten.

Mit Hilfe von Massen- und Energieerhaltung kann man nun leicht die Größen x_3 und $h_{1+x,3}$ der Mischung bestimmen,

$$x_3 = \frac{qx_1 + x_2}{1 + q}, \quad h_{1+x,3} = \frac{qh_{1+x,1} + h_{1+x,2}}{1 + q}, \quad (14)$$

um schließlich die Mischtemperatur t_3 zu erhalten, indem man (13) inver-

tiert:

$$h_{1+x}(t_3, x_3) = h_{1+x,3} \quad (15)$$

Dies ist für $x < x_s$ leicht analytisch möglich, im Sättigungsfall aber nur numerisch. Die Schwierigkeit, dass man t_3 schon kennen muss, um zu wissen, welchen der beiden Zweige man braucht, löst man einfach “mit der Brechstange”: Man wählt zunächst den einfachen oberen Zweig und prüft, ob das Ergebnis die Bedingung erfüllt. Ist dies nicht der Fall, muss man sich an den schwierigeren unteren Zweig machen.

Eine Lösung über Nullstellensuche gelingt hier völlig problemlos: Die Nullstellenfunktion ist monoton und ein A-priori-Intervall ist immer $[t_1, t_2]$. Für eine Umformung als Fixpunkt-Iteration ginge man üblicher Weise wie folgt vor: Man nimmt die “schwierige” Funktion $x_s(t)$ als konstant an und löst (13) dann nach t auf. Dies ergibt die Fixpunktfunktion

$$g(t) := \frac{h_{1+x,3} - x_s(t)r_{0^\circ C}}{c_{p,L} + x_s(t)c_{p,D} + (x_3 - x_s(t))c_{p,W}} \quad (16)$$

Numerische Versuche ergeben nun, dass die Iteration divergiert, selbst bei sehr guten Startwerten. Das ist nicht erstaunlich, denn es gilt $|g'| > 1$ am Fixpunkt. Auch weitere Versuche des Autors, in einfacher Weise eine Fixpunktgleichung zu erzeugen, führten zu divergenten Iterationen.

In Lehrbüchern ist die Mischung feuchter Luftströme ein wichtiges Standardproblem, das mit Beispielen und Aufgaben vorgestellt wird. Dabei wird allerdings der Sättigungsfall nie durchgerechnet, selbst wenn er als wichtige Anwendung besprochen wird (wie in [6]). Stattdessen wird auf graphische Verfahren ausgewichen. Anscheinend gehen die Autoren davon aus, dass man nur Lösungsverfahren präsentieren kann, die sich mit einfachen Taschenrechnern nachvollziehen lassen. Dies ist sicher kein zeitgemäßer Ansatz mehr und müsste auch im Hinblick auf Praxisnähe dringend korrigiert werden.

Schlussfolgerungen

Die Beispiele zeigen, dass die Nutzung von Fixpunkt-Iterationen als Lösungsverfahren für typische Fragestellungen der Thermodynamik eine unsichere Sache ist: Häufig konvergieren sie nur unter bestimmten Annahmen oder nur mit Hilfe besonderer Tricks. In allen betrachteten Fällen lassen

sich dagegen die Gleichungen direkt mit dem Dekker-Brent-Verfahren lösen, wobei sogar sichere A-priori-Intervalle angegeben werden können.

In Praxisprojekten erwies es sich als schwierig, die Anwender von den “neuen”, ungewohnten Verfahren zu überzeugen. Sie bevorzugten vertrautere Fixpunkt-Iterationen, zum Teil mit komplizierten verschachtelten Schleifen, die nur nach trickreichen Umformungen konvergierten. Der Einsatz von `fzero` machte die Programme deutlich einfacher und führte beweisbar zur Lösung, wurde aber dennoch abgelehnt mit dem Hinweis auf [3], das anscheinend geradezu gesetzmäßigen Charakter hat.

Hier muss in der Mathematik-Ausbildung rechtzeitig gegengesteuert werden, indem man sich auf sichere und einfach anwendbare Verfahren fokussiert, die dann in den Anwendungsfächern verwendet werden sollten - auch wenn man als Mathematiker dabei auf liebgewonnene Steckenpferde verzichten muss!

Literaturverzeichnis

- [1] **Cerbe, G.; Wilhelms, G.:** *Technische Thermodynamik*. Carl-Hanser-Verlag München, 17. Aufl. (2013).
- [2] **Langeheinecke, K.; Jany P.; et al.:** *Thermodynamik für Ingenieure*. Springer-Vieweg-Verlag Wiesbaden, 9. Aufl. (2013).
- [3] **Verein Deutscher Ingenieure (Hrsg.):** *VDI-Wärmeatlas, Berechnungsblätter für den Wärmeübergang*. Springer-Vieweg-Verlag Wiesbaden, 11. Aufl. (2013).
- [4] **Brent, R. P.:** *An algorithm with guaranteed convergence for finding a zero of a function*. *Comput. J.*, **14**, 422-425 (1971).
- [5] **Gersten, K.:** *Einführung in die Strömungsmechanik*. Vieweg-Verlag Braunschweig Wiesbaden, 6. Aufl. (1991).
- [6] **Stephan, P.; Schaber, K.; et al.:** *Thermodynamik, Grundlagen und technische Anwendungen, Band 2*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 15. Aufl. (2010).

Autor

Prof. Dr. rer. nat. Peter Junglas
 Private Hochschule für Wirtschaft und Technik Vechta/Diepholz/Oldenburg
 Schlesierstraße 13a
 D-49356 Diepholz
 E-Mail: peter@peter-junglas.de