Lösungen von Differentialgleichungen und ihre numerische Simulation

von WOLFGANG K. SEILER

Differentialgleichungen sind das wichtigste Werkzeug für die mathematische Modellierung dynamischer Vorgänge: Um eine Differentialgleichung für die künftige Entwicklung eines Systems aufzustellen, muß man nur den gegenwärtigen Zustand kennen und ansonsten wissen, wie sich das System ausgehend von einem gegebenen Zustand im *allernächsten* Augenblick entwickeln wird; praktisch immer garantiert dann die mathematische Theorie die Existenz einer eindeutig bestimmten Funktion, die die gesamte weitere Entwicklung beschreibt und vorhersagt.

Die schlechte Nachricht ist, daß diese Lösung fast nie in geschlossener Form angegeben werden kann. Um zu konkreten Vorhersagen zu kommen, entwickelte die Mathematik daher schon lange vor dem Aufkommen der ersten Computer numerische Verfahren, mit denen Lösungen von Differentialgleichungen näherungsweise berechnet werden können. Der Erfolg war überwältigend; beispielsweise waren numerische Störungsrechnungen für Planetenbahnen schon Mitte des 19. Jahrhunderts so genau, daß aufgrund der Abweichungen zwischen berechneter und beobachteter Uranusbahn die Position des damals noch unbekannten Planeten Neptun vorhergesagt werden konnte.

Heute ist die numerische Simulation per Computer längst Routine; es gibt zahlreiche Anwendungsprogramme, Unterprogrammpakete und Computeralgebrasysteme, die es auch einem Laien ermöglichen, mit geringem Aufwand die Lösung eines Problems graphisch auf dem Bildschirm erscheinen zu lassen oder auch spezielle Lösungswerte zu berechnen.

Während die mögliche Genauigkeit und Komplexität numerischer Simulationen dadurch drastisch angestiegen ist (und mit jeder neuen Generation von Supercomputern weiter ansteigt), gilt für die Qualität vieler der heute berechneten Lösungen aber leider eher das Gegenteil. Auch der Grund hierfür ist der Fortschritt, hier vor allem die zunehmende Bequemlichkeit beim Umgang mit Standardsoftware: War es für einem Mathematiker des letzten Jahrhunderts noch selbstverständlich, daß er sowohl die Mathematik seines Problems als auch die Stärken und Schwächen der verwendeten numerischen Verfahren kannte, herrscht heute teilweise nur noch der blinde Glaube an die Richtigkeit von allem, was auf einem Computerbildschirm erscheint.

Trotz farbenprächtiger graphischer Lösungen und mit vielen Nachkommastellen berechneter Zahlenwerte darf man nie aus den Augen verlieren, daß das vom Computer gelöste Problem

- *weder* mit dem ursprünglichen Problem übereinstimmt
- *noch* exakt gelöst wurde.

In diesem Vortrag soll es um die Probleme gehen, die daraus entstehen können: Wir werden anhand einfacher Beispiele sehen, was bei der numerischen Simulation alles schiefgehen kann und werden dann diskutieren, welche Möglichkeiten es gibt, trotzdem gesicherte Informationen über die Lösung einer Differentialgleichung zu bekommen. Wir werden allerdings auch sehen, daß es unüberwindbare Hindernisse gibt, die manche Fragen grundsätzlich unentscheidbar machen.

Alle in diesem Vortrag behandelten Beispiele für numerische Simulationen wurden mit *Maple* berechnet, einem Computeralgebrasystem, das in zunehmendem Maße auch an den Schulen Baden-Württembergs zur Verfügung steht. Die genauen Befehle sind in §6 aufgelistet.

1. Verfahren zur numerischen Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen

Mit Rücksicht auf jene Teilnehmer, die während ihres Studiums nur wenig oder gar keine Numerik gehört haben, möchte ich in diesem vorbereitenden Paragraphen einige einfache Verfahren vorstellen, die einen ersten Eindruck davon vermitteln sollen, wie ein Computer eine numerische Simulation durchführt. Die Auswahl der Verfahren orientiert sich an deren Einfachheit, nicht an ihrer Qualität oder Praxisrelevanz. Sie orientiert sich auch daran, daß sich für jedes dieser Verfahren einfache Beispiele finden lassen, in denen es versagt und bei denen man dieses Versagen gut verstehen kann. Das bedeutet aber keineswegs, daß die aufwendigeren und in der Praxis erfahrener Numeriker gebräuchlichen Verfahren *nie* versagen; ein gutes Verfahren versagt zwar selten, aber wenn es versagt, ist das Versagen, genau wie das Verfahren selbst, meist recht subtil und weniger gut zu verstehen.

Numerische Simulationen beruhen praktisch immer auf einer *Diskretisierung* des Problems, d.h. zu einer Differentialgleichung[1)]

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = F(x, t), \quad x(t_0) = x_0$$

für eine Funktion

$$x\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}^N; \quad t \mapsto x(t)$$

wird ersetzt durch eine Iterationsvorschrift der Form

$$x_{n+1} = \Phi(x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots)\,,$$

wobei die x_i Näherungswerte für $x(t_i)$ sein sollen für eine gewisse Unterteilung

$$t_0 < t_1 < \cdots < t_n < t_{n+1} < \dots$$

des Zeitintervalls, in dem die Lösung berechnet werden soll.

Rechnerisch wird das Verfahren besonders einfach, wenn Φ nicht von x_{n+1} abhängt; in diesem Fall spricht man von einem *expliziten,* sonst von einem *impliziten* Verfahren.

Falls Φ von keinem x_i mit $i < n$ abhängt, spricht man von einem *Einschrittverfahren,* sonst von einem *Mehrschrittverfahren.*

Die *Stützpunkte* t_i können die Form

$$t_i = t_0 + h \cdot i$$

haben; in diesem Fall spricht man von einem Verfahren mit *konstanter Schrittweite,* andernfalls von *variabler Schrittweite.* Im letzteren Fall wird die Schrittweite im allgemeinen automatisch so gesteuert, daß zumindest lokal gewisse vorgegebene Fehlertoleranzen eingehalten werden.

---

1) Da die unabhängige Variable hier immer die *Zeit* ist, bezeichne ich Ableitungen, wie in solchen Fällen üblich, nicht durch einen *Strich,* sondern durch einen *Punkt*, also $\dot{x}$ statt x'.

a) **Das Eulerverfahren:** Das einfachste und bekannteste Diskretisierungsverfahren ist das Verfahren von EULER, bei dem die Differentialgleichung

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

ersetzt wird durch die Differenzengleichung

$$\frac{x(t+h) - x(t)}{h} \approx F(x,t)$$

oder

$$x(t+h) \approx x(t) + h \cdot F\big(x(t),t\big)\,,$$

d.h.

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot F\big(x_n, t+nh\big)$$

für einen vorzugebenden, festen Wert $h \in \mathbb{R}$. Wir haben hier also ein explizites Einschrittverfahren mit konstanter Schrittweite für die Werte $t_n = t + n \cdot h$. Es ist zwar zu einfach, um in der Praxis eine große Rolle zu spielen, wird aber gerne verwendet, um mit geringem Aufwand einen ersten Überblick zu gewinnen.

In *Maple* ist das EULER-Verfahren dementsprechend nur für graphische Darstellungen von Lösungen vorgesehen, nicht für die numerische Berechnung von Funktionswerten. Es wird verwendet von der Funktion `DEplot`, falls man die Option

```
method = ‘Euler‘
```

angibt.

b) **Runge-Kutta-Verfahren:** RUNGE-KUTTA-Verfahren gehen aus von der Formel

$$x(t+h) = x(t) + \int_0^h \dot{x}(t+\tau)\,d\tau = x(t) + \int_0^h F\big(x(t+\tau), t+\tau\big)\,d\tau$$

und approximieren dieses Integral durch eine geeignete Linearkombination von Werten $F\big(x(t) + \alpha_i h, t + \beta_i h\big)$.

Beim klassischen, 1901 von RUNGE angegebenen Verfahren wird dieses Integral zunächst nach der SIMPSON-Regel (KEPLERsche Faßregel) als

$$\int_a^b \varphi(t)\,dt \approx \frac{b-a}{6} \cdot \big(\varphi(a) + 4\varphi(b) + \varphi(b)\big)$$

abgeschätzt:

$$\int_0^h F\big(x(t+\tau), t+\tau\big)\, d\tau$$
$$\approx \frac{h}{6} \cdot \left(F\big(x(t), t\big) + 4F\left(x\left(t + \frac{h}{2}\right), t + \frac{h}{2}\right) + F\big(x(t+h), t+h\big) \right) .$$

Der Wert

$$k_1 = F\big(x(t), t\big)$$

ist bekannt, für den nächsten Wert müssen wir aber $x(t+h/2)$ kennen. Da $k_1 = \dot{x}(t)$ ist, könnten wir

$$x\left(t + \frac{h}{2}\right) \approx x(t) + \frac{hk_1}{2}$$

setzen und $F\big(x(t+\frac{h}{2}), t+\frac{h}{2}\big)$ abschätzen durch

$$k_2 = F\left(x(t) + \frac{hk_1}{2}, t + \frac{h}{2}\right) ,$$

wobei dieser Wert gleichzeitig ein Schätzwert für $\dot{x}(t+\frac{h}{2})$ ist. Aus diesem Grund ist auch

$$x\left(t + \frac{h}{2}\right) \approx x(t) + \frac{hk_2}{2} ,$$

und wir können anstelle von k_2 mit gleichem Recht den Wert

$$k_3 = F\left(x(t) + \frac{hk_2}{2}, t + \frac{h}{2}\right)$$

nehmen. Als Kompromiß nehmen wir den Mittelwert. Als Abschätzung für $F\big(x(t+h), t+h\big)$ schließlich bietet sich

$$k_4 = F\big(x(t) + hk_3, t+h\big)$$

an, da k_3 als Schätzwert für $\dot{x}(t+\frac{h}{2})$ ungefähr gleich der mittleren Steigung von x im Intervall $[t, t+h]$ ist. Insgesamt führt dies auf die Regel

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\big(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\big) .$$

Der wesentliche Punkt hier ist, daß bei dieser Wahl der Näherung der Fehler pro Schritt nur noch bei $O(h^4)$ liegt, nicht nur bei $O(h^2)$ wie beim

EULER-Verfahren. Zum Beweis beachte man, daß die KEPLERsche Faßregel für Kurven bis zum dritten Grad exakt ist, so daß ihr Verfahrensfehler bei $O(h^4)$ liegt, und man schätze die Approximationsfehler der $x(t+\tau)$ ab durch TAYLOR-Entwicklung. Dies liefert dann auch nachträglich die Rechtfertigung dafür, daß wir oben willkürlich den Mittelwert von k_2 und k_3 genommen haben.

Das gerade vorgestellte RUNGE-KUTTA-Verfahren ist das Standardverfahren, das *Maple* für sein `DEplot`-Kommando verwendet; es ist auch sonst ein beliebtes Verfahren für Simulationen mit nicht allzu großen Genauigkeitsanforderungen..

Bei RUNGE-KUTTA-Verfahren höherer Ordnung, die auf mehr als nur drei Stützpunkten pro Intervall beruhen, wird analog alles so gewählt, daß jeweils die höchstmögliche h-Potenz zur Fehlerabschätzung erreicht wird.

Bei RUNGE-KUTTA-Verfahren mit variabler Schrittweite werden typischerweise in jedem Schritt zwei RUNGE-KUTTA-Schritte zu Verfahren mit verschiedener Ordnung oder (seltener) verschiedener Schrittweite parallel ausgeführt. Durch Vergleich der Ergebnisse erhält man eine Abschätzung des *lokalen* Verfahrensfehlers und paßt die Schrittweite so an, daß dieser in einem tolerierbaren Bereich liegt. Häufig verwendet werden die von J.R. DORMAND und P.J. PRICE [DP] um 1980 vorgeschlagenen Kombinationen von Verfahren vierter und fünfter *bzw.* siebter und achter Ordnung; siehe dazu etwa auch [DB], §5.4.

Varianten dieser beiden Verfahren werden von *Maple* für das Kommando `dsolve(..., numeric)` eingesetzt, mit dem Differentialgleichungen numerisch integriert werden und das höheren Genauigkeitsanforderungen als `DEplot` genügt. Standardmäßig wird die Methode niedrigerer Ordnung verwendet, die andere muß mit der Option `method = dverk78` explizit verlangt werden.

***c)* Das Milne-Simpson-Verfahren:** Typische Mehrschrittverfahren sind die sogenannten *Prädiktor-Korrektor-Verfahren,* bei denen zunächst im Prädiktorschritt anhand einer Reihe schon bekannter Werte $x_{n-1}, \ldots, x_{n-r}$ ein Näherungswert $x_{n,p}$ für x_n berechnet wird; dieser wird dann im Korrektorschritt noch verbessert. Der Prädiktorschritt beruht typischerweise wieder auf der Beziehung

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} \dot{x}(t)\,dt\,,$$

wobei das Integral hier anhand mehrerer schon berechneter x-Werte nach einer numerischen Quadraturformel geschätzt wird.

Am einfachsten und bekanntesten ist die von MILNE angegebene Methode, bei der das Integral nach der SIMPSON-Regel ausgewertet wird, d.h. man ersetzt den Integranden durch eine Parabel.

Im einzelnen wird dabei wie folgt vorgegangen: $x_1, \ldots, x_n$ mit $n \geq 2$ seien bereits berechnete Näherungen für die Funktionswerte $x(t_i)$; die Werte x_1 und x_2 müssen also nach einem anderen Verfahren berechnet werden. Setze $\dot{x}_i = F(x_i, t_i)$. Anhand der drei Punkte $(t_{n-2}, \dot{x}_{n-2})$ bis $(t_n, \dot{x}_n)$ wird $\dot{x}(t)$ durch eine quadratische Funktion ersetzt; diese Funktion wird integriert um einen ersten Schätzwert für x_{n+1} zu erhalten. Rechnet man alle Einzelheiten explizit nach, führt dies auf die Formel

$$x_{n+1,p} = x_{n-3} + \frac{4h}{3}\big(2\dot{x}_{n-2} - \dot{x}_{n-1} + 2\dot{x}_n\big)\,.$$

Hieraus wird nun ein erster Schätzwert

$$\dot{x}_{n+1} = F\big(x_{n+1,p}, t_{n+1}\big)$$

für die Ableitung an der Stelle t_{n+1} berechnet, anhand dessen der korrigierte Wert $x_{n+1,c}$ nun wieder durch Integration nach der SIMPSON-Regel berechnet wird, jetzt aber, da ein Schätzwert für $\dot{x}_{n+1}$ bekannt ist, über eine Parabel durch die drei Punkte $(t_{n-1}, \dot{x}_{n-1})$ bis $(t_{n+1}, \dot{x}_{n+1})$. Im Gegensatz zum obigen Schritt muß jetzt also nicht mehr extrapoliert werden:

$$x_{n+1,c} = x_{n-1} + \frac{h}{3}\big(\dot{x}_{n-1} + 4\dot{x}_n + \dot{x}_{n+1}\big)\,.$$

Dieser Wert wird als Schätzwert für $x(t_{n+1})$ genommen, und auch $\dot{x}_{n+1}$ wird für den weiteren Verlauf der Rechnung noch einmal über die rechte Seite der Differentialgleichung neu berechnet.

In der Praxis spielt das MILNE-SIMPSON-Verfahren heute keine Rolle mehr; einen Grund dafür werden wir in §2*b)* sehen. Ein erheblich besseres und auch gebräuchlicheres Verfahren, das mit demselben Aufwand auskommt, ist das ADAMS-BASHFORTH-MOULTON-Verfahren dritter Ordnung, das nach genau demselben Schema funktioniert, aber die beiden Gleichungen

$$x_{n+1,p} = x_n + \frac{h}{12}\big(5\dot{x}_{n-2} - 16\dot{x}_{n-1} + 23\dot{x}_n\big)$$

und

$$x_{n+1,c} = x_n + \frac{h}{12}\big(-\dot{x}_{n-1} + 8\dot{x}_n + \dot{x}_{n+1}\big)$$

verwendet.

Maple liebt Mehrschrittverfahren nicht; wer trotzdem eines benutzen möchte, muß es selbst programmieren.

2. Elementare Beispiele zur numerischen Integration

Nach diesen Vorbereitungen können wir und nun daran machen, konkrete Beispiele zur numerischen Integration zu betrachten. Diese Beispiele sind allesamt so gewählt, daß man ihre Lösungen leicht explizit angeben kann; es handelt sich also um Fälle, bei denen man üblicherweise keine numerischen Verfahren anwenden würde. Hier soll der Vergleich zwischen der bekannten Lösung und den numerischen Ergebnissen mögliche Probleme bei numerischen Simulationen aufzeigen.

***a)* Steife Probleme:** Betrachten wir als erstes Beispiel eine der einfachsten Differentialgleichungen überhaupt, die Gleichung

$$\dot{x} = \lambda x \quad \text{mit} \quad x(0) = x_0$$

mit der wohlbekannten Lösung

$$x(t) = x_0 \cdot e^{\lambda t} .$$

Abbildung 1 zeigt die nach dem EULER-Verfahren mit Schrittweite $h = 0{,}1$ berechnete „Lösung“ für den Fall $\lambda = -25$ und die Anfangsbedingung $x(0) = 1$.

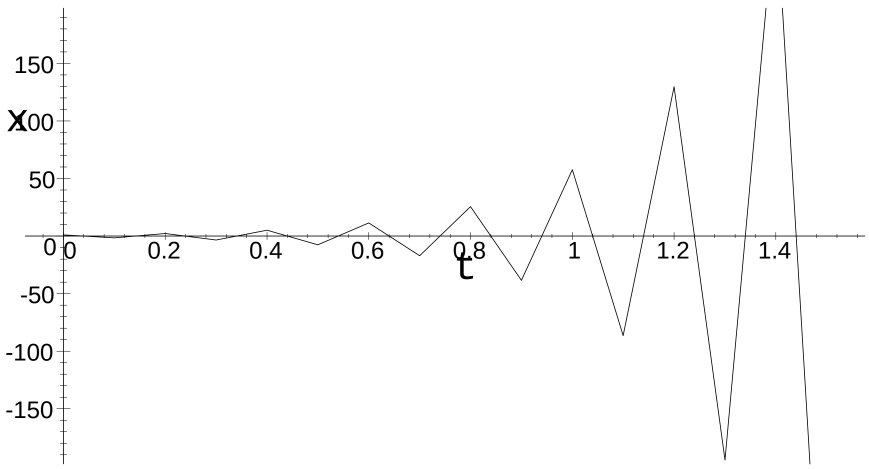

Abb. 1: Euler-Verfahren mit Schrittweite 0,1

Wie kann so etwas passieren? Der Grund liegt natürlich an der zu groben Diskretisierung: Das EULER-Verfahren macht aus der Differentialgleichung $\dot{x} = \lambda x$ die Rekursion

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot \lambda x_n = x_n \cdot (1 + h\lambda)\,,$$

die für hinreichend kleine Werte von h in der Tat genau das liefert, was wir erwarten:

$$x_n = x_0 \cdot (1 + h\lambda)^n = x_0 \cdot \left(1 + \frac{nh\lambda}{n}\right)^n$$

konvergiert bei konstant gehaltenem Produkt nh für $n \to \infty$ gegen $x(nh) = x_0 \cdot e^{nh\lambda}$.

Ist allerdings $\lambda < 0$ und $|\lambda|\, h > 1$, so wird $1 + h\lambda$ negativ, die Folge der x_n alterniert also zwischen positiven und negativen Werten. Falls sogar $|1 + h\lambda| > 1$ ist, *wachsen* die Beträge der x_n monoton und unbegrenzt – ganz im Gegensatz zu den rapide fallenden positiven Werten $x(nh) = x_0 \cdot e^{nh\lambda}$. Im obigen Beispiel mit $\lambda = -25$ und $h = 0{,}1$ ist $1 + h\lambda = -1,5$, das Versagen des EULER-Verfahren ist also nicht verwunderlich.

Vernünftige Ergebnisse sind hier höchstens dann möglich, wenn $|h\lambda| < 1$ ist; im Beispiel sollte die Schrittweite also kleiner als 0,04 sein. Nimmt man sicherheitshalber die Hälfte dieses Werts, also $h = 0{,}02$, so erhält man, wie Abbildung 2 zeigt, eine einigermaßen akzeptable numerische Lösung.

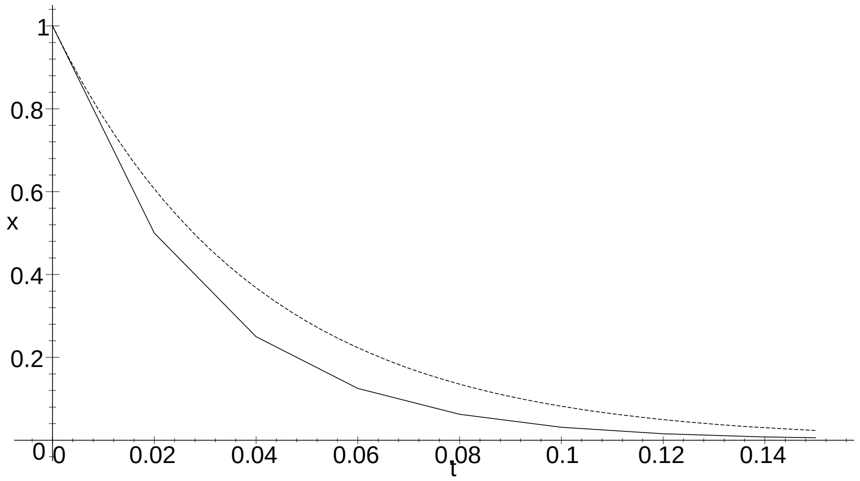

Abb. 2: Euler-Verfahren mit Schrittweite 0,02 und korrekte Lösung (gestrichelt)

Für sehr negatives λ ist es praktisch unmöglich, $x(t)$ für große Werte von t nach diesem Verfahren zu berechnen; die dazu notwendigen Schrittweiten von weniger als $1/|\lambda|$ machen die Rechnung einfach zu aufwendig.

Offensichtlich ist dieses Problem unabhängig vom hier betrachteten EULER-Verfahren: Auch jedes anderen Einschrittverfahren kann höchstens bei sehr kleine Schrittweiten eine vernünftige Annäherung an die Lösung liefern. Bei einem aufwendigeren Verfahren wie etwa dem RUNGE-KUTTA-Verfahren kann die Schrittweite zwar wegen der mehrfachen Funktionsauswertung pro Schritt etwas größer gewählt werden, $h = 0{,}1$ etwa würde im obigen Beispiel noch eine positive monoton fallende Funktion liefern. Schon bei $h = 0{,}125$ wird es dann aber wirklich gefährlich: Während eine „Lösungskurve“ wie in Abbildung 1 ziemlich klar zeigt, daß etwas schiefgegangen ist, würde ein gläubiger Computerbenutzer die Kurve aus Abbildung 3 wohl als Näherungslösung akzeptieren.

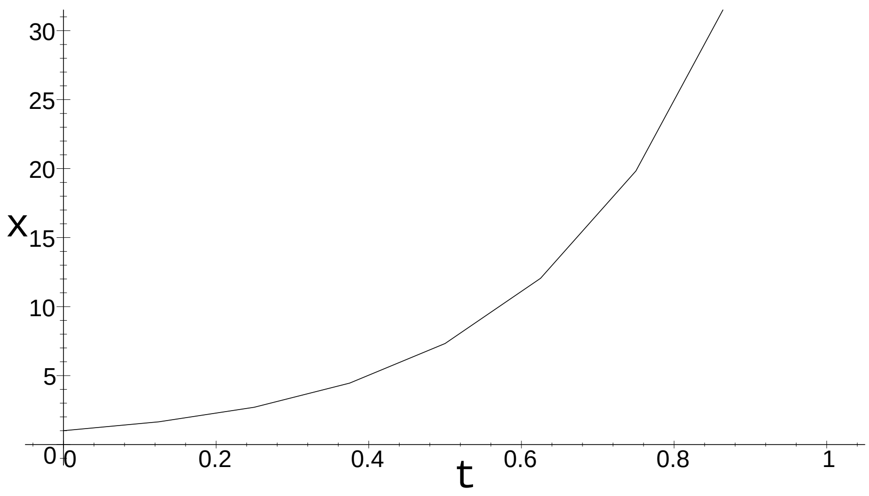

Abb. 3: Runge-Kutta-Verfahren mit Schrittweite 0,125

Die Mathematik hat für diese Problematik im wesentlichen nur eine Definition anzubieten, und auch diese ist keine „echte“, sondern nur eine heuristische Definition: *Eine Differentialgleichung oder ein System von Differentialgleichungen heißt* steif, *wenn keines der gängigen Einschrittverfahren mit vertretbarem Aufwand eine akzeptable Näherungslösung liefert.*

Um zu sehen, ob ein Problem steif ist, gibt es also keine andere Möglichkeit, als verschiedene Verfahren entweder mit variabler Schrittweite oder mit mehreren verschiedenen Schrittweiten auszuprobieren und dann anhand der Ergebnisse (oder der aus Zeitmangel nichtvorhandenen Ergebnisse bei Verfahren mit genauigkeitsabhängiger Schrittweitensteuerung) zu entscheiden. Wenn ein Problem erst einmal als steif erkannt ist, bietet die Numerik dann allerdings spezielle Algorithmen an, die gerade hier greifen. Im betrachteten Beispiel etwa müßte man die dem EULER-Verfahren zugrundeliegende Diskretisierung einfach *rückwärts* anwenden in der Form

$$\frac{x(t+h)-x(t)}{h} \approx F(x,t+h)$$

oder

$$x(t+h) \approx x(t) + h \cdot F\big(x(t), t+h\big) ,$$

d.h.

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot \lambda x_{n+1} .$$

Damit haben wir ein *implizites* Verfahren bekommen, das sich allerdings in diesem speziellen Fall leicht explizit machen läßt: Auflösen nach x_n führt zu

$$x_n = x_{n+1} \cdot (1 - h\lambda)$$

und damit auf die Rekursionsvorschrift

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{1-h\lambda} .$$

Hier ist der Nenner auch bei sehr negativem λ immer positiv, und das Verfahren gibt auch für akzeptable Schrittweiten noch gute Lösungen. Beim nichtsteifen Problem mit großem *positivem* λ muß dann natürlich dieses Verfahren versagen, es ist also keine universell einsetzbare Alternative zum klassischen EULER-Verfahren.

Allgemein zeigt sich bei steifen Problemen, daß implizite Verfahren besser geeignet sind als explizite, aber natürlich ist nicht *jedes* implizite Verfahren geeignet.

***b)* Verfahrensbedingte Instabilitäten bei Mehrschrittverfahren:** Steife Differentialgleichungen sind *per definitionem* ein Problem für *Einschrittverfahren;* da bei einem Prädiktor-Korrektor-Verfahren die Lösungskurve durch ein komplizierteres Verfahren berechnet wird als durch die bloße Approximation durch eine Kurve kleinen Grades, steht zu erwarten, daß solche Verfahren hier vielleicht besser abschneiden. In diesem Abschnitt wollen wir sehen, daß zumindest das klassische MILNE-SIMPSON-Verfahren mit der negativen Exponentialfunktion eher *mehr* Probleme hat als das EULER-Verfahren.

Betrachten wir also wieder die Differentialgleichung

$$\dot{x} = \lambda x, \quad x(0) = 1$$

und integrieren wir sie diesmal nach dem MILNE-SIMPSON-Verfahren. Das Ergebnis für $\lambda = -1$ ist in Abbildung 4 zu sehen: Offensichtlich geht alles ganz gut bis etwa $t = 5$, wenn auch bei genauerem Hinsehen schon ab $t = 2$ ein leichtes Zittern zu bemerken ist, aber spätestens ab $t = 5$ beginnen exponentiell ansteigende Störungen das Geschehen zu dominieren.

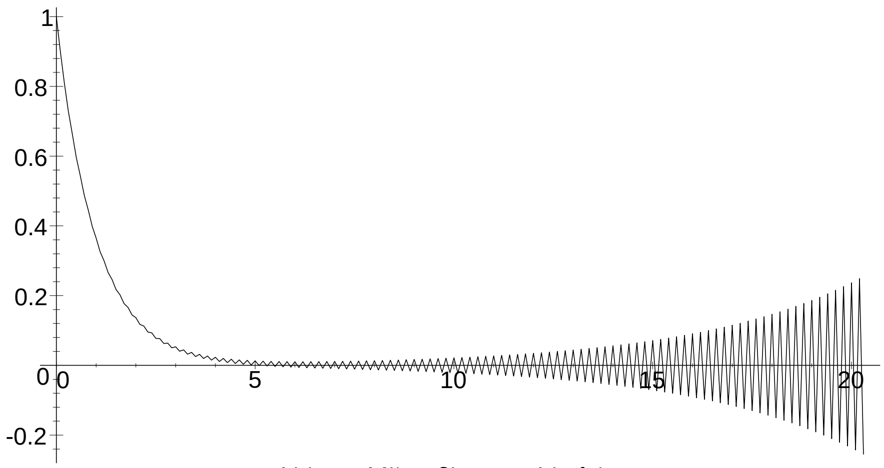

Abb. 4: Milne-Simpson Verfahren

Auch diese Störungen können mathematisch erklärt werden [A]: Nach §1 gilt

$$x_{n+1} = x_{n-1} + \frac{h}{3}\left(\dot{x}_{n-1} + 4\dot{x}_n + \dot{x}_{n+1}\right),$$

wobei wir der Einfachheit halber außer auch lassen, daß $\dot{x}_{n+1}$ nach Ausführung dieser Rechnung noch einmal korrigiert wird – auf den in Abbildung 4 beobachteten Effekt hat dies keinen Einfluß.

Setzen wir in dieser Formel

$$\dot{x}_n = \lambda x_n ,$$

so erhalten wir die Differenzengleichung

$$x_{n+1} = x_{n-1} + \frac{h}{3}\left(\lambda x_{n-1} + 4\lambda x_n + \lambda x_{n+1}\right)$$

oder

$$\left(1 - \frac{h\lambda}{3}\right)x_{n+1} = \left(1 + \frac{h\lambda}{3}\right)x_{n-1} + \frac{4h\lambda}{3}x_n .$$

Diese Differenzengleichung läßt sich explizit lösen: Die brutale Methode besteht darin, einfach den Operator `rsolve` von *Maple* aufzurufen, der (mit der Abkürzung $a = h\lambda/3$) das Ergebnis

$$\begin{aligned}
x(n) = &- \Big(7\,x(0)a^2 + 2\,a^2x(1) - 4\,\sqrt{3\,a^2+1}\,a x(0) \\
&\quad - a\sqrt{3\,a^2+1}\,x(1) - 2\,a x(1) + \sqrt{3\,a^2+1}\,x(1) + x(0)\Big) \\
&\quad \times \left(-\frac{1+a}{-\sqrt{3\,a^2+1}+2\,a}\right)^n 1/2\frac{1}{\sqrt{3\,a^2+1}}\left(-\sqrt{3\,a^2+1}+2\,a\right)^{-1} \\
&+ \Big(7\,x(0)a^2 + 2\,a^2x(1) + 4\,\sqrt{3\,a^2+1}\,a x(0) \\
&\quad + a\sqrt{3\,a^2+1}\,x(1) - 2\,a x(1) - \sqrt{3\,a^2+1}\,x(1) + x(0)\Big) \\
&\quad \times \left(-\frac{1+a}{\sqrt{3\,a^2+1}+2\,a}\right)^n 1/2\frac{1}{\sqrt{3\,a^2+1}}\left(\sqrt{3\,a^2+1}+2\,a\right)^{-1}
\end{aligned}$$

liefert.

Übersichtlicher wird das ganze, wenn man selber denkt und beachtet, daß die Rekursiongleichung linear in den x_i ist, so daß es spezielle Lösungen der Form $x_n = z^n$ gibt, wobei z den Gleichungen

$$(1-a)z^{n+1} = (1+a)z^{n-1} + 4az^n$$

oder, da uns $x_n \equiv 0$ nicht interessiert, der einen quadratischen Gleichung

$$(1-a)z^2 = 4az + 1 + a$$

genügt. Deren Lösungen sind

$$z_{1/2} = \frac{2a \pm \sqrt{3a+1}}{1-a}\ ;$$

die allgemeine Lösung der Rekursionsgleichung ist daher

$$x_n = \alpha z_1^n + \beta z_2^n$$

mit $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. (Auch wenn es auf den ersten Blick nicht so aussieht: *Maple* berechnete genau diese Lösung!)

Für kleine Schrittweiten h ist $a = h\lambda/3$ betragsmäßig klein, wir können also

$$z_1 = 1 + 3a + \frac{9a^2}{2} + O(a^3)$$

und

$$z_2 = -1 + a - \frac{a^2}{2} + O(a^3)$$

durch Linearformen approximieren und erhalten für große n

$$z_1^n \approx (1+3a)^n = \left(1 + \frac{3an}{n}\right)^n \approx e^{3an} = e^{\lambda \cdot nh}$$

und

$$z_2^n \approx (-1+a)^n = \left(-1 + \frac{an}{n}\right)^n \approx (-1)^n e^{-an} = (-1)^n e^{-\lambda \cdot nh/3} .$$

Damit sind also die Potenzen von z_1 gute Approximationen der korrekten Lösung $x(t) = e^{\lambda t}$; man überlegt sich leicht, daß sie für $h \to 0$ in der Tat gegen $e^{\lambda t}$ konvergieren.

Die Potenzen von z_2 dagegen sind Störterme. Leider lassen sie sich aufgrund von Rundungsfehlern und wegen der Notwendigkeit, für x_1 und x_2 Schätzwerte zu nehmen, nicht vermeiden: Das MILNE-SIMPSON-Verfahren liefert also nur

$$x_n = \alpha z_1^n + \beta z_2^n \quad \text{mit} \quad \alpha \approx 1 \text{ und } \beta \approx 0 ,$$

was ungefähr der Näherungslösung

$$x(t) \approx \alpha e^{\lambda t} \pm \beta e^{-\lambda t/3}$$

entspricht, wobei sich das Vorzeichen mit jedem Iterationsschritt ändert.

Für positives λ ist das eine recht gute Näherung: Der Störterm ist betragsmäßig nie größer als β und geht recht schnell gegen Null. Für *negatives* λ dagegen *muß* der Störterm für hinreichend große Werte von t das Verhalten der Näherungslösung dominieren, die somit ohne Sinn und Verstand zwischen betragsmäßig immer größer werdenden Zahlen hin- und herspringt.

Allgemein haben mehrstufige Verfahren die Eigenschaft, eine Differentialgleichung durch eine Differenzengleichung höherer Ordnung zu ersetzen, wodurch die Dimension des Lösungsraums der Differenzengleichung größer wird als die des Lösungsraums der Differentialgleichung. Das muß kein Problem sein; wenn die zusätzlichen Lösungen einigermaßen beschränkt bleiben, fallen sie gegenüber anderen numerischen Störungen nicht weiter ins Gewicht, da sie ja auf jeden Fall nur mit einem sehr kleinen Koeffizienten in die Lösung eingehen.

Falls sie aber wie hier exponentiell ansteigen, muß eine numerische Simulation für hinreichend große Werte von t zu unsinnigen Ergebnissen führen. Aus diesem Grund muß beim Einsatz von Mehrschrittverfahren unbedingt auf die Stabilität geachtet werden – das ebenfalls in §1*c)* erwähnte Verfahren von ADAMS-BASHFORTH-MOULTON etwa hat auch mit einer zehnmal so langen Simulationsdauer keine Probleme. Der interessierte Leser kann nachrechnen, warum das so ist.

c) **Schlecht gestellte Probleme:** Wir betrachten wieder ein Anfangswertproblem, das auf die Lösung $x(t) = e^{-t}$ führt, dieses Mal aber die etwas kompliziertere Gleichung

$$\dot{x} = x - 2e^{-t} \quad \text{mit } x(0) = 1 \, .$$

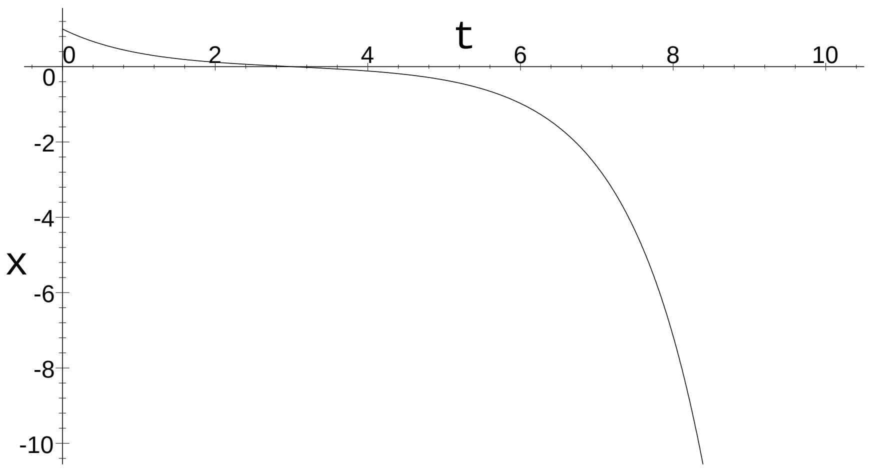

Abb. 5: Euler-Verfahren mit Schrittweite 0,01

Die numerische Integration in Abbildung 5 bietet bis etwa $t = 2$ keinen Grund zur Klage, danach aber geht die Kurve immer schneller ins Negative und wird somit unbrauchbar.

An diesem Verhalten ist nun allerdings die Computersimulation ziemlich unschuldig: Für die allgemeine Anfangsbedingung $x(0) = x_0$ hat obige Differentialgleichung die Lösung

$$x(t) = e^{-t} + (x_0 - 1)e^t \, ,$$

und natürlich ist es wieder unvermeidlich, daß die Bedingung $x_0 = 1$ durch Rundungsfehler gestört wird, so daß für große Werte von t die wachsende Exponentialfunktion dominiert.

Auch die exakte Lösung $x(t) = e^{-t} + (x_0 - 1)e^t$ ist daher praktisch unbrauchbar, denn es gibt nur wenige realistische Anwendungen, bei denen die Anfangsbedingungen wirklich *exakt* bekannt sind; meist beruhen sie auf Meßergebnissen und haben keine höhere Genauigkeit als die zugehörige Messung. Im vorliegenden Fall, wo das Langzeitverhalten der Lösung in extremem Maße vom Vorzeichen von $x_0 - 1$ abhängt, kann man mit etwa vorliegenden unexakten Daten keine vernünftige Voraussage machen und sollte einen besseren Ansatz zur Modellierung des Problems wählen – so es einen gibt.

***d)* Globale Akkumulation von Diskretisierungsfehlern:** Die Nützlichkeit des Beispiels $x = e^{-t}$ ist langsam ausgereizt; gehen wir also über zur etwas komplizierteren Funktion $x = e^{-t^2}$. Sie genügt der Differentialgleichung

$$\dot{x} = -2tx \quad \text{mit } x(0) = 1 ,$$

und die allgemeine Anfangsbedingung $x(0) = x_0$ führt offenbar einfach auf $x = x_0 e^{-t^2}$. Die Anfangsbedingung bringt hier also keine Instabilität bezüglich des Langzeitverhaltens ins Spiel – ganz im Gegenteil werden Fehler von x_0 ziemlich schnell verkleinert, und das asymptotische Verhalten der Lösungen ist sogar völlig unabhängig von der Anfangsbedingung.

Wir stellen uns wieder auf den Standpunkt, daß wir die Lösung nicht kennen und sie numerisch bestimmen müssen; wir verwenden dazu das EULER-Verfahren mit konstanter Schrittweite, etwa mit $h = 0,2$.

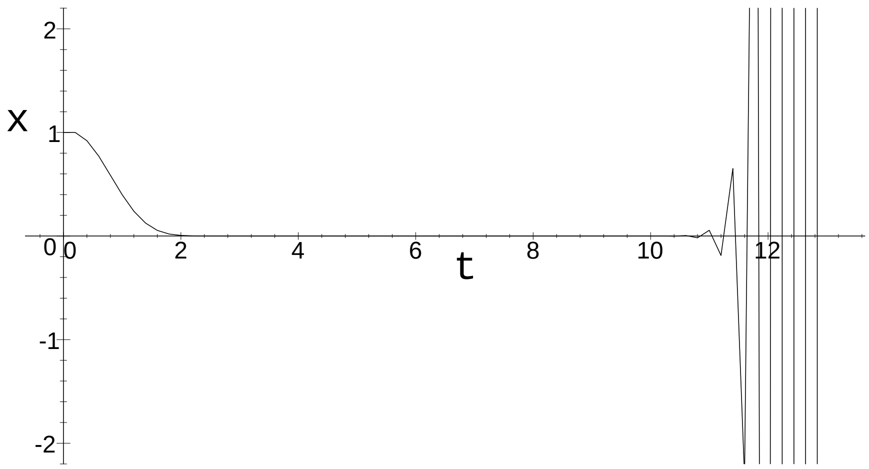

Abb. 6: Globale Akkumulation von Rundungsfehlern

Zumindest anfangs zeigt die numerische Simulation genau das erwartete Verhalten, eine schnell abfallende Lösung. Dann aber, kurz hinter dem Zeitpunkt $t = 10$, beginnt die Lösung plötzlich stark auszuschlagen und sieht ganz so aus, als wolle sie betragsmäßig gegen Unendlich streben. Bei Verkleinerung der Schrittweite ändert sich grundsätzlich nichts; lediglich der Punkt, ab dem die Lösung ansteigt, verschiebt sich nach hinten: für $h = 0{,}1$ zu etwa $t = 25$, für $h = 0{,}05$ zu $t \approx 47$.

Um dieses Verhalten zu verstehen, müssen wir die beim EULER-Verfahren auftretenden Fehler genauer analysieren: Zunächst gibt es in jedem Iterationsschritt den lokalen Verfahrensfehler aufgrund der Approximation des Differentialquotienten durch einen Differenzenquotienten; an der Stelle $x(nh)$ ist er

$$\begin{aligned}\delta_n &= x\big((n+1)h\big) - x(nh) - h \cdot F\big(x(nh), nh\big)\\ &= h \cdot \Big(F(x(\tau), \tau) - F\big(x(nh), nh\big)\Big)\ ;\end{aligned}$$

denn nach dem Mittelwertsatz ist

$$\frac{x\big((n+1)h\big) - x(nh)}{h} = \dot{x}(\tau) = F\big(x(\tau), \tau\big)$$

für ein gewisses τ zwischen nh und $(n+1)h$. Nochmalige Anwendung des Mittelwertsatzes zeigt, daß

$$\delta_n = O(h^2)$$

ist mit einem Ausdruck in den partiellen Ableitungen von F und in $\dot{x}$ als Koeffizient. Sofern diese Funktionen einigermaßen glatt sind, läßt sich dieser Fehler also leicht durch Wahl eines geeigneten h kontrollieren.

Nun kennen wir aber $x(nh)$ nicht und müssen stattdessen mit x_n arbeiten, das bereits mit einen Fehler

$$\varepsilon_n = x_n - x(nh)$$

behaftet ist. Wenn wir also die Formel

$$x\big((n+1)h\big) = x(nh) + h \cdot F\big(x(nh), nh\big)$$

ersetzen durch

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot F(x_n, nh)\ ,$$

haben wir insgesamt den Fehler

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + h \cdot \big(F\big(x(nh), nh\big) - F(x_n, nh)\big) + \delta_n \,.$$

Da

$$x(nh) = x_n + \varepsilon_n$$

ist, können wir wieder den Mittelwertsatz anwenden und erhalten

$$\begin{aligned}\varepsilon_{n+1} &= \varepsilon_n + h\varepsilon_n \cdot \frac{\partial F(\xi, nh)}{\partial x} + \delta_n \\ &= \Big(1 + h \cdot \frac{\partial F(\xi, nh)}{\partial x}\Big)\varepsilon_n + \delta_n\end{aligned}$$

mit einem ξ zwischen $x(nh)$ und x_n.

Hier ist $F(x,t) = -2tx$, also

$$\frac{\partial F(\xi, t)}{\partial x} = -2t \,,$$

und somit folgt

$$\varepsilon_{n+1} = (1 - 2ht) \cdot \varepsilon_n + \delta_n \,.$$

Für große n oder – genauer – für $t = nh > 1/h$ wird der Faktor vor ε_n kleiner als -1, der Fehler ε_n steigt also schneller als exponentiell an und wechselt dabei ständig sein Vorzeichen – genau wie es in Abbildung 6 zu sehen ist.

Bei der hier verwendeten Schrittweite von $h = 0{,}2$ wachsen die Fehler also spätestens ab $t = 5$ stark an. Da sie von einem sehr kleinen Wert aus starten, dauert es noch eine Weile, bis sie bei etwa $t = 10$ sichtbar werden, aber bald darauf dominieren sie das berechnete Ergebnis.

Bei Halbierung der Schrittweite sollte es etwa doppelt so lange dauern, bis das Ergebnis unbrauchbar wird; dies stimmt einigermaßen mit den oben erwähnten Zahlen überein.

e) **Numerisches Chaos:** Für das nächste Beispiel betrachten wir erstmals eine *nichtlineare* Differentialgleichung, die *logistische Gleichung*

$$\dot{x} = \lambda x(M - x) \,.$$

Sie beschreibt einen Wachstumsprozeß mit Sättigungsgrenze M und kann, als Differentialgleichung mit getrennten Veränderlichen, leicht explizit gelöst werden; die üblichen, in der Schule gelehrten Grundregeln der Differential- und Integralrechnung reichen dazu völlig aus:

Für die Umkehrfunktion $t = g(x)$ von $x(t)$ gilt

$$g'(x) = \frac{1}{\dot{x}(t)} = \frac{1}{\lambda x(M-x)} ,$$

also ist

$$g(x) = \int \frac{dx}{\lambda x(M-x)} ,$$

und wir müssen dieses Integral ausrechnen. Der Nenner ist im wesentlichen gerade der Hauptnenner von $1/x$ und $1/(M-x)$, es liegt also nahe, den Integranden als Summe zweier Brüche mit Nenner x und $M-x$ zu schreiben, denn diese Brüche können wir integrieren. In der Tat ist

$$\frac{1}{x} + \frac{1}{M-x} = \frac{M}{x(M-x)}$$

und somit

$$\frac{1}{\lambda x(M-x)} = \frac{1}{\lambda M}\Big(\frac{1}{x} + \frac{1}{M-x}\Big) ,$$

wir erhalten also

$$\begin{aligned}
g(x) &= \frac{1}{\lambda M}\Big(\int \frac{dx}{x} + \int \frac{dx}{M-x}\Big) \\
&= \frac{1}{\lambda M}\big(\ln x - \ln(M-x)\big) + C \\
&= \frac{1}{\lambda M} \ln \frac{x}{M-x} + C \\
&= -\frac{1}{\lambda M} \ln \frac{M-x}{x} + C \\
&= -\frac{1}{\lambda M} \ln\Big(\frac{M}{x} - 1\Big) + C .
\end{aligned}$$

Diese Gleichung muß noch nach x aufgelöst werden: Aus

$$t = g(x) = -\frac{1}{\lambda M} \ln\Big(\frac{M}{x} - 1\Big) + C$$

folgt zunächst, daß

$$-\lambda M \cdot t - C = \ln\Big(\frac{M}{x} - 1\Big)$$

ist; Anwendung der Exponentialfunktion auf beide Seiten führt auf

$$e^{-\lambda M \cdot t - C} = \frac{M}{x} ,$$

und daraus schließlich erhält man sofort die Gleichung

$$x(t) = \frac{M}{1 + \alpha\, e^{-\lambda M \cdot t}} ,$$

in der $\alpha = e^C$ etwa aus der Beziehung

$$x(0) = \frac{M}{1+\alpha} \quad \text{oder} \quad \alpha = \frac{M}{x(0)} - 1$$

bestimmt werden kann.

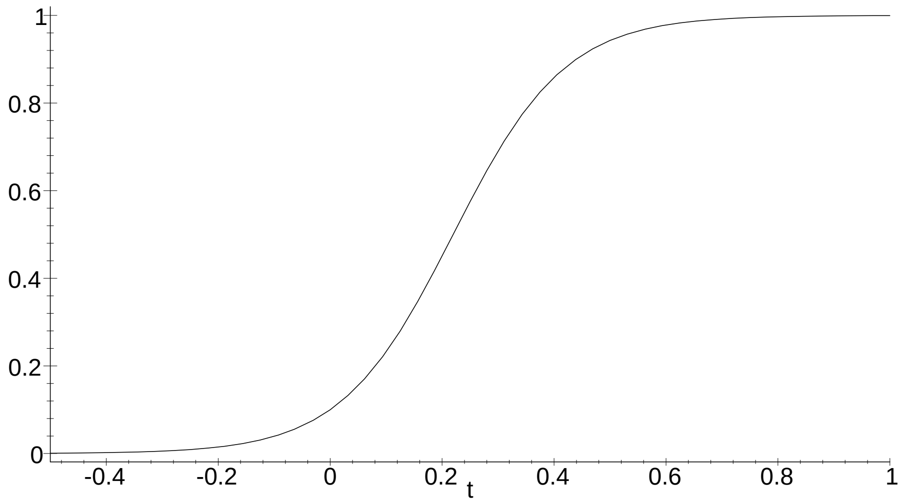

Abb. 7: Eine Lösungskurve der logistischen Gleichung

Die Lösungskurve hat eine ungefähr die Form eines langestreckten S; etwas vornehmer spricht man von einer *sigmoiden* Form.[2)] Im Anfangsbereich steigt sie ungefähr wie eine Exponentialfunktion, dann wird sie zunehmend flacher, bis sie sich schließlich wie eine Exponentialfunktion mit negativem Exponenten der Sättigungsgrenze nähert.

2) Der Leser kann sich aussuchen, ob σ, ς oder Σ gemeint ist.

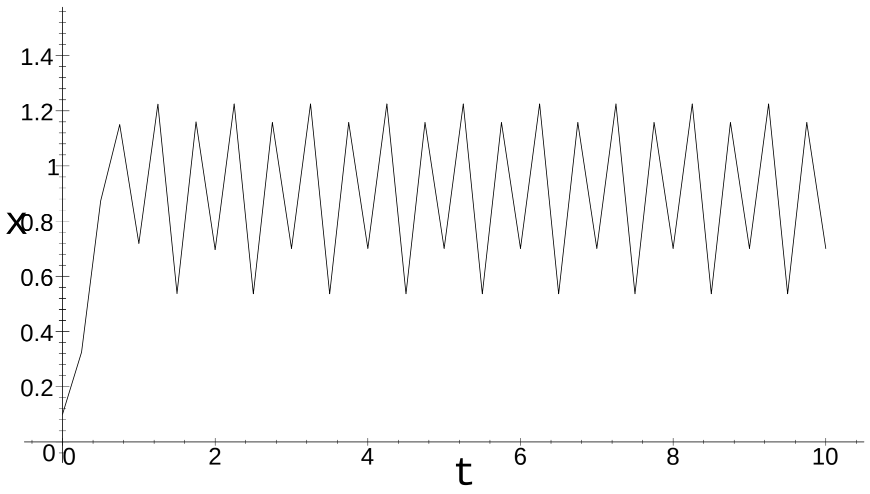

Abb. 8: Numerische Simulation der logistischen Gleichung mit $h = 0{,}25$

Vergessen wir nun für den Augenblick, daß wir die korrekte Lösung kennen, und versuchen wir, die Gleichung nach dem EULER-Verfahren numerisch zu lösen.

Wir erhalten eine Lösung, die periodisch zwischen vier Werten hin- und herspringt. Die Zahl vier ist dabei aber offensichtlich mehr oder weniger zufällig: Bei geringfügiger Verkleinerung der Schrittweite auf $h = 0{,}22$ in Abbildung 9 haben wir nur noch zwei Werte, bei Vergrößerung auch $h = 0{,}3$ in Abbildung 10 ist überhaupt keine Periodizität mehr zu erkennen.

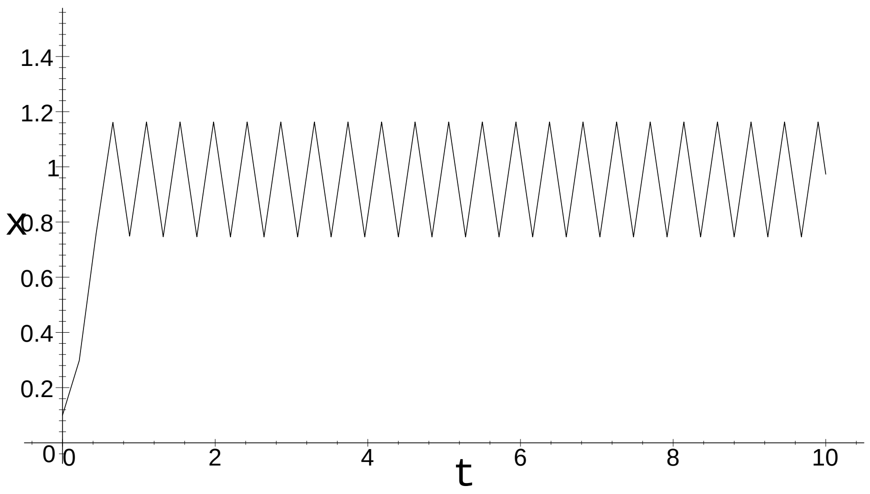

Abb. 9: Numerische Simulation der logistischen Gleichung mit $h = 0{,}22$

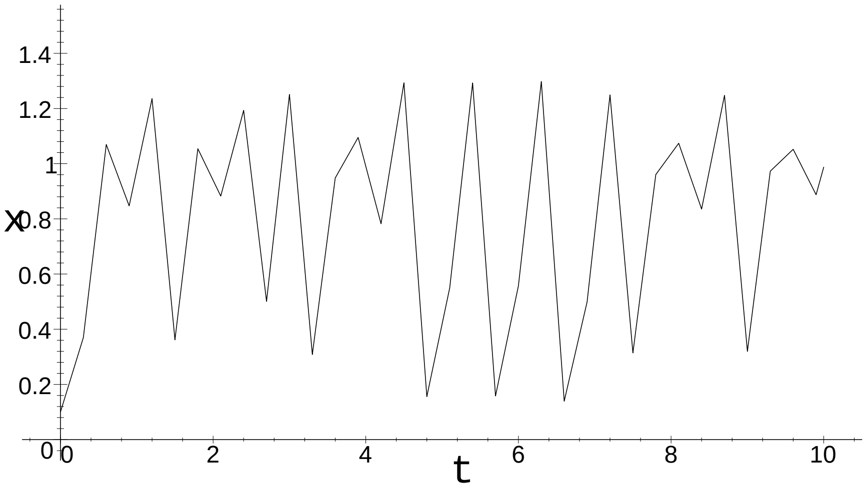

Abb. 10: Numerische Simulation der logistischen Gleichung mit $h = 0{,}3$

Es wird offensichtlich höchste Zeit, das Problem mathematisch zu untersuchen.

Der allgemeine Ansatz führt zur hier Differenzengleichung

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{h} = \lambda \cdot x_n \cdot (M - x_n)\,,$$

und Auflösen nach x_{n+1} ergibt

$$x_{n+1} = x_n + \lambda \cdot x_n \cdot (M - x_n) \cdot h = \lambda \cdot h \cdot x_n \cdot \left(M + \tfrac{1}{\lambda \cdot h} - x_n\right).$$

Eine solche Beziehung zwischen x_{n+1} und x_n heißt *diskretes dynamisches System;* wir wollen in diesem Abschnitt sehen, was sich über ein solches System aussagen läßt.

Bevor wir mit der Rechnung beginnen, empfiehlt es sich allerdings, die Gleichung etwas zu vereinfachen und insbesondere die vielen darin auftretenden Konstanten auf ein überschaubares Maß zu reduzieren. Mit etwas Probieren findet man, daß dies gut möglich ist, wenn man anstelle von x_n den dazu proportionalen Wert

$$y_n = \frac{x_n}{M + \frac{1}{\lambda \cdot h}}$$

betrachtet, aus dem sich umgekehrt x_n jederzeit wieder mittels der Formel

$$x_n = y_n \cdot \left(M + \tfrac{1}{\lambda \cdot h}\right)$$

zurückgewinnen läßt. Für y_n wird die obige Gleichung zu

$$\begin{aligned} y_{n+1} = \frac{x_{n+1}}{M + \frac{1}{\lambda \cdot h}} &= \lambda \cdot h \cdot x_n \cdot \left(1 - \frac{x_n}{M + \frac{1}{\lambda \cdot h}}\right) \\ &= \lambda \cdot h \cdot \left(M + \tfrac{1}{\lambda \cdot h}\right) \cdot y_n \cdot (1 - y_n)\,, \end{aligned}$$

d.h. also zu

$$y_{n+1} = a \cdot y_n \cdot (1 - y_n)$$

mit

$$a = \lambda \cdot h \cdot \left(M + \tfrac{1}{\lambda \cdot h}\right) = 1 + h\lambda M\,.$$

Insbesondere ist damit $a \geq 1$. Der Maximalwert M für $x(t)$ entspricht der Schranke

$$\frac{M}{M + \frac{1}{\lambda \cdot h}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{\lambda \cdot h \cdot M}} = \frac{\lambda \cdot h \cdot M}{1 + \lambda \cdot h \cdot M} = \frac{a-1}{a} = 1 - \frac{1}{a}\,,$$

falls das Verfahren eine vernünftige Lösung liefert, muß also

$$\lim_{n \to \infty} y_n = 1 - \frac{1}{a}$$

sein.

Was tatsächlich herauskommt, läßt sich natürlich leicht numerisch berechnen: Da die zu iterierende Gleichung sehr einfach ist, schadet es nicht, sie etwas länger als unbedingt notwendig zu iterieren: In Abbildung 11 sind für a zwischen 2,9 und vier die Werte y_{1001} bis y_{3000} aufgetragen. a-Werte zwischen 1 und 3 führen jeweils auf einen eindeutigen Grenzwert, so daß ich auf die Darstellung der Werte bis 2,9 verzichtet habe. Die Darstellung endet bei $a = 4$, da man sich leicht überlegt, daß für $a > 4$ die y_n für fast jeden Anfangswert y_0 gegen minus Unendlich konvergieren – was natürlich unter dem Gesichtspunkt einer numerischen Lösung der Differentialgleichung eine Katastrophe ist.

Leider gibt es aber auch schon für $a \leq 4$ einige katastrophale Ergebnisse: Nur für $a \leq 3$ konvergiert die Iteration gegen einen Grenzwert, danach oszilliert sie zwischen mehreren Werten hin und her oder wird gar völlig chaotisch. Für $a > 3$ oder, da

$$h = \frac{a-1}{\lambda M}$$

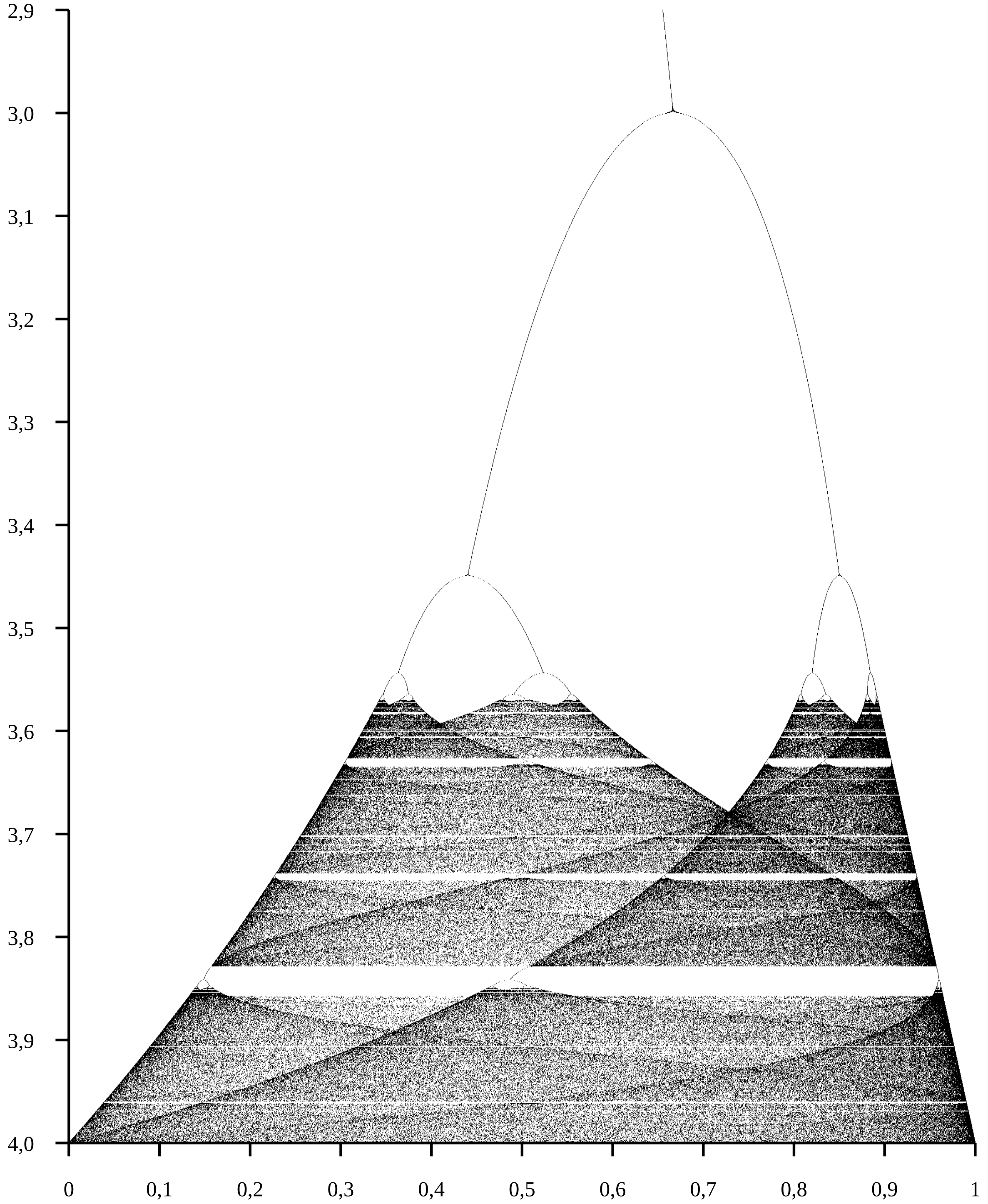

Abb. 11: Numerische Simulation der diskreten logistischen Gleichung

ist, $h > 2/\lambda M$ ist die numerische Lösung daher unbrauchbar. Für $\lambda = 10$ und $M = 1$ etwa muß also $h \leq 0{,}2$ sein; was danach passiert zeigen die obigen Beispiele.[3)]

Man könnte hoffen, daß es sich hier um eine spezielle unangenehme Eigenschaft des EULER-Verfahrens handelt, die bei den praktisch bedeutenden Verfahren wie etwa RUNGE-KUTTA keine Rolle spielt, aber leider zeigt eine numerische Simulation nach dem RUNGE-KUTTA-Verfahren vierter Ordnung mit $h = 0{,}3$ in Abbildung 12 ein noch schlimmeres Verhalten: Hier *konvergiert* die Iteration gegen einen festen Grenzwert, aber dieser hat *nichts* mit dem Grenzwert 1 zu tun, gegen den sie konvergieren sollte!

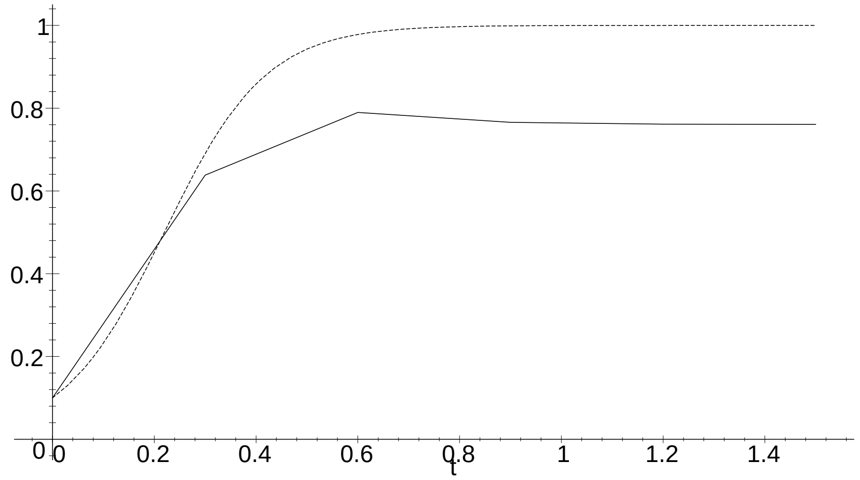

Abb. 12: Runge-Kutta-Verfahren mit h = 0,3 und korrekte Lösung (gestrichelt)

Während man beim zyklischen Hin- und Herschwingen der x_n ziemlich sicher sein kann, daß es Probleme mit dem numerischen Verfahren gibt, kommt hier die falsche Lösung ohne jede Warnung! Erst für größere Werte von h beginnen die Bifurkationen und das Chaos, die zur Vorsicht mahnen.[4)]

---

3) Für weitere Beispiele siehe das *Maple worksheet* zu diesem Vortrag oder die von Mathematikern der University of Arizona in Tuscon zusammengestellte Diashow; beides ist auf via `ftp` abrufbar auf `hilbert.math.uni-mannheim.de`.

4) Das Abbildung 11 entsprechende Bild zum RUNGE-KUTTA-Verfahren ist in der erwähnten Diaschau aus Tuscon zu finden.

3. Grenzen numerischer Simulation

Im letzten Paragraphen haben wir gesehen, daß gewisse numerische Simulationen problematisch sein *können;* in diesem Paragraphen soll es darum gehen, daß bei gewissen Differentialgleichungen *jede* numerische Simulation problematisch sein *muß.*

a) **Instabilität:** Im Zusammenhang mit Differentialgleichungen gibt es eine ganze Reihe von Stabilitätsbegriffen, und die *Instabilität* im Sinne eines jeden dieser Begriffe kann – je nach Anwendung – zu Problemen führen.

Die Stabilität und die asymptotische Stabilität von Lösungen einer Differentialgleichung wurden bereits im ersten Vortrag [Po] ausführlich diskutiert; es ist klar, daß das Fehlen einer dieser Eigenschaften zu Problemen bei der numerischen Simulation führen kann: Dort ist es praktisch unmöglich, während der gesamten Simulation auf der Lösungskurve für genau die vorgegebene Anfangsbedingung zu bleiben, denn durch allfällige Rundungsfehler kann man fast sicher sein, im Laufe der Zeit auf eine (im gerade betrachteten Punkt) benachbarte Lösungskurve zu geraten, bei Instabilität werden also die numerisch berechneten Werte fast sicher beträchtlich von der korrekten Lösung abweichen und bei asymptotischer Instabilität wird das berechnete Langzeitverhalten falsch sein.

Dies muß allerdings nicht unbedingt ein Problem sein: Ein typisches Beispiel für Instabilität ist etwa die Differentialgleichung

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

für die Exponentialfunktion

$$x(t) = x_0 e^{t-t_0} .$$

Wird hier x_0 durch $x_0 + \varepsilon$ ersetzt, so wird $x(t)$ ersetzt durch $x(t) + \varepsilon e^{t-t_0}$, wobei die Differenz εe^{t-t_0} mit wachsendem t natürlich „über alle Grenzen" wächst. Trotzdem muß dies aus der Sicht des Anwenders, der die numerische Simulation durchführt, nicht unbedingt schlimm sein, denn $x_0 e^{t-t_0}$ steigt ja genauso schnell, so daß der *relative Fehler*

$$\frac{\varepsilon e^{(t-t_0)}}{x_0 e^{(t-t_0)}} = \frac{\varepsilon}{x_0}$$

und damit die Anzahl der geltenden Ziffern konstant bleibt. Da es bei Meßgenauigkeiten meist um relative Fehler geht, heißt *Instabilität* in diesem

Beispiel nur, daß aus einer nicht meßbaren Schwankung einer kleinen Zahl eine nicht meßbare Schwankung einer großen Zahl wird – damit kann ein Anwender leben.

Auf den ersten Blick schlimmer ist die Situation beim überexponentiellen Wachstum, das etwa durch das Anfangswertproblem

$$\dot{x} = x^2, \quad x(0) = x_0 > 0$$

modelliert werden kann. Die Lösung

$$x(t) = \frac{x_0}{1 - x_0 t} \quad \text{für } t < \frac{1}{x_0}$$

wird kurz vor dem Wert $t = \frac{1}{x_0}$ natürlich extrem abhängig von Schwankungen des Anfangswerts x_0: Nicht nur kann auch der relative Fehler beliebig groß werden, selbst die Frage, ob es für einen gegebenen Wert t überhaupt noch einen Funktionswert gibt, kann durch Rundungsfehler falsch beantwortet werden.

Trotzdem bleibt aber die wesentliche Information, daß nämlich die Lösung zu einem endlichen Zeitpunkt unendlich wird, erhalten, und auch der Zeitpunkt dafür läßt sich einigermaßen genau berechnen. So ist also zwar die Frage nach dem exakten Lösungswert zum Zeitpunkt $t = \frac{1}{x_0} - \varepsilon$ aufgrund der Instabilität nicht sinnvoll beantwortbar, aber das Ergebnis wird dadurch nicht völlig unbrauchbar.

Ein extremes Beispiel für Instabilität ist TURINGS Theorie der *Morphogenese* [Tu2]: Hier erklärt er das Entstehen von Strukturen daraus, daß kleinste Inhomogenitäten in der Konzentration von Chemikalien zu qualitativen Unterschieden verstärkt werden, die dann beispielsweise zu den Flecken einer Kuh führen sollen. Bei diesen Reaktions-Diffusionsgleichungen ist natürlich eine auf *Zahlenwerte* fixierte numerische Simulation fast hoffnungslos, aber die grundsätzliche Art der entstehenden Strukturen kann trotzdem ein akzeptables Modell der Wirklichkeit sein.

Instabilitäten machen also eine numerische Simulation nicht nutzlos, sie schränken nur die Art von Fragen ein, auf die man eine sinnvolle Antwort erwarten kann.

Genau das gleiche gilt auch für den nächsten Stabilitätsbegriff, den der *strukturellen Stabilität.* Eine Differentialgleichung

$$\dot{x} = F(x) \quad \text{mit differenzierbarem} \quad F\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$$

heißt *strukturell stabil,* wenn sich ihr Vektorfeld unter kleinen Störungen von F nicht wesentlich ändert. Unter einer *Störung* verstehen wir dabei eine differenzierbare Funktion $G\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, die außerhalb einer gewissen kompakten Teilmenge $K \subset \mathbb{R}^n$ verschwindet; sie heißt *klein,* wenn es ein $\varepsilon > 0$ gibt, so daß sowohl G als auch seine partiellen Ableitungen nach den Koordinaten des $\mathbb{R}^n$ überall betragsmäßig kleiner als ε sind. Für hinreichend kleine ε soll es dann für jede solche Störung G eine bijektive stetige Abbildung $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ mit stetiger Umkehrabbildung ψ geben, so daß

$$F + G = \psi \circ F \circ \varphi$$

ist, oder, in technischer Sprache ausgedrückt: Das gestörte Vektorfeld ist *topologisch konjugiert* zum ursprünglichen.

Von einer sinnvollen Modellierung eines Anwendungsproblems wird man im allgemeinen fordern, daß die gewählte Differentialgleichung strukturell stabil ist, denn meist wird ja auch die rechte Seite F noch von Parametern abhängen, die nur über (ungenaue) Messungen bestimmt werden können. Im Falle struktureller Instabilität kann man nicht einmal mehr sicher sein, daß die wesentlichen *qualitativen* Eigenschaften der Lösung unter kleinen Abänderungen dieser Parameter erhalten bleiben, das Ergebnis einer jeden numerischen Simulation muß also höchst dubios sein.

Ein Beispiel, in dem es nicht nur um die Störung von Parametern geht, bietet die logistische Gleichung

$$\dot{x} = \lambda x(M - x)\,.$$

Das Ziel dieser Gleichung, einen Wachstumsprozeß zu beschreiben, bei dem die Wachstumsrate mit der Annäherung an eine Sättigungsgrenze auf Null sinkt, kann beispielsweise auch durch

$$\dot{x} = \lambda \sin \frac{\pi x}{M}$$

erreicht werden oder durch eine ganze Reihe anderer Funktionen. (In [RS] sind acht Alternativen zum logistischen Wachstum angegeben und jeweils mit konkreten experimentellen Daten verglichen.) Die sehr gute strukturelle Stabilität der logistischen Gleichung sorgt aber dafür, daß die Ergebnisse jeweils sehr ähnlich sind, und wenn auch mal das eine, mal das andere Modell etwas besser paßt, kann man doch anhand experimenteller Daten kaum zwischen den einzelnen Ansätzen unterscheiden – sicherlich mit ein Grund dafür, daß meist die logistische Gleichung als (auf dem Niveau der Differentialgleichungen) einfachster Vertreter dieser Klasse von Dynamiken betrachtet wird.

Viele in der Praxis auftretende nichtlineare Differentialgleichungen sind allerdings *nicht* strukturell stabil und beschreiben trotzdem recht gut das physikalische Problem, für dessen Modellierung sie aufgestellt wurden. Wir sollten daher auch hier wieder das ganze nicht zu eng sehen: Wie schon oben erwähnt, geht es nicht darum, eine Lösung in Bausch und Bogen zu verdammen, sondern es geht darum, die richtigen Fragen zu stellen, d.h. nur nach solchen Eigenschaften der Lösung zu fragen, die (bezüglich einer offensichtlichen Anpassung der Definition) strukturell stabil sind.

***b)* Chaos:** Bei der logistischen Gleichung in §2e) haben wir gesehen, daß Chaos gelegentlich einfach die Folge eines schlecht gewählten numerischen Verfahrens sein kann. Daneben gibt es aber auch Differentialgleichungen, bei denen auch die „echten“ Lösungskurven chaotisches Verhalten zeigen.

Obwohl seit einigen Jahren soviel von Chaos die Rede ist, gibt es noch keine allgemein anerkannte exakte Definition dieses Begriffs; relativ weit anerkannt ist aber die vage Definition, daß sich ein System chaotisch verhält, wenn selbst kleinste Änderungen der Anfangsbedingungen zu großen Auswirkungen auf das Langzeitverhalten führen – in diesem Sinne ist also Chaos das extreme Gegenstück zur asymptotischen Stabilität. Man kann diese vage Definition auch exakter machen, indem man etwa den Verlust an geltenden Ziffern pro Zeiteinheit in geeigneter Weise wohldefiniert macht (dies ist die sogenannte *topologische Entropie* des Systems), und von Chaos spricht, sobald dieser Wert echt positiv ist.

An dieser Definition sieht man unmittelbar, warum Chaos ein Problem für numerische Simulationen sein *muß,* da diese ja stets mit einer festen, beschränkten Anzahl von geltenden Ziffern starten müssen und spätestens dann nur noch Unsinn liefern, wenn diese Ziffern „aufgebraucht“ sind.

Als das wohl bekannteste Beispiel eines chaotischen Systems betrachten wir die Gleichungen

$$\begin{aligned}\dot{x} &= p(y-x)\\ \dot{y} &= rx - y - xz\ ,\\ \dot{z} &= -bz + xy\end{aligned}$$

die der Meteorologe EDWARD LORENZ 1963 in [Lo1] als extreme Vereinfachung der NAVIER-STOKES-Gleichungen für den Fall der atmosphärischen Konvektion aufstellte und für die Parameterwerte

$$p = 10, \quad r = 28 \quad \text{und} \quad b = 8/3$$

numerisch untersuchte.[5)]

In Abbildung 13 sind zwei Lösungskurven $x(t)$ dieser Gleichung zu sehen, beide berechnet nach dem RUNGE-KUTTA-Verfahren mit Schrittweite 0,1. Die durchgezogene Kurve gehört zu den Anfangsbedingungen

$$x(0) = y(0) = z(0) = 5\,,$$

die gestrichelte zu

$$x(0) = 5{,}0001, \quad y(0) = z(0) = 5\,.$$

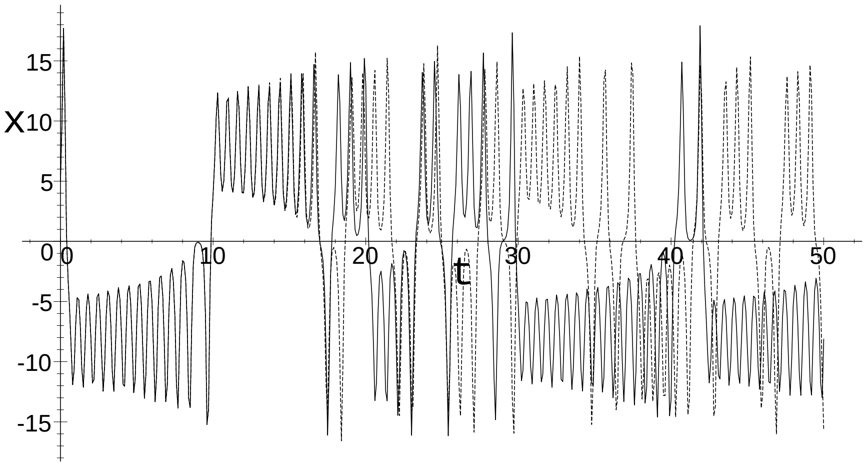

Abb. 13: Zwei benachbarte Lösungen $x(t)$ der Lorenz-Gleichungen

Obwohl sich die Anfangsbedingungen nur in der vierten Dezimalstelle unterscheiden, haben die beiden Kurven spätestens ab etwa $t = 18$ nichts mehr miteinander zu tun – eine kleine Ungenauigkeit bei einer der Anfangsbedingungen führt also bereits zu einer völlig anderen Lösung. Erhöhung der Genauigkeit hilft nicht viel: In Abbildung 14 ist zu sehen, was passiert, wenn man für die gestrichelten Kurve erst die achte statt der vierten Nachkommastelle abändert und $x(0) = 5{,}00000001$ setzt: Die Verdopplung der Stellenzahl führte gerade mal dazu, daß die Lösungen jetzt bis etwa $t = 27$ übereinstimmen; ab $t = 28$ gehen sie definitiv völlig verschiedene Wege.

In einer numerischen Simulation rechnet man zwangsläufig mit beschränkter Stellenzahl, so daß in jedem Rechenschritt die dann gerade aktuellen

5) Für eine ausführlichere Ableitung und Erklärung dieser Gleichungen und ihrer Parameter siehe etwa [Hi], §1.5 und Anhang *C*.

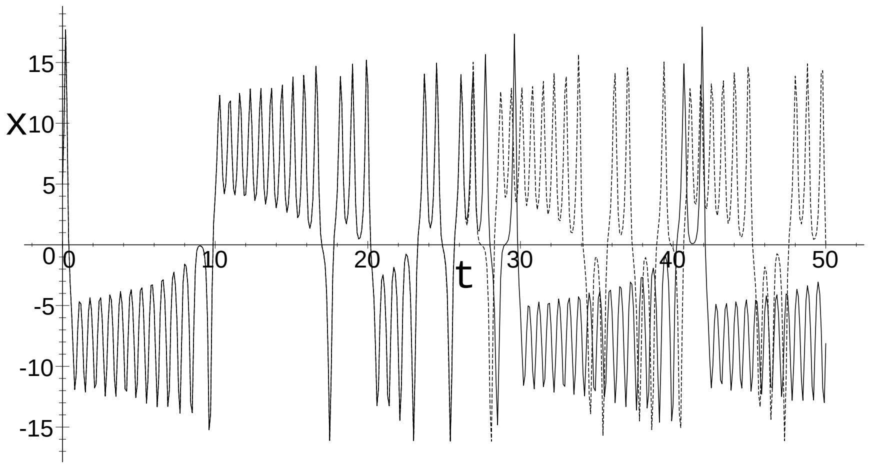

Abb. 14: Zwei benachbartere Lösungen $x(t)$ der Lorenz-Gleichungen

Anfangsbedingungen gerundet werden *müssen.* Bei einem chaotischen System wie dem LORENZ-System bedeutet dies, daß allein schon dadurch das Langzeitverhalten der Lösungskurven völlig verändert wird, so daß Lösungswerte für große t-Werte praktisch immer falsch sein *müssen.* Auch bei dem häufig zu sehenden *Attraktor* des LORENZ-Systems kann man fast sicher sein, daß er keine Lösungskurve des Systems beschreibt, sondern aufgrund von Rechenfehlern zumindest im hinteren Teil wohl ausschließlich aus falschen Werten besteht. Nur die Attraktor-Eigenschaft sorgt dafür, daß dieses aus falschen Werten zusammengesetzte Bild trotzdem qualitativ einigermaßen richtig ist.

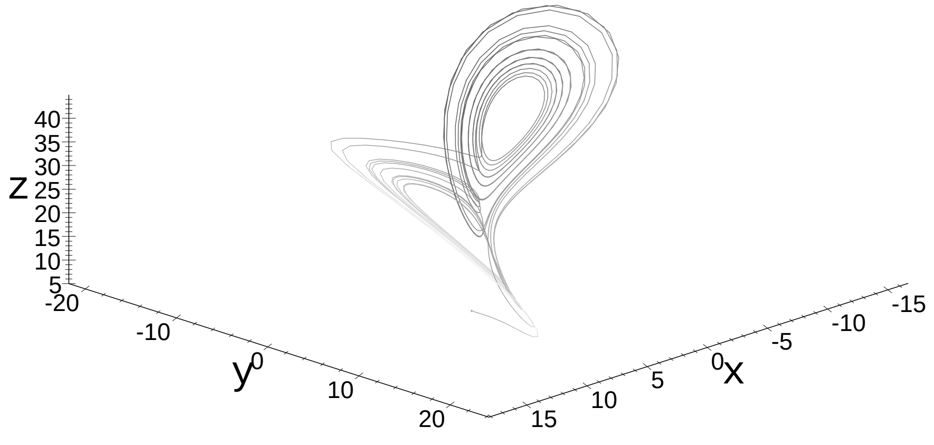

Abb. 15: Simulation einer dreidimensionalen Lösungskurve der Lorenz-Gleichungen

LORENZ mußte dieses Verhalten der Lösungen auf die harte Weise lernen:

Er fand zu seinem großen Erstaunen, daß sich seine Ergebnisse nicht reproduzieren ließen, wenn er Zwischenergebnisse für Kontrollrechnungen nur in gerundeter Form eintippte: Der geringe Rundungsfehler bei der Eingabe des Startwerts reichte bereits aus, um das Langzeitverhalten des Systems grundlegend zu verändern.

Falls das gleiche Phänomen auch in der wirklichen Atmosphäre auftritt, können also minimale Veränderungen etwa des Luftdrucks oder der Temperatur auf längere Sicht zu einer völlig anderen Entwicklung des Wetters führen – eine Idee, die vielen Meteorologen damals als zu phantastisch erschien um ernstgenommen zu werden: Als Lorenz am 22. Januar 1963 seine Ergebnisse vor der New York Academy of Sciences vortrug [Lo2], schloß er seinen Vortrag mit den Worten:

Als die Instabilität eines gleichförmigen Flusses gegenüber infinitesimalen Störungen erstmals als eine Erklärung für das Auftreten von Zyklonen und Antizyklonen in der Atmosphäre vorgeschlagen wurde, wurde diese Idee nicht allgemein akzeptiert. Ein Meteorologe bemerkte, daß, falls die Theorie korrekt wäre, ein Flügelschlag einer Möwe ausreichte, um die Entwicklung des Wetters für immer zu verändern. Die Kontroverse ist noch nicht entschieden, aber die neueste Evidenz scheint für die Möwen zu sprechen.

Inzwischen ist der Sieg der Möwen bekanntlich allgemein anerkannt; man fordert sogar nicht einmal mehr den relativ kräftigen Flügelschlag einer Möwe, um das Wetter permanent zu verändern: Im Dezember 1972 hielt Lorenz vor der American Association for the Advancement of Sciences in Washington, DC, einen Vortrag mit dem Titel „Predictability: Does the Flap of a Butterfly's Wings in Brazil set off a Tornado in Texas“, und seitdem geht das Wort vom *Schmetterlingseffekt* um die Welt (*vgl.* [Hi], *Seite 40*).

Da wir gerade mitten in einer historischen Abschweifung sind, lohnt es sich vielleicht, gleich noch etwas weiter auszuholen, um zu sehen, warum sich die Einsicht in die prinzipiellen Grenzen, die ein Phänomen wie Chaos jeder Art von (nicht nur numerischer) Simulationen und Voraussagbarkeit setzt, erst sehr langsam durchsetzte:

Im achtzehnten Jahrhundert, das so extreme Fortschritte in der mathematischen Modellierung von Naturgesetzen gesehen hatte, wurde die Welt oft mit einem Uhrwerk verglichen, das von Gott, dem großen Uhrmacher, geschaffen war und völlig gesetzmäßig ablief. Eine typische Stimme aus jener Zeit ist die oft zitierte Äußerung des französischen Mathematikers Pierre Simon Laplace aus seiner 1795 gehaltenen Antrittsvorlesung vor den *Ecoles normales* in Paris; sie wurde später auch abgedruckt als Einleitung seines Buchs [La]:

Wir können also den gegenwärtigen Zustand des Universums als Wirkung seines vorherigen Zustands betrachten und als Ursache dessen, der folgen wird. Eine Intelligenz, die für einem gegebenen Zeitpunkt alle in der Natur wirkenden Kräfte und die Lage aller Dinge, aus der die Welt besteht, kennen würde, und die außerdem so umfassend wäre, daß sie diese Daten einer Analyse unterziehen könnte, würde in derselben Formel die Bewegung der größten Körper des Universums und der leichtesten Atome erfassen: Nichts wäre ihr ungewiß, die Zukunft wie die Vergangenheit wären ihren Augen gegenwärtig.

Etwa hundert Jahre später war der Traum zu Ende: Der französische Mathematiker Henri Poincaré ([P1], [P2]) zeigte mit seinen Arbeiten über die Stabilität des Sonnensystems, daß diese Auffassung viel zu optimistisch ist: Er konnte zeigen, daß es Systeme gibt, in denen zwei beliebig nahe beieinander liegende Anfangszustände zu völlig verschiedenem Langzeitverhalten führen können; in der hier eingeführten Terminologie ausgedrückt zeigte er also, daß es chaotische Lösungen gibt. Insbesondere zeigte er, daß dies bereits für das eingeschränkte Dreikörperproblem gilt, d.h. für ein stark vereinfachtes Modell des Sonnensystems. (Eine Übersicht über Poincarés diesbezügliche Ergebnisse ist in [Ho] zu finden.)

Poincarés Arbeiten fanden große Beachtung innerhalb der Mathematik; für [P1] etwa bekam er einen Preis des schwedischen Königs Oscar II, und auch nach Poincaré ging die Entwicklung kontinuierlich weiter; sie wurde allerdings von den angewandten Wissenschaften weitgehend ignoriert. Ein Grund dafür war sicherlich, daß die von Poincaré postulierte Chaotizität des Sonnensystems keinerlei Einfluß auf dessen Vorhersagbarkeit zu haben schien: Die altbekannten astronomischen Rechenverfahren lieferten weiterhin ausgezeichnete übereinstimmung mit den Beobachtungen, von „Chaos“ war weit und breit nichts zu sehen.[6]

In der Meteorologie jedoch gab es damals wie heute große Probleme mit der Vorhersagbarkeit; deshalb ist vielleicht verständlich, daß erst die Ergebnisse von Lorenz in den sechziger Jahren unseres Jahrhunderts das Problem auch den angewandten Wissenschaftlern bewußt machten. Tatsächlich dauerte es noch bis etwa Mitte der achtziger Jahre, bis diese zunächst

[6] Den Grund dafür fanden über fünfzig Jahre später, zwischen 1954 und 1962, Kolmogorow, Arnol'd und Moser mit der inzwischen nach ihren Anfangsbuchstaben benannten KAM-Theorie ([GH], §4.8): Danach sind auch in gewissen chaotischen Systemen stabile Bahnen nicht nur möglich, sondern sogar vorherrschend – ein Beispiel für die oft zu findende Ordnung im Chaos.

hauptsächlich in meteorologischen Fachzeitschriften veröffentlichten Ergebnisse auch von Vertretern anderer Fachrichtungen zur Kenntnis genommen wurden und jedermann klarmachten, daß – selbst in einer rein NEWTONschen Mechanik – auch für die von LAPLACE betrachtete Intelligenz die Zukunft höchstens dann gewiß wäre, wenn ihr der gegenwärtige Zustand des Universums mit *unendlicher* Genauigkeit bekannt wäre, was für eine endliche Intelligenz natürlich ausgeschlossen ist.

Dreihundert Jahre nachdem NEWTON der *Royal Society* den ersten Band seiner *Principia* vorgelegt hatte, die für die meisten Physiker – wenn auch nicht unbedingt für NEWTON selbst – die Grundlage ihres deterministischen Weltbilds waren, organisierte dieselbe *Royal Society* 1986 eine Tagung über Vorhersagbarkeit in Wissenschaft und Gesellschaft, auf der SIR JAMES LIGHTHILL, F.R.S., als Präsident der Internationalen Vereinigung für theoretische und angewandte Mechanik die neue Situation wie folgt zusammenfaßte [Li]:

Wir sind uns heute alle zutiefst bewußt, daß der Enthusiasmus unserer Vorgänger für die wunderbaren Leistungen der Newtonschen Mechanik diese zu Verallgemeinerungen im Bereich der Vorhersagbarkeit geführt haben, die wir zwar vor 1960 alle mehr oder weniger glaubten, die wir nun aber als falsch erkannt haben. Wir möchten uns gemeinsam dafür entschuldigen, daß wir das allgemeine gebildete Publikum in die Irre führten durch die Verbreitung von Ideen über die Determiniertheit von Systemen, die die Newtonschen Bewegungsgleichungen erfüllen; Ideen, die sich nach 1960 als falsch herausstellten.

An solche Worte sollte man denken, wenn man angesichts der ständig steigenden Leistungen von Computern in der Simulation zu sehr vom Optimismus übermannt wird.

***c)* Unentscheidbarkeitsprobleme bei Differentialgleichungen:** Numerische Simulationen sind selbstverständlich nicht das einzige Werkzeug der Mathematik zum Umgang mit Differentialgleichungen; Analysis, Topologie, Geometrie und weitere Teilgebiete der Mathematik stellen eine Vielzahl von Methoden zur Verfügung, die sowohl mit als auch ohne numerische Simulation Aussagen über Lösungen von Differentialgleichungen machen können.

Von daher stellt sich die Frage, ob nicht vielleicht eine Kombination solcher Methoden auch bei chaotischen Systemen doch noch zu einer Vorhersage des Langzeitverhaltens führen kann.

Leider ist es *im allgemeinen* nicht möglich, zu entscheiden, welches Langzeitverhalten eine bestimmte Lösung einer Differentialgleichung hat – genausowenig wie es in vielen anderen Teilen der Mathematik möglich ist, *allgemein* zu entscheiden, welche Aussagen richtig und welche falsch sind.

Im vorigen Satz hängt natürlich alles an der Bedeutung des Wortes *allgemein;* erst wenn diese geklärt ist, wird der Satz zu einer vernünftigen Aussage.

Auch hierzu kann ein kurzer historischen Abriß nicht schaden:

1928, auf dem internationalen Mathematikerkongreß in Bologna, forderte der große deutsche Mathematiker DAVID HILBERT [H] die versammelten Mathematiker auf, nach einem von ihm entworfenen Programm ein mechanisches Verfahren zu finden, womit man *jede* Aussage der Zahlentheorie wie auch der Analysis als richtig oder falsch erkennen könne – in die Sprache unserer Zeit übersetzt ging es also um ein Computerprogramm, das eine solche Aussage als Eingabe bekommt und entscheidet, ob sie wahr oder falsch ist. Bereits 1931 zeigte KURT GÖDEL [Gö], daß es für die Zahlentheorie kein widerspruchsfreies (in [Gö] war diese Voraussetzung noch etwas stärker) endliches Axiomensystem geben kann, bezüglich dessen jede Aussage entweder wahr oder falsch ist, und 1936 zeigte ALAN TURING [Tu1], daß es nicht einmal ein endliches Entscheidungsverfahren gibt, das alle wahren und falschen Aussagen bezüglich eines *gegebenen* endlichen Axiomensystems als solche erkennt. Genauer gesagt definierte TURING einen abstrakten Computer (nach 1945 konstruierte er auch einen der ersten konkreten), der jede Berechnung ausführen kann, die irgendein beliebiger anderer konkreter oder abstrakter Computer durchführen kann. TURING zeigte, daß das Langzeitverhalten dieses heute als universelle TURING-Maschine bezeichneten Computers selbst bei genauer Kenntnis des Anfangszustands nicht vorhersehbar ist; beispielsweise kann man nicht einmal entscheiden, ob er bei der Verarbeitung eines gegebenen Satzes von Eingabedaten jemals anhält.

Vor etwa fünf Jahren zeigte dann der amerikanische Physiker CHRISTOPHER MOORE [Mo1, Mo2], daß es zu jeder TURING-Maschine eine Differentialgleichung

$$\dot{x} = F(x)$$

in $\mathbb{R}^3$ gibt, bei der das Langzeitverhalten der Lösungen in Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen *genau* dem Langzeitverhalten dieser TURING-Maschine in Abhängigkeit von ihrem Anfangszustand entspricht. Im Falle der universellen TURING-Maschine ist somit selbst bei *genauer* Kenntnis der Anfangsbedingungen das Langzeitverhalten der Lösungen von $\dot{x} = F(x)$

in Abhängigkeit von der Anfangsbedingung nicht vorhersagbar ist – denn sonst hätte man auch die von TURING als unlösbar erkannten Probleme gelöst.

Was auch immer man unter Chaos verstehen möchte: Eine solche Differentialgleichung, die eine universelle TURING-Maschine modelliert, zeigt auf jeden Fall ein extrem chaotisches Verhalten, und keine numerische Simulation wird uns größere Einsichten in das Langzeitverhalten ihrer Lösungen geben. Trotzdem besteht kein Grund zu Pessimismus und Lethargie – eher im Gegenteil. Schließlich ist auch die Unentscheidbarkeit etwa der elementaren Zahlentheorie dank GÖDEL seit 65 Jahren bekannt, ohne daß dadurch irgendein Zahlentheoretiker in Depressionen verfallen wäre – im Gegenteil: Von den großen bekannten Problemen, die in der populärwissenschaftlichen Literatur immer wieder als mögliche Beispiele unentscheidbarer Probleme genannt werden, ist die FERMAT-Vermutung seit zwei Jahren bewiesen [W, W-T], zur GOLDBACH-Vermutung erscheinen immer neue asymptotische Abschätzungen, und bei der RIEMANN-Vermutung zeigen die vielen in den letzten Jahren vorgelegten *falschen* Beweise deutlich, wie viele Mathematiker an diesem Problem arbeiten.

In der Tat wäre es aus der Sicht eines Mathematikers geradezu eine Katastrophe, wenn es *keine* Unentscheidbarkeitssätze gäbe, denn dann könnte *im Prinzip* jedes mathematische Problem von einem Computer gelöst werden, und sobald ein entsprechendes Programm existierte und die Computer genügend leistungsfähig wären, wären die Mathematiker eigentlich überflüssig geworden.[7)]

4. Alternativen und Ergänzungen zur numerischen Simulation

Trotz aller Gegenbeispiele in §2 und aller negativer Ergebnisse in §3 sind sinnvoll angewendete numerische Simulationen in vielen Fällen die beste und genaueste Möglichkeit um das Verhalten einer Lösung zu studieren. Sie sind aber bei weitem nicht das *einzige* Werkzeug, das die Mathematik anzubieten hat: Analysis, Geometrie, Topologie, Algebra, Numerik und andere Teilgebiete stellen eine Vielzahl von Methoden zur Verfügung, um

---

7) Tatsächlich gäbe es selbst dann noch eine „Rettung“ für die Mathematik, denn wenn die *Komplexität* eines Algorithmus hinreichend hoch ist, wird er sich nie auf hinreichend nichttriviale Probleme anwenden lassen. So ist beispielsweise nach TARSKI [SST] die klassische EUKLIDische Geometrie zwar entscheidbar, aber jeder Entscheidungsalgorithmus hat zumindest für gewisse Probleme mindestens doppeltexponentielle Komplexität, d.h. seine Laufzeit bei einer aus n Zeichen bestehenden Eingabe bewegt sich mindestens in der Größenordnung von 2^{2^n}, was sehr schnell die Grenzen selbst des leistungsfähigsten Computers übersteigt.

die Lösungen einer gegebenen Differentialgleichung zu studieren. Natürlich kann nach dem Ergebnis des letzten Abschnitts weder eine einzelne dieser Methoden noch ihre Kombination in *allen* Fällen zum Erfolg führen, aber in vielen interessanten Fällen kann man eben doch interessante Ergebnisse beweisen.

So war es beispielsweise schon immer gute Praxis, vor einer längeren Rechnung zunächst eine Überschlagsrechnung zu machen. In den nächsten beiden Paragraphen werden wir mir der *qualitativen Theorie* und der *Linearisierung* die „Überschlagsrechnungen" kennenlernen, die uns die Analysis für Differentialgleichungen zur Verfügung stellt. In den weiteren Abschnitten geht es dann um eine kurze Diskussion einer ziemlich willkürlichen Auswahl weiterer Methoden; da diese wohl allesamt für die Behandlung im Unterricht zu kompliziert sind, wird es dort nur um wenig mehr als um kurz kommentierte Literaturhinweise gehen.

a) **Qualitative Theorie der Differentialgleichungen:** Egal wie komplex sich eine Lösung auch verhalten mag: Das Vektorfeld als „rechte Seite" der Differentialgleichung ist bekannt und sagt etwas darüber aus, wie sich die Lösungen in gewissen Teilregionen lokal verhalten müssen. Dies liefert einerseits eine Überprüfung für numerische Ergebnisse: So haben etwa die wild hin- und herschwankenden numerischen „Lösungen" von $\dot{x} = -\lambda x$ nach EULER oder MILNE-SIMPSON nach dem Überschreiten der t-Achse jeweils die entgegengesetzte Richtung zum Richtungsfeld der Differentialgleichung. Andererseits erlaubt die Betrachtung des Vektorfelds in einfachen Fällen gelegentlich sogar, das Langzeitverhalten der Lösungen zu bestimmen.

Ein beliebtes Beispiel dafür ist DARWINS „Kampf ums Dasein" *bzw.* das Prinzip von der „ökologischen Nische": Angenommen, zwei einander sehr ähnliche Arten leben im selben Lebensraum und ernähren sich von denselben Ressourcen. Wenn wir dann für jede der beiden Arten die in §2e) betrachtete logistische Gleichung ansetzen, müssen wir davon ausgehen, daß sich die beiden Arten gegenseitig den Platz wegnehmen: Falls also die erste Art, die zur Zeit t aus $x(t)$ Individuen bestehe, für sich allein in diesem Lebensraum eine maximale Population von M_x Individuen ernähren kann, während die zweite Art Bestand $y(t)$ und Maximalwert M_y hat, so sind die relevanten Gleichungen nun in erster Näherung

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \lambda \cdot x(M_x - x - y)\\ \dot{y} &= \lambda \cdot y(M_y - x - y)\,.\end{aligned}$$

Wir gehen also davon aus, daß sich die beiden Arten wirklich extrem ähnlich sind: Nicht nur nimmt ein Individuum der einen Art *genau* einem

Individuum der anderen Art den Platz weg, sondern auch die anfängliche Wachstumsrate λ, mit der die Populationen ansteigen, solange sie weit vom Maximum entfernt ist, sollen gleich sein. Lediglich die Maximalpopulationen seien verschieden: Nehmen wir etwa an, daß die erste Art die vorhandenen Ressourcen besser ausnützen, so daß $M_x > M_y$ ist.

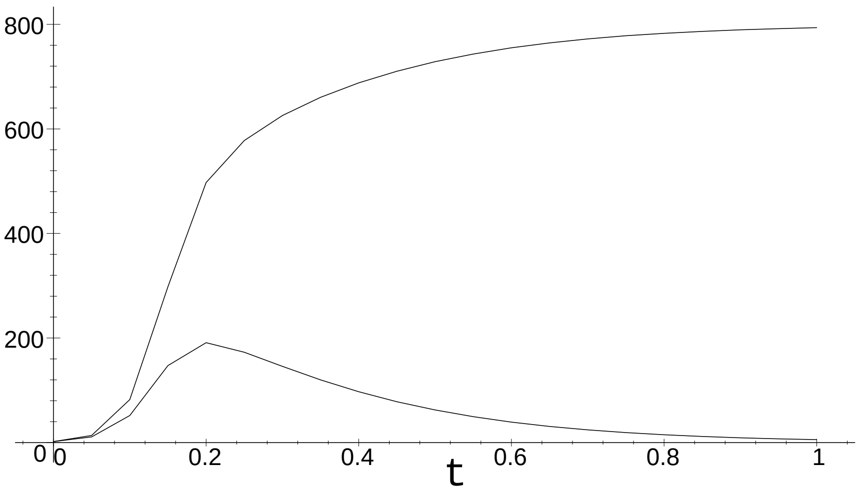

Abb. 16: Zwei konkurrierende Populationen

Eine numerische Simulation mit $\lambda = 0{,}05$ und den maximalen Populationsstärken $M_x = 800$ *bzw.* $M_y = 700$ zeigt bei den biblischen Anfangsbedingungen $x(0) = y(0) = 2$, daß $x(t)$ gegen sein Maximum M_x strebt, wohingegen $y(t)$ gegen Null geht; die weniger effiziente Art stirbt also aus.

Da wir in diesem Vortrag mehr Gegenbeispiele als Beispiele gesehen haben, fragen wir uns natürlich *(?)*, ob wir dieser Rechnung glauben können. Betrachten wir dazu das Vektorfeld der Differentialgleichung:

Unterhalb der durch $x + y = M_y$ gegebenen Geraden g_1 sind $\dot{x}$ und $\dot{y}$ beide positiv, d.h. beide Populationen wachen. Zwischen dieser Geraden und der dazu parallelen Geraden g_2 mit $x + y = M_x$ wird dann aber $\dot{y}$ negativ, wohingegen x weiter ansteigt – ein erster Hinweis darauf, daß diese Art wohl die erfolgreichere ist. Jenseits der Geraden g_2 schließlich ist die ökologische Nische überbesetzt, und beide Arten verlieren an Population.

Eine Lösungskurve, die nicht im Fixpunkt $(0,0)$ der (x,y)-Ebene startet, kann aufgrund dieser Überlegungen nicht unterhalb der Geraden g_1 bleiben, denn in diesem Bereich wachsen sowohl x als auch y. Sie muß also irgendwann in den Bereich zwischen g_1 und g_2 kommen. Dasselbe gilt aus analogen Gründen für eine Lösungskurve, die von oberhalb der Geraden g_2 kommt.

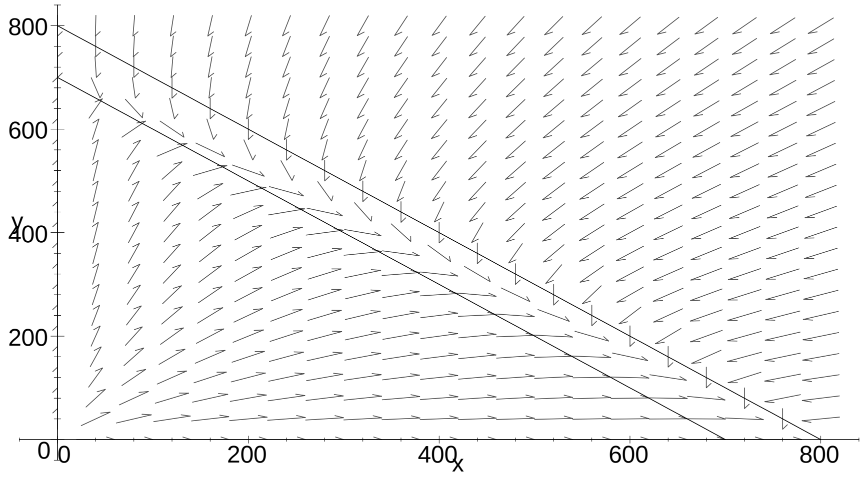

Abb. 17: Das Vektorfeld zum Kampf ums Dasein

Um das Langzeitverhalten der Lösungskurven zu verstehen muß man daher nur Kurven betrachten, die zwischen den Geraden g_1 und g_2 beginnen. Eine solche Kurve bleibt auch immer zwischen diesen beiden Geraden, denn auf g_1 ist $y(t)$ konstant, während $x(t)$ wächst, und auf g_3 ist $x(t)$ konstant, während $y(t)$ abnimmt: Auf beiden Randgeraden geht die Dynamik also ins Innere des Gebiets zwischen den beiden Geraden. Dort aber ist $\dot{x}(t)$ positiv und $\dot{y}(t)$ negativ; die Lösungskurve bewegt sich daher in Richtung auf den Randpunkt rechts unten. Da dieser abgesehen vom Randpunkt links oben der einzige Fixpunkt des Systems ist, muß daher jede Lösungskurve, für die irgendwann einmal sowohl $x(t)$ als auch $y(t)$ positiv sind, dort enden.

Damit ist gezeigt, daß die weniger effiziente Art ausstirbt (oder sich eine andere ökologische Nische suchen muß).

Gelegentlich kann man sogar noch mehr als nur das Langzeitverhalten des Systems bestimmen ohne die Gleichung zu lösen; das Standardbeispiel dafür sind die nichtlinearen Differentialgleichungen, die der amerikanische Biologe ALFRED JAMES LOTKA in den zwanziger Jahren untersuchte: Er betrachtete eine Population von Raubtieren, die sich von nur einer Art von Beutetieren ernähren; die Anzahl der Beutetiere zur Zeit t sei $x(t)$, die der Raubtiere $y(t)$. Hierbei sind $x(t)$ und $y(t)$ natürlich stets ganze Zahlen, wenn diese aber genügend groß sind, machen wir keinen großen Fehler, wenn wir $x(t)$ und $y(t)$ als kontinuierliche Funktionen der Zeit betrachten.

Wie sieht die Dynamik dieser Funktionen aus? Solange es für die Beutetiere genügend Platz und Nahrung gibt, vermehren sie sich mit einer konstanten Geburtenrate α; falls es keine Raubtiere gäbe, wäre also $x'(t) = \alpha x(t)$.

Die Raubtiere dagegen müßten, falls es keine Beutetiere gäbe, verhungern und damit langsam aber sicher aussterben; wenn wir auch hier von einer konstanten Sterberate γ ausgehen, wäre also $y'(t) = -\gamma y(t)$. Da es nun aber beide Populationen gibt, wird immer wieder ein Beutetier von einem Raubtier gefressen; die Häufigkeit dafür hängt von der Zahl der Begegnungen zwischen den beiden Arten ab und ist damit ungefähr proportional sowohl zu $x(t)$ als auch zu $y(t)$, also auch zum Produkt $x(t) \cdot y(t)$. Da jedes Fressen eines Beutetiers die Raubtierpopulation stärkt und die Beutetierpopulation verringert, erhalten wir somit ein System

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \quad \alpha \cdot x(t) - \beta \cdot x(t) \cdot y(t) \\ \dot{y}(t) &= -\gamma \cdot y(t) + \delta \cdot x(t) \cdot y(t) \end{aligned}$$

mit positiven Zahlen $\alpha, \beta, \gamma, \delta$.

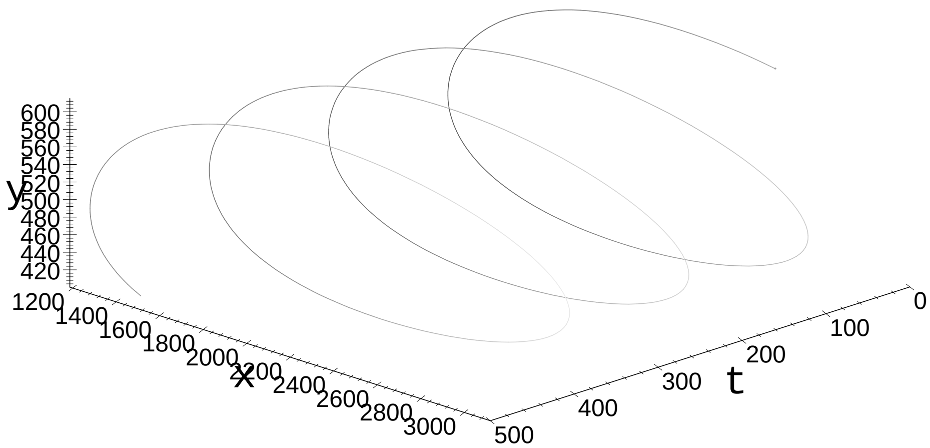

Abb. 18: Eine Lösungskurve des Raubtier/Beutetier-Systems

Die Lösungen dieses Systems sind nicht in geschlossener Form angebbar, wir können aber zumindest *zwei* Lösung ganz leicht angeben: Zunächst einmal gibt es die Lösung $x = y = 0$, die sowohl uninteressant als auch instabil ist. Daneben gibt es aber noch eine weitere konstante Lösung; da für eine solche $\dot{x} = \dot{y} = 0$ ist, können wir sie berechnen, indem wir die linken Seiten der Differentialgleichung auf Null setzen; dies führt zu $x = \gamma/\delta$ und $y = \alpha/\beta$.

Diese Lösung gibt an, bei welchen Populationsstärken ein ökologisches Gleichgewicht besteht; untersucht man allerdings die Stabilität dieser

Lösung, so findet man, daß sie weder stabil noch instabil im Sinne des ersten Vortrags ist: Eine Störung des Gleichgewichts bleibt permanent erhalten, das System schwingt ungedämpft um seinen Gleichgewichtspunkt. Dies sieht man am besten anhand der in die (x, y)-Ebene projizierten Lösungskurven, von der in Abbildung 19 einige eingezeichnet sind – natürlich aufgrund einer numerischen Simulation

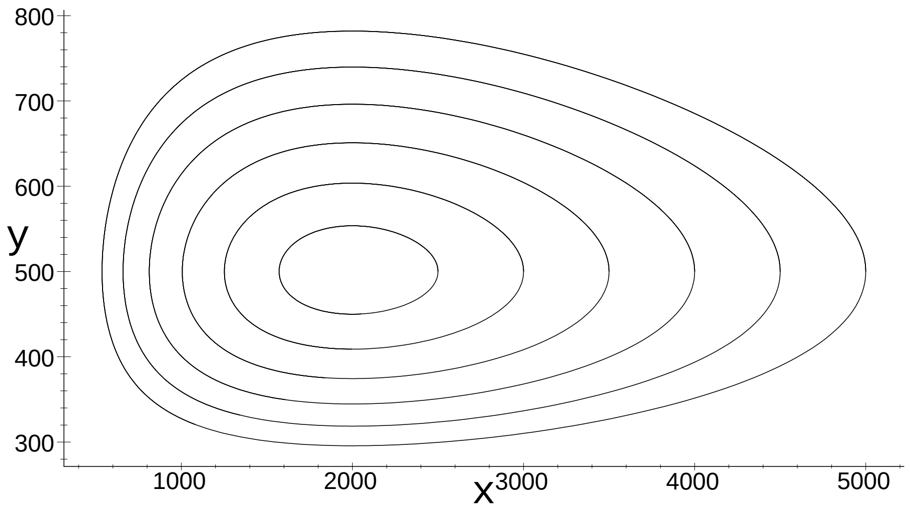

Abb. 19: Raubtiere und Beutetiere

Man kann sich leicht klarmachen, was der Umlauf auf so einer Lösungskurve biologisch bedeutet: Im jeweils untersten Punkt ist die Raubtierpopulation minimal, so daß sich die Beutetiere stark vermehren können; dadurch verbessert sich die Nahrungsgrundlage für die Raubtiere, was nun auch zu deren Vermehrung führt, so daß die Kurve auf ihren am weitesten rechts gelegenen Punkt zusteuert, in dem die Beutetiere ihre maximale Populationsstärke erreichen. Die gestiegene Raubtierpopulation frißt nun, nachdem sie ihren Gleichgewichtswert überschritten hat, mehr Beutetiere als nachwachsen, kann sich aber wegen der großen Anzahl vorhandener Beutetiere weiterhin vermehren auf ein Maximum hin, das am obersten Punkt der Lösungskurve erreicht ist. Danach reicht der bereits gesunkene Bestand an Beutetieren nicht mehr aus als Nahrungsgrundlage für die Raubtiere, ihre Population geht also zurück, reicht aber immer noch aus, um die Beutetiere weiter zu dezimieren. Im Punkt links außen hat deren Bestand schließlich sein Minimum erreicht; die weiterhin sinkende Raubtierpopulation frißt nun weniger Beutetiere als nachwachsen und leidet trotzdem weiter an Nahrungsmangel. Sobald sie ihr Minimum erreicht hat, schließt sich der Kreis, und der gleiche Zyklus beginnt wieder von vorne.

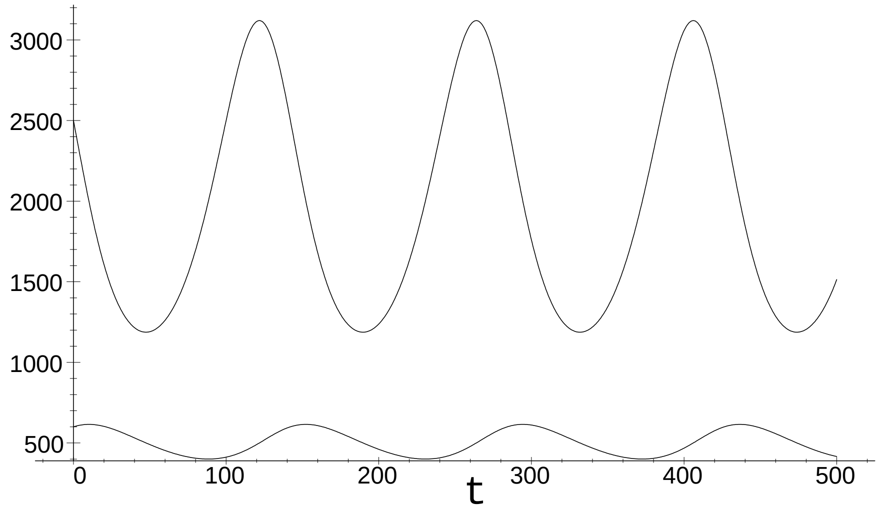

Abb. 20: Zeitliche Entwicklung der beiden Populationen

Wieder sollten wir uns fragen, ob diese numerisch berechneten periodischen Kurven tatsächlich Lösung der Differentialgleichung sind. Dazu eliminieren wir die unabhängige Variable t und betrachten y als Funktion von x. Dann ist

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\dot{y}}{\dot{x}} = \frac{-\gamma \cdot y + \delta \cdot x \cdot y}{\alpha \cdot x - \beta \cdot x \cdot y} = \frac{y}{x} \cdot \frac{\delta x - \gamma}{\alpha - \beta y},$$

d.h.

$$\int \left(\frac{\alpha}{y} - \beta\right) \cdot y'(x)\, dx = \int \left(\delta - \frac{\gamma}{x}\right) dx$$

oder

$$\int \left(\frac{\alpha}{y} - \beta\right) dy = \int \left(\delta - \frac{\gamma}{x}\right) dx\,.$$

Integration führt auf

$$\alpha \ln y - \beta y = \delta x - \gamma \ln x + C$$

mit einer geeigneten Intergrationskonstanten C; Exponentiation macht daraus

$$\frac{y^\alpha}{e^{\beta y}} = \frac{e^{\delta x}}{x^\gamma} \cdot e^C\,.$$

Ein kurzer Blick auf den Graphen der Funktionen $\frac{y^\alpha}{e^{\beta y}}$ und $\frac{e^{\delta x}}{x^\gamma}$ (vorsichtshalber ergänzt vielleicht durch eine Kurvendiskussion) zeigt nun in der Tat sofort, daß es zu jedem x-Wert höchstens zwei mögliche y-Werte gibt und umgekehrt; außerdem ist der Bereich, in dem es jeweils zwei Werte gibt, ein zusammenhängendes Intervall; die Lösungskurven sehen also zumindest qualitativ wirklich so aus, wie sie der Computer berechnet hat.

Mit nur wenig mehr Arbeit kann man auch durch TAYLOR-Entwicklung der beteiligten Funktionen nachrechnen, daß die Bahnen in der Nähe des Gleichgewichtspunkts näherungsweise Ellipsen sind.

(Für die hier betrachteten sowie für weitere Beispiele siehe etwa [B], Kapitel 4.)

***b)* Linearisierung von Differentialgleichungen:** Eines der ältesten Methoden, um zu Aussagen über Lösungen nichtlinearer Differentialgleichungen zu kommen, besteht darin, die Gleichung in geeigneten Regionen – hauptsächlich in der Umgebung der Fixpunkte – zu linearisieren und diese vereinfachte Gleichung zu lösen. Im einfachsten Fall, wenn man sich wirklich nur auf die Umgebung der Fixpunkte beschränkt, läuft dies einfach auf die im ersten Vortrag beschriebene Untersuchung der Stabilität der Fixpunkte hinaus.

Betrachten wir als Beispiel wieder die LORENZ-Gleichungen

$$\begin{aligned}\dot{x} &= p(y-x)\\ \dot{y} &= rx - y - xz\ ,\\ \dot{z} &= -bz + xy\end{aligned}$$

Für einen Gleichgewichtspunkt müssen wegen der ersten Gleichung die x- und die y-Koordinate übereinstimmen; sind beide gleich Null, so muß auch $z = 0$ sein, so daß wir den Nullpunkt als ersten Fixpunkt erkannt haben.

Ist $x \neq 0$ können wir $x = y$ in die zweite Gleichung einsetzen und durch x dividieren; dies ergibt die z-Koordinate

$$z = r - 1\ .$$

Setzt man dies noch in die dritte Gleichung ein, folgt sofort, daß

$$x = y = \pm\sqrt{b(r-1)}$$

sein muß.

Betrachten wir zunächst den Nullpunkt; in dessen Umgebung können wir das System linearisieren, indem wir einfach die dort ziemlich kleinen quadratischen Terme ignorieren:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= -px + py \\ \dot{y} &= rx - y \\ \dot{z} &= - bz \end{aligned}$$

Die zugehörige Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -p & p & 0 \\ r & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -b \end{pmatrix}$$

hat, wie man leicht nachrechnet, für die von LORENZ gewählten Parameter drei verschiedene reelle Eigenwerte, von denen zwei negativ sind, während der dritte positiv ist. Der Nullpunkt ist also ein Sattelpunkt, der (lokal) für Punkte einer gewissen Ebenen anziehend ist, der aber, wegen des positiven Eigenwerts, die Punkte *von dieser Ebenen* abstößt.

Für die Linearisierung in der Nähe der beiden anderen Fixpunkte muß die JACOBI-Matrix der rechten Seite an deren Koordinaten ausgewertet werden; dies ist hier die Matrix

$$B_{\pm} = \begin{pmatrix} -p & p & 0 \\ 1 & -1 & \mp\sqrt{b(r-1)} \\ \pm\sqrt{b(r-1)} & \pm\sqrt{b(r-1)} & -b \end{pmatrix} .$$

In beiden Fällen erhalten wir nach Einsetzen der Parameterwerte zwei konjugiert komplexe Eigenwerte mit (kleinem) positivem Realteil sowie einen (absolut großen) negativen reellen Eigenwert.

Damit wird die Dynamik des LORENZ-Attraktors verständlich: Die beiden negativen Eigenwerte versuchen, die Lösungskurve in den zu den zugehörigen Eigenvektoren

$$(0{,}868257005,\ -0{,}3346764273,\ \pm 0{,}4046851315)$$

senkrechten Ebenen zu halten; dort spiralieren die Lösungskurven wegen der positiven Realteile der komplexen Realteile weg vom Fixpunkt. Wenn sie hinreichend weit weg vom Fixpunkt sind, können sie aus der jeweiligen Ebene entkommen, werden aber bald von der anderen eingefangen.

Die numerisch berechnete Dynamik des LORENZ-Systems entspricht also genau dem, was die Untersuchung der drei Linearisierungen in der Umgebung der Fixpunkte erwarten läßt und erklärt auch einigermaßen die Struktur des Attraktors aus zwei Blättern.

Man kann übrigens noch weitergehen und versuchen, die Dynamik auf dem Attraktor selbst geometrisch zu beschreiben. Das ist leider noch nicht vollständig gelungen, doch modulo einiger plausibel erscheinender aber unbewiesener Annahmen kommt man auf ein rein geometrisch konstruiertes dynamisches System, den sogenannten *geometrischen* LORENZ-*Attraktor,* der zum gewöhnlichen LORENZ-Attraktor konjugiert sein könnte; sie dazu [GH], §5.7. Für diese Konstruktion reichen linearisierte dynamische Systeme natürlich nicht aus; methodisch sind wir schon mitten im nächsten Abschnitt:

c) **Geometrische Bestimmung invarianter Mengen:** Wir gehen wieder aus von einem Fixpunkt und betrachten die Eigenvektoren der Matrix des linearisierten Systems.

Die Eigenvektoren zu Eigenwerten mit positivem *bzw.* negativem Realteil spannen jeweils lineare Unterräume auf, in denen die linearisierte Dynamik weg vom Gleichgewicht *bzw.* auf das Gleichgewicht zu geht. Gleichzeitig sorgen sie aber auch dafür, daß die Dynamik – zumindest in der Umgebung des Gleichgewichtspunkts – auf den Raum zu den Eigenwerten mit *positiven* Realteilen zugeht, da ja die Dynamik der übrigen Variablen durch die Eigenwerte mit negativem Realteil bestimmt wird, und genauso geht die Dynamik weg vom Raum zu den Eigenwerten mit *negativen* Realteilen. (Die Möglichkeit rein imaginärer Eigenwerte sei hier ausgeklammert, sie verursachen keine prinzipiellen Schwierigkeiten.)

Für eine nichtlineare Differentialgleichung kann man nun aber nicht erwarten, daß die gerade betrachteten linearen Räume auch noch in einiger Entfernung vom Gleichgewicht die oben diskutierten Eigenschaften haben: Falls man anstelle der linearen Räume geeignete *nichtlineare* Teilmengen betrachtet, kann man mit erheblich besseren Ergebnissen rechnen.

Als Beispiel dazu betrachten wir die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \dot{x} &= x \\ \dot{y} &= x^2 - y \end{aligned} \quad .$$

Der Nullpunkt ist ein Gleichgewichtspunkt, und das linearisierte System (bei dem einfach der x^2-Term wegfällt) hat Eigenwert 1 in Richtung der x-Achse sowie -1 in Richtung der y-Achse; in der Umgebung des Nullpunkts bewegt sich das System also in Richtung x-Achse und weg von der y-Achse – eine typische Sattelpunktsituation, die sich allerdings schnell ändert, sobald x in die Nähe von ± 1 kommt.

Betrachten wir nun anstelle der x-Achse die Parabel $y = x^2/3$. Für einen Punkt $\big((x(t), y(t)\big)$ auf dieser Parabel ist

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\dot{y}}{\dot{x}} = \frac{x^2 - y}{x} = \frac{2x}{3}$$

gleich der Steigung der Parabel, die Lösungskurve bleibt also auf der Parabel. Mehr noch: Mit $z = y - x^2/3$ ist

$$\dot{z} = \dot{y} - \frac{2x\dot{x}}{3} = x^2 - y - \frac{2x^2}{3} = \frac{x^2}{3} - y = -z\,,$$

$z(t)$ ist also eine fallende Exponentialfunktion und alle Lösungskurven bewegen sich für $t \to \infty$ auf diese Parabel zu und gehen mit dieser ins Unendliche. Wie die Abbildung zeigt, geht die Dynamik des Vektorfelds in der Tat überall auf die Parabel zu, während sie auf der Parabel weg vom Gleichgewichtspunkt geht: Dies ist also die wesentliche Kurve, auf der der Sattelpunkt $(0, 0)$ Lösungen abstößt. Sie heißt *instabile Mannigfaltigkeit* von $(0, 0)$, denn auf dieser Parabel ist der Nullpunkt ein instabiler Fixpunkt.

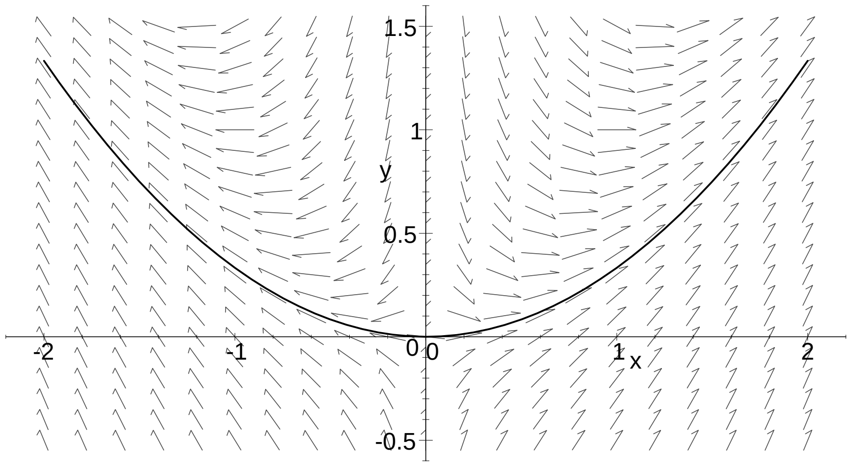

Abb. 21: Stabile und instabile Mannigfaltigkeiten

Genau entgegengesetzt ist die Dynamik auf der y-Achse: Lösungskurven, die auf der y-Achse beginnen, bleiben dort und gehen asymptotisch auf den

Nullpunkt zu; sobald aber ein Punkt neben der y-Achse liegt, wird er von ihr abgestoßen gemäß der Gleichung $\dot{x} = x$. Die y-Achse heißt daher die *stabile Mannigfaltigkeit* des Sattelpunkts $(0,0)$, denn auf dieser Geraden ist $(0,0)$ ein stabiler Fixpunkt.

Es ist klar, daß das Zusammenspiel zwischen stabiler und instabiler Mannigfaltigkeit, insbesondere aber die Geometrie der instabilen Mannigfaltigkeit eines Sattelpunkts, erheblich mehr über die Dynamik eines Systems aussagen als die Eigenvektoren zur linearisierten Gleichung: Zwar ist die Dynamik *auf* der instabilen Mannigfaltigkeit in der Tat sehr instabil, so daß jede Aussage darüber, an welchem Punkt sich eine Lösung zu einer vorgegebenen Zeit befinden wird, mit großen Fehlern behaftet sein muß, die zumindest in der Nähe des Sattelpunkts exponentiell ansteigen; dafür ist aber, falls es keine weiteren Fixpunkte gibt, die Aussage, daß sich der Punkt *in der Nähe* der instabilen Mannigfaltigkeit befinden muß, mit zunehmender Zeit immer sicherer; wir erhalten damit also eine klare Trennung zwischen numerisch unsicherer und numerisch gesicherter Information zu einer Differentialgleichung.

Leider sind Fälle, in denen sie sich die instabile Mannigfaltigkeit wie hier explizit angeben läßt, sehr dünn gesät; wenn sie für allgemeine Systeme nützlich sein sollen, müssen sie daher zumindest teilweise mit numerischen Methoden bestimmt werden.

Der Ausgangspunkt dazu ist die Bestimmung *invarianter Mengen* von Differentialgleichung: Eine Teilmenge $Z \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt invariant unter einer gegebenen Differentialgleichung, wenn jede Lösung, die zu einem Zeitpunkt t_0 in Z liegt, für alle Zeiten $t > t_0$ dort bleibt.

Damit ist jede instabile Mannigfaltigkeit eines Gleichgewichtspunkts insbesondere auch eine invariante Menge; umgekehrt können invariante Mengen aber erheblich größer sein als instabile Mannigfaltigkeiten. Beispielsweise zeigt LORENZ bereits in [Lo1] mit Hilfe einer geeigneten LYAPUNOV-Funktion, daß seine Gleichungen das Innere eines Ellipsoids als invariante Menge haben, so daß insbesondere also die Lösungen beschränkt bleiben.

Inzwischen gibt es eine ganze Reihe weiterer Methoden, invariante Mengen zu bestimmen und darin zumindest Teile von instabilen Mannigfaltigkeiten zu lokalisieren; auch über den Zusammenhang zwischen invarianten Mengen numerischer Methoden und denen der Differentialgleichung selbst gibt es Ergebnisse. Für einen Überblick über diese Fragen sei etwa auf [St] verwiesen.

Ein spezieller Fall einer invarianten Menge ist die Bahn einer periodischen Lösung einer Differentialgleichung; falls es sich hier nicht um anziehende

Grenzkreise handelt, können solche Bahnen sehr schwer zu finden sein. So zeigten beispielsweise [CKP], daß die LORENZ-Gleichungen für $r = 100{,}5$ eine periodische Lösung haben, die durch den Punkt

$$(1.758904452774827471,\ -4.480910873458781704,\ 80.99267161483650640)$$

geht; aufgrund der numerischen Simulation in Abbildung 22 würde man dies nicht unbedingt vermuten. Solche Resultate sind nur möglich durch sorgfältige numerische Berechnungen zusammen mit theoretischen Sätzen über diskrete und kontinuierliche dynamische Systeme – allein durch numerische Simulation läßt sich eine periodische Bahn nie sicher von einer spiralförmigen unterscheiden.

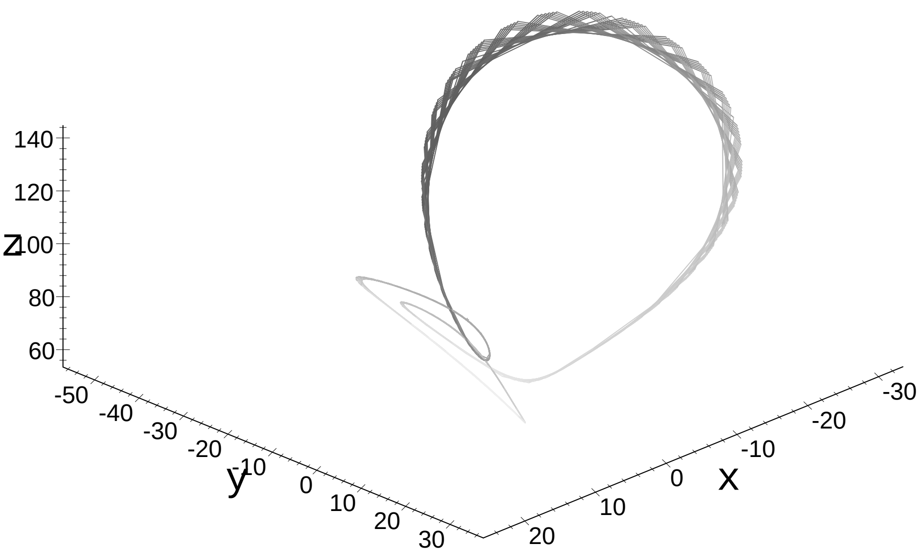

Abb. 22: Numerische Simulation einer periodischen Bahn

Wenn die stabile und die instabile Mannigfaltigkeit hinreichend gut bekannt sind, kann man allerdings manchmal solche Aussagen machen: Da beide Mannigfaltigkeiten im allgemeinen gekrümmt sind, spricht nichts dagegen, daß sie sich außer im gegebenen Sattelpunkt auch noch in einem weiteren Punkt schneiden. Wenn dieser Schnitt transversal ist, gibt es dort einerseits Richtungen, in denen die Dynamik von der instabilen Mannigfaltigkeit bestimmt wird, also weg vom Sattelpunkt, andererseits auch welche, in denen es auf der stabilen Mannigfaltigkeit hin zum Sattelpunkt geht. Man kann sich vorstellen, daß Bahnen, die aus einer Umgebung des Sattelpunkts kommen, in der Gegend dieses zweiten Schnitt in ziemlich chaotischer Weise mal so, mal so behandelt werden, und genau das ist auch der Inhalt des Satzes von SMALE-BIRKHOFF ([GH], *Theorem 5.3.5*): Unter diesen Voraussetzungen gibt es eine invariante Menge, auf der die Dynamik chaotisch ist.

Chaotizität wird hier auf eine der strengstmöglichen Weisen überhaupt gezeigt: Ein sicherlich in jeder Weise chaotisches diskretes dynamisches System ist die Abbildung

$$f\colon [0,1] \to [0,1]; \quad x \mapsto 2x \bmod 1\,,$$

die eine im Zweiersystem dargestellte Zahl einfach um eine Ziffer nach links verschiebt, wobei die erste Ziffer ganz wegfällt. Der Satz von SMALE-BIRKHOFF besagt nun genauer, daß man die invariante Menge mit einer Hyperflächen schneiden kann, so daß die diskrete Folge der Schnittpunkte der Bahnen mit dieser Hyperfläche topologisch konjugiert ist zum System der $x_n = f^{[n]}(x_0)$, wobei $f^{[n]}$ die n-fache Iteration von f ist und x_0 der Anfangsbedingung entspricht.

(Eine solche Einschränkung einer Differentialgleichung zu einem diskreten dynamischen System heißt POINCARÉ-Schnitt; er ist ein wichtiges Hilfsmittel zur Untersuchung der Dynamik einer Gleichung.)

Leider sagt dieser Satz nichts darüber aus, ob diese invariante Menge ein Attraktor ist; sie könnte auch instabil und damit nur schwer zu beobachten sein.

Auch die Verifikation der Bedingung, daß sich die beiden Mannigfaltigkeiten in einem weiteren Punkt transversal schneiden sollen, kann sehr schwierig sein; einige Ansätze, wie man dies im konkreten Fall mit einem Computeralgebrasystem tun kann, sind in [R], *Chapter 4* zu finden.

***d)* Topologische Methoden zur Untersuchung invarianter Mengen:** Die Situation wird etwas besser, wenn wir von der Geometrie zur *Topologie* übergehen. Topologische Eigenschaften kommen dabei folgendermaßen ins Spiel:

Angenommen, wir haben eine Differentialgleichung $\dot{x} = F(x)$ im $\mathbb{R}^n$ und eine offene Teilmenge $W \subset \mathbb{R}^n$. Zu jedem Punkt $x_0 \in W$ können wir dann die Lösung $\psi(x_0, t)$ des zugehörigen Anfangswertproblem mit $x(0) = x_0$

betrachten und schauen, ob die zugehörige Lösungskurve die Menge W verläßt; wenn ja, sei

$$\tau(x_0) = \min\{t > 0 \mid \psi(x_0, t) \notin W\}.$$

Da W offen ist, existiert hier in der Tat ein Minimum und $\psi(x_0, \tau(x_0))$ liegt im Rand ∂W von W. Natürlich muß nicht durch jeden Randpunkt eine Lösungskurve das Gebiet W verlassen; es gibt auch Randpunkte, durch die Lösungskurven ins Gebiet hineinkommen. Wir bezeichnen die Menge aller Austrittspunkte mit W^-.

Falls es nun *keine* Bahn gibt, die ganz im Innern von W liegt, ist zu jedem $x_0 \in W$ ein Zeitpunkt $\tau(x_0) \in W^-$ definiert, und wir haben eine Projektion

$$W \to W^-; \quad x_0 \mapsto \psi(x_0, \tau(x_0))$$

von W auf einen Teil des Randes. Damit diese Abbildung stetig ist, müssen wir noch voraussetzen, daß alle Bahnen, die W verlassen, den Rand transversal schneiden, d.h. es gebe zu jeder solchen Bahn ein $\varepsilon > 0$, so daß

$$\psi(x_0, t) \notin \overline{W} \quad \text{für } \tau(x_0) < t < \tau(x_0) + \varepsilon.$$

Dann läßt sich W also stetig in W^- deformieren; in der Sprache der Topologie sagt man, W^- sei ein *Deformationsretrakt* von W.

Falls W^- kein Deformationsretrakt von W ist, muß es somit eine Bahn geben, die ganz im Innern von W bleibt – dies ist der Inhalt des rund fünfzig Jahre alten Satzes von WAŻEWSKI.

Wie kann man nachweisen, daß ein Raum *kein* Deformationsretrakt eines anderen ist? Die Topologie hat verschiedene Methoden entwickelt, einem Raum algebraische Objekte wie Gruppen oder Vektorräume zuzuordnen, denen man ansehen kann, wie kompliziert der Raum ist. In der hiesigen Situation bezeichnet man den sogenannten *Homotopietyp* des Quotientenraums W/W^- als CONLEY-Index und den (gröberen, aber rechnerisch handhabbareren) Kohomologietyp als kohomologischen CONLEY-Index.

Der Satz von WAŻEWSKI kann dann auch so formuliert werden, daß W eine gesamte Bahn enthält, falls dieser Index ungleich Null ist.

Damit ist die im CONLEY-Index kodierte Information allerdings noch bei weitem nicht ausgeschöpft: Es zeigt sich, daß dieser Index unter recht allgemeinen Voraussetzungen die Dynamik auf der invarianten Menge $\operatorname{Inv} W$ von W bis auf topologische Konjugiertheit eindeutig bestimmt; unter der invarianten Menge von W versteht man dabei natürlich die Menge aller $x \in W$, deren Bahnen für alle Zeiten in W bleiben; siehe dazu etwa [Mi].

Außerdem ist zumindest der kohomologische CONLEY-Index auch einigermaßen berechenbar: Man kann einen entsprechenden Index für diskrete dynamische Systeme definieren und die beiden Indizes für eine Differentialgleichung und das diskrete System, durch das sie numerisch simuliert wird, zueinander in Beziehung setzen; man kann dabei sogar zulassen, daß das diskrete Systeme *mehrwertig* ist, so daß man den Effekt von Rundungsfehlern mit in Betracht ziehen kann; siehe dazu etwa [Mr].

Damit lassen sich dann idealerweise sehr feine Aussagen über die Dynamik auf der invarianten Menge machen, beispielsweise kann man auch mit solchen Methoden die Existenz periodischer Bahnen untersuchen.

Interessant ist aber auch die umgekehrte Frage: Wenn eine periodische Lösung in numerischer Simulation wie eine chaotische Lösung aussehen kann, stellt sich natürlich die Frage, ob nicht vielleicht auch einige der schönen chaotischen Attraktoren, die überall veröffentlicht werden, tatsächlich einfache periodische Bahnen sind, denen nur die numerische Simulation ihr chaotisches Aussehen gab – so wie wir es in §2*e)* gesehen haben und wie es auch in einer ganzen Reihe anderer Fälle vorkommt; siehe etwa [Lo3].

In der Tat ist es bislang nicht bewiesen, daß die „klassischen" LORENZ-Gleichungen wirklich chaotische Lösungen haben! Mit den hier kurz vorgestellten Methoden konnte aber immerhin gezeigt werden [MM], daß die LORENZ-Gleichungen für die Parameterwerte $p = 45$, $r = 54$ und $b = 10$ eine chaotische Lösung haben, wobei „chaotisch" im gleichen strikten Sinne gezeigt wird, wie beim Satz von SMALE-BIRKHOFF. Die Autoren hoffen, mit diesen Methoden auch noch den numerisch schwierigeren Fall der klassischen Parameterwerte in den Griff zu kommen, aber bislang ist dieser noch offen. Es gibt zwar noch andere Ansätze, aber auch damit konnten nur spezielle günstig gewählte Parameterwerte behandelt werden [HZHT].

e) **Rundungsfehlerkontrolliertes Rechnen:** Das Grundproblem beim numerischen Rechnen sind die Rundungsfehler. Falls man mit numerischen Berechnungen zu gesicherten Aussagen kommen will, darf man daher nicht nur ein diskretisiertes Problem durchrechnen, sondern man muß Schranken angeben, zwischen denen die gesuchte Lösung *mit Sicherheit* liegt.

Nun ist es natürlich grundsätzlich möglich, bei jeder Rechnung eine untere und eine obere Schranke für das Ergebnis zu berechnen: Der IEEE-Standard für Gleitkommaarithmetiken, der in praktisch allen neueren Prozessoren implementiert ist, sieht vor, daß der Anwender auch Rundungen einstellen kann, die garantiert nach oben *bzw.* unten runden. Falls man konsequent mit beiden Rundungen arbeitet, kann man ein grundsätzlich jedes Verfahren so durchführen, daß am Ende zuverlässige Schranken für das gewünschte Ergebnis stehen.

Trotzdem werden entsprechende Techniken nur selten angewendet, denn natürlich wird dadurch das Problem nur verlagert: Ein Verfahren, das bei üblicher Rechnung aufgrund von Instabilitäten unzuverlässige Ergebnisse liefert, kann zwar zuverlässige Schranken liefern, aber die liegen dann soweit auseinander, daß sie für alle praktischen Zwecke nutzlos sind: Wenn sich eine kleine Schwankung im Laufe der Simulation zu einer gewaltigen Störung auswächst, müssen rundungsfehlerkontrollierte Rechnungen, die für den Anfangswert die kleinen Schwankungen nicht ausschließen können, natürlich am Ende die gewaltige Störung in ihre Schranken einschließen.

Es kommt aber noch schlimmer: Falls wir für jede Variable einer Differentialgleichung obere und untere Schranken festlegen, heißt das, daß wir bei der numerischen Simulation anstelle eines Punktes einen achsenparallelen Quader durch den $\mathbb{R}^n$ bewegen. Die jeweilige Iterationsvorschrift wird aus diesem Quader nur in den seltensten Fällen wieder einen Quader mit achsenparallelen Kanten machen: Im Sinne einer zuverlässigen Rundungsfehlerkontrolle müssen wir daher nach jeder Iteration das Ergebnis wieder in einen solchen Quader einschließen und dann mir diesem weiterrechnen.

Wohin dies führen kann, zeigt ein einfaches Beispiel, das bereits auf R.E. Moore, einen der Väter der Intervallarithmetik, zurückgeht: Wir betrachten das System

$$\begin{aligned} \dot{x} &= y \\ \dot{y} &= -x \end{aligned}$$

mit der wohlbekannten Lösung

$$x(t) = A \cdot \sin(t + \varphi) .$$

Angenommen, für den Zeitpunkt t_0 wissen wir, daß das Paar $\big(x(t), y(t)\big)$ in einem Quadrat mit Kantenlänge a enthalten ist. Das Euler-Verfahren berechnet $\big(x(t+h), y(t+h)\big)$ nach der Formel

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + h\dot{x}(t) = x(t) + hy(t) \\ y(t+h) &= y(t) + h\dot{y}(t) = y(t) - hx(t) . \end{aligned}$$

Der Vektor $\big(x(t), y(t)\big)$ wird also multipliziert mit der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{pmatrix} ,$$

d.h. er wird mit dem Faktor $\det A = \sqrt{1+h^2}$ gestreckt und um einen gewissen von h abhängigen Winkel α gedreht. Dabei ist

$$\cos\alpha = \frac{1}{\sqrt{1+h^2}} \quad \text{und} \quad \sin\alpha = \frac{h}{\sqrt{1+h^2}}\,,$$

für kleine Werte von h ist daher

$$\cos\alpha \approx \frac{1}{1+h/2} \approx 1-h/2 \quad \text{und} \quad \sin\alpha \approx \frac{h}{1+h/2} \approx h(1-h/2) \approx h\,,$$

und somit $\alpha \approx h$.

Das ursprüngliche Quadrat wird also um den Winkel α gedreht; projiziert man es auf die x- oder y-Achse, so erhält man in beiden Fällen eine Strecke der Länge $|\sin\alpha| + |\cos\alpha|$, wobei natürlich für kleine Winkel α die Betragsstriche überflüssig sind. Damit vergrößert sich die Seitenlänge des achsenparallelen Quadrats pro Iterationsschritt ungefähr um

$$(1+h/2)(1-h/2+h) = (1+h+h^2/4) \approx 1+h\,.$$

Für $h = 2\pi/n$ entspricht eine Periode der Schwingung ungefähr n Iterationen, die Seitenlänge vergrößert sich also um den Faktor

$$(1+2\pi/n)^n\,,$$

was für hinreichend kleine Werte von h, also große Werte von n, ungefähr gleich $e^{2\pi} \approx 535{,}5$ ist.

Wenn wir also zur Zeit $t = t_0$ die Werte von $x(t_0)$ und $y(t_0)$ mit drei geltenden Ziffern kennen, wissen wir wenig mehr als eine Periode später gerade noch, daß die Schwingung mit Amplitude A zum betrachteten Zeitpunkt irgendeinen Wert zwischen $-A$ und A annimmt, und wenig später wissen wir nicht einmal mehr das; das „sicheren“ Ergebnis ist also schon nach kurzer Zeit frei von jeglicher brauchbarer Information.

Mit etwas Nachdenken hätten wir dagegen auch ohne jegliche numerische Simulation sofort gesehen, daß die Länge des Vektors $\big(x(t), y(t)\big)$ von t unabhängig ist: Multipliziert man die linke Seite jeder der beiden Differentialgleichungen mit der rechten Seite der jeweils anderen und setzt beides gleich, so erhält man die Beziehung

$$0 = \dot{x}x + \dot{y}y = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}(x^2+y^2)\,,$$

ein weiteres Beispiel für die Nützlichkeit qualitativer Überlegungen.

Trotzdem ist natürlich auch das rundungsfehlerkontrollierte Rechnen nicht nutzlos: Es ist zwar sicherlich keine Universalmethode, aber mit geeigneten, speziell angepaßten Algorithmen, kann es bei konkreten Problemen zu engen Schranken führen, die man auf keine andere Art hätte beweisen können. Dazu muß man dann aber Algorithmen wählen, die wie etwa das NEWTON-Verfahren zur Nullstellenbestimmung ihre Rundungsfehler mit jedem Iterationsschritt weiter reduzieren. Im Augenblick erscheint mir die Situation bei Differentialgleichungen noch ziemlich unübersichtlich und weit entfernt von einer systematischen Theorie; für Kostproben dessen, was heute möglich ist, sei stellvertretend für mehrere ähnliche Bücher wegen der Nordbaden-Connection der Tagungsband [AK] angegeben.

5. Was tun?

Die fünf Beispiele aus §2 zeigen, daß die Ergebnisse numerischer Simulationen mit Vorsicht betrachtet werden müssen. Zwar sind auch einfachste Verfahren wie etwa das EULER-Verfahren dazu geeignet, Lösungen von Differentialgleichungen numerisch zu approximieren, vor allem wenn es nur um die Illustration eines bereits bekannten Phänomens geht. Falls man aber den zu erwarteten Verlauf der Lösung nicht kennt, sollte man zumindest mit einer Reihe verschiedener Schrittweiten experimentieren und das Ergebnis erst dann halbwegs glauben, wenn die Ergebnisse wenigstens für die kleineren der betrachteten Schrittweiten mit zufriedenstellender Genauigkeit übereinstimmen.

Wenn es um die Berechnung von Zahlenwerten geht, sind Verfahren mit variabler Schrittweitensteuerung vorzuziehen; diese sind zwar auch nicht immun gegen Krankheiten aller Art, kontrollieren aber zumindest die lokalen Fehler. Gelegentlich kann dies allerdings auch ein Nachteil sein: Bei der Berechnung einer chaotischen Bahn, die auf einen Attraktor zuläuft, verzögert die Kontrolle der lokalen Rundungsfehler die Rechnung gewaltig, ohne daß dem fertigen Bild nachher ein Unterschied anzusehen wäre: Da ein Attraktor nahegelegene Bahnen anzieht, sorgt er von selbst dafür, daß verfahrensbedingte Abweichungen ausgeglichen werden und die Geometrie des berechneten Bilds trotzdem einigermaßen stimmt. Die *genaue* Dynamik auf dem Attraktor ist ohnehin nicht numerisch berechenbar.

Am wichtigsten ist, daß ein Computer nie das mathematische Denken ersetzen darf: Vor jeder Simulation sollte man sich überlegen, was man erwartet und was man auch ohne Simulation über die Ergebnisse aussagen kann; nach jeder Simulation sollte man versuchen, herausragende Eigenschaften der berechneten Lösung wenn möglich auch zu beweisen. In diesem Sinne als zusätzliches Hilfsmittel eingesetzt sind numerische Simulationen trotz all ihrer Schwächen ein wertvolles Hilfsmittel sowohl des Mathematikers wie auch des Naturwissenschaftlers oder Technikers.

6. Anhang: Die Bilder in dieser Ausarbeitung

Mit Ausnahme von Abbildung 11, für die ein C-Programm direkt ein Postskriptprogramm schrieb, wurden alle Abbildungen durch Standardbefehle von *Maple* erzeugt. Damit interessierte Leser, denen dieses Programm zur Verfügung steht, mit den Beispielen experimentieren und auch Parameter verändern können *etc.* sind die Kommandos zu den einzelnen Bildern in diesem Anhang zusammengestellt.

Leser mit Zugang zum Internet können sich das *worksheet* hierzu wie auch das ausführlichere *worksheet* mit den Beispielen des Vortrags via `ftp` von

`hilbert.math.uni-mannheim.de` (134.155.48.180)

überspielen; Hinweise findet man unter

`http://hilbert.math.uni-mannheim.de/GeoDiff`

oder, via ftp, in der Datei `pub/GeoDiff/Inhalt`.

Man beachte, daß alle Beispiele in *Maple*, Version V.3 geschrieben sind; die gerade für manche Plattformen auf den Markt gekommene Version V.4 hat leider bei einigen Kommandos des Differentialgleichungspakets eine etwas andere Syntax, so daß es hier Schwierigkeiten geben kann. Sobald ich Version V.4 und eine darauf lauffähige Version der Kommandos habe, werde ich auch diese auf den Server stellen.

```
restart;
with(plots): with(DEtools):
```

Abbildung 1:

```
dgl1 := diff(x(t), t) = - 25*x;
DEplot(dgl1, [t, x], t = 0..1.5, {[0, 1]}, x= -180..180,
stepsize=0.1, method = 'Euler');
```

Abbildung 2:

```
p :=DEplot(dgl1, [t, x], t = 0..0.15, {[0, 1]}, x= 0..1,
stepsize=0.02, method = 'Euler'
display([p, plot(exp(-25*t), t = 0..0.15, linestyle=3)]);
```

Abbildung 3:

```
DEplot(dgl1, [t, x], t = 0..1, {[0, 1]}, x= 0..30, stepsize=0.125);
```

Abbildung 4:

```
milne := proc(f, t_anf, x_anf, h, n)
local t, xalt, x0, x1, x2, xp, xc, y0, y1, y2, yp, i, Punkte;
t := evalf(t_anf);
xalt := evalf(x_anf);
x0 := xalt + h*f(xalt, t);
y0 := f(x0, t+h);
x1 := x0 + h*y0;
y1 := f(x1, t+2*h);
x2 := x1 + h*y1;
y2 := f(x2, t+3*h);
Punkte := [t, xalt, t+h, x0, t+2*h, x1, t+3*h, x2];
t := t+3*h;
for i from 1 to n do
xp := xalt + (4/3)*h*(2*y0 - y1 + 2*y2);
t := t + h;
yp := f(xp, t);
xc := x1 + (h/3)*(y1 + 4*y2 + yp);
xalt := x0; x0 := x1; x1 := x2; x2 := xc;
y0 := y1; y1 := y2; y2 := f(xc, t);
Punkte := [op(Punkte), t, xc];
od;
plot(Punkte);
end;
f := (x, t) -> -x;
milne(f, 0, 1, 0.1, 200);
```

Abbildung 5:

```
dgl2 := diff(x(t), t) = x - 2*exp(-t);
DEplot(dgl2, [t, x], t = 0..10, {[0, 1]}, x = -10..1, stepsize=0.01,
method='Euler');
```

Abbildung 6:

```
dgl3 := diff(x(t), t) = -2*t*x;
DEplot(dgl3, [t, x], t = 0..13, {[0, 1]}, x = -2..2, stepsize=0.2,
method = 'Euler');
```

Abbildung 7:

```
lambda := 'lambda'; dgl4 := diff(x(t), t) = lambda*x*(M - x);
dsolve(dgl4, x(t));
f := 1/rhs(");
lambda := 10; M := 1;
_C1 := solve(subs(t=0, f) = 0.1, _C1);
plot(f, t = -0.5..1, axes=framed);
```

Abbildung 8:

```
DEplot(dgl4, [t, x], t = 0..10, {[0, 0.1]}, x = 0..1.5,
stepsize = 0.25, method = `Euler`);
```

Abbildung 9:

```
DEplot(dgl4, [t, x], t = 0..10, {[0, 0.1]}, x = 0..1.5,
stepsize = 0.22, method = ‘Euler‘);
```

Abbildung 10:

```
DEplot(dgl4, [t, x], t = 0..10, {[0, 0.1]}, x = 0..1.5,
stepsize = 0.3, method = ‘Euler‘);
```

Abbildung 12:

```
display([plot(f, t = 0..1.5, linestyle=3),
DEplot(dgl4, [t, x], t = 0..1.5, {[0, 0.1]}, x = 0..1,
stepsize = 0.3, method=‘rk4‘) ]);
```

Abbildung 13:

```
lorenz :=diff(x(t), t) = 10*(y(t) - x(t)),
diff(y(t), t) = 28*x(t) - y(t) - x(t)*z(t),
diff(z(t), t) = -(8/3) * z(t) + x(t) * y(t);
kurve :=
DEplot([lorenz],  [t,x,y,z], 0..50, {[0,5,5,5]}, stepsize=0.1,
scene=[t, x]);
display([kurve,
DEplot([lorenz],  [t,x,y,z], 0..50, {[0, 5 + 10^(-4), 5, 5]},
stepsize=0.1, scene=[t, x], linestyle = 3) ]);
```

Abbildung 14:

```
display([kurve,
DEplot([lorenz],  [t,x,y,z], 0..50, {[0, 5 + 10^(-8), 5, 5]},
stepsize=0.1, scene=[t, x], linestyle = 3) ]);
```

Abbildung 15:

```
DEplot([lorenz],  [x,y,z], 0..20, {[0,5,5,5]}, stepsize=0.02);
```

Abbildung 16:

```
lambda := 0.05; Mx := 800; My := 700;
dgl5 := diff( x(t), t ) = lambda*x(t)*(Mx - x(t) - y(t)),
diff( y(t), t ) = lambda*y(t)*(My - x(t)- y(t));
display([
DEplot([dgl5], [t,x,y], 0..1, {[0,2,2]}, stepsize=0.05, scene=[t, x]),
DEplot([dgl5], [t,x,y], 0..1, {[0,2,2]}, stepsize=0.05, scene=[t, y])
]);
```

Abbildung 17:

```
display([dfieldplot([dgl5], [x, y],  0..1, x=0..Mx, y=0..Mx),
plot(Mx - x, x = 0..Mx), plot(My - x, x = 0..My)]);
```

Abbildung 18:

```
f := (x,y) -> 0.1*x - 0.0002*x*y;
g := (x, y) ->-0.02*y + 0.00001*x*y;
DEplot([diff(x(t),t) = f(x(t),y(t)), diff(y(t), t) = g(x(t),y(t))],
[t, x, y], 0..500, {[0, 2500, 600]},stepsize=1);
```

Abbildung 19:

```
DEplot([diff(x(t),t) = f(x(t),y(t)), diff(y(t), t) = g(x(t),y(t))],
[x,y], 0..250, {[0, i*500, 500] $ i =4..10},stepsize=0.5);
```

Abbildung 20:

```
display([
DEplot([diff(x(t),t) = f(x(t),y(t)), diff(y(t), t) = g(x(t),y(t))],
[t, x, y], 0..500, {[0, 2500, 600]},stepsize=0.5, scene = [t, x]),
DEplot([diff(x(t),t) = f(x(t),y(t)), diff(y(t), t) = g(x(t),y(t))],
[t, x, y], 0..500, {[0, 2500, 600]},stepsize=0.5, scene = [t, y]) ]);
```

Abbildung 21:

```
dgl6 := diff( x(t), t ) = x, diff( y(t), t ) = x^2 - y;
display( [ dfieldplot([dgl6], [x, y], 0..1, x=-2..2, y=-0.5..1.5),
plot(x^2/3, x=-2..2, thickness=3) ] );
```

Abbildung 22:

```
p := 10; b := 8/3; r := 100.5;
lorenz :=diff(x(t), t) = p*(y(t) - x(t)),
diff(y(t), t) = r*x(t) - y(t) - x(t)*z(t),
diff(z(t), t) = -b * z(t) + x(t) * y(t);
DEplot([lorenz],  [x,y,z], 0..30, {[0, 1.758904452774827471,
-4.480910873458781704, 80.99267161483650640]},
stepsize=0.03);
```

7. Literaturhinweise

Von der hier zitierten Literatur dürfte für die Teilnehmer dieses Nachmittagsseminars vor allem das Buch [CHLOS] interessant sein, das speziell unter dem Gesichtspunkt *Differentialgleichungen* eine Einführung in *Maple* gibt. Dabei werden auch grundsätzliche Probleme der numerischen Simulation behandelt; so stammen etwa die Beispiele in §2*c)* und *d)* aus diesem Buch. Dem Titel und der Besprechung im *Zentralblatt* nach zu urteilen, dürfte [AB] ähnlich sein, es hat allerdings etwa den dreifachen Umfang und ist anscheinend gleichzeitig noch als Einführung in die Theorie der Differentialgleichungen gedacht.. Ich habe das Buch selbst noch nicht gesehen, kann also nichts genaues dazu sagen.

Weitere Beispiele zur mathematischen Modellierung, die teilweise auch für den Unterricht geeignet sein könnten, findet man in den (rein mathematisch orientierten) Büchern [B], [Be]; beispielsweise könnte sich das Dynamomodell des Erdmagnetismus in [Be], §8.2 beim Thema *Chaos* als Alternative zu den schwer motivierbaren Lorenz-Gleichungen anbieten. Zum Thema *Chaos* ist auch das (eher physikalisch orientierte) Buch [Hi] gut geeignet – nicht zuletzt aufgrund einiger interessanter historischer Abschweifungen. Als systematische Einführung in die Probleme nichtlinearer Dynamik sei das mathematisch erheblich anspruchsvollere Buch [GH] genannt, das man allerdings nur bei guten Grundkenntnissen auf dem Gebiet der Differentialgleichungen in die Hand nehmen sollte.

Ein neueres Buch über numerische Methoden für Differentialgleichungen, das auch auf Zuverlässigkeitsfragen eingeht, ist [DB]; als Kontrast empfiehlt sich ein Blick in das erheblich ältere Buch [A] (aus dem das Beispiel in §2*b)* entnommen ist), das ebenfalls solche Fragen behandelt und teilweise zu ganz anderen Schlußfolgerungen kommt. Als „Kochbuch“, in dem man zu fast allen Problemen der Numerik fertig programmierte Algorithmen in C nebst Hinweisen zu deren Vor- und Nachteilen findet, ist [PTVF] zu empfehlen; von diesem Buch gibt es auch eine FORTRAN- und – von älteren Auflagen – PASCAL- und BASIC-Versionen.

Der Rest der zitierten Literatur ist nur interessant für Leser, die ein spezielles im Vortrag angesprochenes Thema vertiefen möchten und dafür bereit sind, teilweise recht anspruchsvolle Originalarbeiten zu lesen.

[A] F.S. ACTON: Numerical methods that usually work, *Mathematical Association of America,* ²1990

[AB] M. ABELL, J.P. BRASELTON: Differential equations with Maple V, *Academic Press,* 1994

[AK] E. ADAMS, U. KULISCH [HRSG.]: Scientific Computing with Automatic Result Verification, *Academic Press,* 1993

[B] M. BRAUN: Differentialgleichungen und ihre Anwendungen, *Springer,* ³1994

[Be] E. BELTRAMI: Mathematics for dynamic modelling, *Academic Press,* 1987

[CHLOS] K.R. COOMBES, B.R. HUNT, R.L. LIPSMAN, J.E. OSBORN, G.J. STUCK: Differential equations with *Maple*, *Wiley,* 1996

[DB] P. DEUFLHARD, F. BORNEMANN: Numerische Mathematik II, *de Gruyter,* 1994

[DP] J.R. DORMAND, P.J. PRICE: A family of embedded Runge-Kutta formulæ, *J. Comp. Appl. Math.* **6** (1980), 19–26 *und* **7** (1981), 67–75

[Gö] K. GÖDEL: Über formal unentscheidbare Sätze der Principia Mathematica und verwandter Systeme I, *Monatsh. Math. Phys.* **38** (1931), 173–198

[GH] J. GUCKENHEIMER, P. HOLMES: Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields, *Springer,* 1983

[H] D. HILBERT: Probleme der Grundlegung der Mathematik, *Math. Ann.* **102** (1930), 1–9

[Hi] R.C. HILBORN: Chaos and Nonlinear Dynamics, *Oxford University Press,* 1994

[Ho] P. HOLMES: Poincaré, celestial mechanics, dynamical-systems theory and “chaos”, *Physics Reports* **193** (1990), 137–163

[HZHT] B. HASSARD, J. ZHANG, S.P. HASTINGS, W.C. TROY: A computer proof that the Lorenz equations have “chaotic” solutions, *Appl. Math. Lett.* **7** (1994), 79–83

[**La**] P.S. LAPLACE: Théorie analytique des probabilitées, *Paris,* 1820 *oder* Œuvres de Laplace, tome $7^{\text{ème}}$, *Paris,* 1847

[**Li**] SIR JAMES LIGHTHILL, F.R.S.: The recently recognized failure of predictability in Newtonian dynamics, *Proc. R. Soc. Lond.* **A407** (1986), 35–48

[**Lo1**] E.N. LORENZ: Deterministic Nonperiodic Flow, *J. Atmos. Sci.* **20** (1963), 130–141, *nachgedruckt u.a. in* P. CVITANOVIĆ [HRSG.]: Universality in Chaos, *Bristol, New York* ^{2}1989, 367–378

[**Lo2**] —: The predictability of hydrodynamic flow, *Trans. N.Y. Acad. Sci.* **25** (1963), 409–432

[**Lo3**] —: Computational chaos – a prelude to computational instability, *Physica* **D35** (1989), 299–317

[**Mi**] K. MISCHAIKOW: Conley Index Theory, *in:* L. ARNOLD, C. JONES, K. MISCHAIKOW, G. RAUGEL: Dynamical Systems, Montecatini Terme, 1994, *Springer Lecture Notes in Mathematics* **1609** (1995), 119–207

[**MM**] —, M. MROZEK: Chaos in the Lorenz equations: A computer-assisted proof, *Bull. Am. Math. Soc.* **32** (1995), 66–72

[**Mo1**] C. MOORE: Unpredictability and Undecidability in Dynamical Systems, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990), 2354–2357

[**Mo2**] —: Generalized shifts: unpredictability and undecidability in dynamical systems, *Nonlinearity* **4** (1991), 199–230

[**Mr**] M. MROZEK: From the theorem of Ważewski to computer assisted proofs in dynamics, *in:* Panoramas of Mathematics, Colloquia 93–94, *Banach Center Publications* **34** (1995), 105–120

[**P1**] H. POINCARÉ: Sur les équations de la dynamique et le problème des trois corps, *Acta Math.* **13** (1890), 1–270

[**P2**] —: Les Méthodes nouvelles de la Mécanique céleste, *3 Bände, Paris,* 1892–1899; *Neuauflage in englischer Sprache:* New Methods of Celestial Mechanics, *American Institute of Physics,* 1993

[**Po**] H. POPP: Vektorfelder und Differentialgleichungen, *erster Vortrag dieses Seminars*

[**PTVF**] W.H. PRESS, S.A. TEUKOLSKY, W.T. VETTERLING, B.P. FLANNERY: Numerical Recipes in C, *Cambridge University Press,* ^{2}1992

[**R**] R.H. RAND: Topics in nonlinear dynamics with computer algebra, *Gordon and Breach Science Publishers,* 1994

[**RS**] U. RACKE, G. STEIN: Das logistische Wachstum als problematisches Beispiel mathematischer Modellbildung, *Preprint Nr. 1414, Fachbereich Mathematik, TH Darmstadt,* 1991

[**SST**] W. SCHWABHÄUSER, W. SZMIELEW, A. TARSKI: Metamathematische Methoden in der Geometrie, *Springer,* 1983

[**St**] A.M. STUART: Numerical analysis of dynamical systems, *Acta Numerica* 1994, 467–572

[**Tu1**] A.M. TURING: On computable numbers with an application to the Entscheidungsproblem, *Proc. London Math. Soc.* **42** (1937), 230–265 *und* **43** (1937), 544–546; *deutsche Übersetzung:* Über berechenbare Zahlen mit einer Anwendung auf das Entscheidungsproblem, *in* A.M. TURING: Intelligence Service, *Brinkmann & Bose,* 1987, 19–60

[Tu2] —: The chemical basis of morphogenesis, *Proc. R. Soc. Lond.* **B641** (1952), 37–72 *oder in* P.T. SAUNDES [HRSG.]: Collected Works of A.M. Turing, Morphogenesis, *North-Holland,* 1992, 1–36

[W] A. WILES: Modular elliptic curves and Fermat's Last Theorem, *Ann. Math.* **141** (1995), 443–551

[W-T] A. WILES, R. TAYLOR: Ring-theoretic properties of certain Hecke algebras, *Ann. Math.* **141** (1995), 553–572

Wolfgang K. Seiler
Fakultät für Mathematik und Informatik
Universität Mannheim
68131 Mannheim

seiler@math.uni-mannheim.de