

# *Lieblingsfach*

Königin der  
Wissenschaften

Sprache der Natur-  
wissenschaften

SCHLÜSSEL-  
TECHNOLOGIE

Schöngesichtiges auf  
abstraktem Niveau

**Querfach-  
wissenschaft**

**M A T H E M A T I K**

Gehirnwissenschaft

Horrorfach

HILFSWISSENSCHAFT

# Was machen Mathematiker?

Diese Frage lässt sich nicht wirklich beantworten, ohne im allzu Vagen und Unkonkreten zu bleiben. Wie andere Wissenschaften so fächert sich auch die Mathematik in viele Unterdisziplinen und Teilgebiete auf. Aus der Verschiedenartigkeit von Fragestellungen innerhalb der Mathematik resultieren ganz unterschiedliche Tätigkeiten der Menschen, die Mathematik betreiben. Daher ist die Frage spezieller zu stellen, zum Beispiel:

## Was machen wir am Lehrstuhl für Numerik in Konstanz?

Insbesondere im **Jahr der Mathematik 2008** möchten wir einen Einblick in die Arbeit unseres noch jungen Lehrstuhls ermöglichen. Neben etlichen Vorträgen des Lehrstuhlinhabers Prof. M. Junk und weiteren Sonderaktionen wie ein Laptop-Garten mit mathematischen Experimenten zum Selbstaussprobieren wurden/werden dazu auch einige Berichte aus Forschung und Lehre vorbereitet:

- **Was lernt man in einer Numerikvorlesung?**

Verfahren zum Lösen linearer Gleichungssysteme gehören zu den wichtigsten Grundbausteinen vieler Softwareanwendungen für wissenschaftliche und technische Berechnungen. Neben einer Einführung in das mathematische Problem und seiner wesentlichen Lösungsansätze werden mehrere Tests und ein Anwendungsbeispiel vorgestellt, wie sie in den Übungen zur Vorlesung diskutiert werden.

- **Politik trifft Mathematik – Ein fiktives Gespräch**

Ein Mathematiker berichtet einem Politiker über den "Dschungel der Differentialgleichungen". Dank der Übereinstimmung bzw. Ähnlichkeit mathematischer Fachausdrücke mit Begriffen der (politischen) AlltagsSprache kann der Politiker auch ohne einschlägige Vorbildung den Ausführungen folgen.

- **Zwischen Anschauung und Abstraktion – Computer-Simulationen mit bol(t)zenden Teilchen.**

Eine allgemeinverständliche Darstellung über ein abgeschlossenes Dissertationsprojekt erläutert beispielhaft, wo und wie sich forschungsrelevante Fragen ergeben und auf welche Weise sie sich beantworten lassen.

# Was lernt man in einer Numerikvorlesung?

## Kostprobe: Lösungsmethoden linearer Gleichungssysteme

Martin Rheinländer

Die meisten dürften aus der Schule mit Gleichungen der Art  $7x = 3$  vertraut sein. Die Lösung  $x = 3/7$  ergibt sich formal, indem man die Ausgangsgleichung mit  $1/7 = 7^{-1} \approx 0,14286$  durchmultipliziert. Unzählige Anwendungsprobleme führen auf mehrere lineare Gleichungen mit entsprechend vielen Unbekannten. Solche Gleichungssysteme können in einer einzigen *Matrixgleichung* der Form  $\mathbf{Mx} = \mathbf{b}$  zusammengefaßt werden.

Ähnlich wie mit gewöhnlichen Zahlen läßt sich auch mit Matrizen ( $\mathbf{M}$ ) und Vektoren ( $\mathbf{x}, \mathbf{b}$ ) rechnen. Allerdings handelt es sich um etwas komplexere Objekte, weshalb sich nicht alle Rechenregeln übertragen lassen. So besitzen zum Beispiel viele Matrizen kein *multipli�atives Inverses*  $\mathbf{M}^{-1}$  (man beachte, daß sich auch zu der Zahl  $0$  kein Inverses widerspruchsfrei definieren läßt). In solchen Fällen kann die Matrixgleichung entweder nicht eindeutig gelöst werden oder sie hat gar keine Lösung.

Doch selbst wenn  $\mathbf{M}^{-1}$  existiert und sich die Matrixgleichung damit analog zum obigen Zahlenbeispiel leicht theoretisch lösen läßt, kann die konkrete Berechnung von  $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$  sehr schwer sein, vor allem bei großen Gleichungssystemen mit hunderttausenden von Unbekannten, wie sie in Ingenieursrechnungen üblicherweise auftreten. Natürlich lassen sich derartige Probleme nicht ohne Computer lösen; doch diese können nur dann helfen, wenn man ihnen genau sagt, was sie tun sollen. Die Entwicklung von programmierbaren Verfahren zur (näherungswise) Lösung großer Gleichungssysteme ist ein klassisches Aufgabenfeld der *numerischen Mathematik (Numerik)*.

Oftmals werden numerische Verfahren rezeptartig abgehandelt und einschlägige Fachbücher lesen sich so spannend wie Kochbücher. Doch das wird dem Stoff keineswegs gerecht. Wer sich für das *Warum & Weshalb* interessiert, wird entdecken, welcher Ideenreichtum sich entfaltet, um das Ausgangsproblem stets anders zu formulieren und es aus veränderter Perspektive erneut anzugreifen. Hier mündet die Eleganz mathematischen Denkens in etliche Verfahren (*Algorithmen*) mit jeweils speziellen Eigenschaften. Dabei zählt nicht nur die theoretische Verifizierbarkeit der Algorithmen sondern auch ihre Robustheit im Einsatz unter den nicht idealen Gegebenheiten der Praxis, wie z.B. Rundungsfehler oder begrenzte Arbeitsspeicher. Auf der nächsten Seite werden vier Grundideen zum Lösen linearer Gleichungssysteme kurz vorgestellt:

**1) Eliminationsverfahren:** Ist **N** eine weitere invertierbare Matrix, dann ist **Mx = b** äquivalent zu **NMx = Nb**, d.h. beide Gleichungen besitzen dieselbe Lösung. Die Idee besteht nun darin, die Ausgangsgleichung solange mit Matrizen **N<sub>1</sub>**, **N<sub>2</sub>**, **N<sub>3</sub>**, ... zu multiplizieren, bis die resultierende Produktmatrix ... **N<sub>3</sub>N<sub>2</sub>N<sub>1</sub>M** auf der linken Seite ganz leicht zu invertieren ist. Das Eliminationsverfahren beschreibt, wie sich eine derartige Folge von Matrizen systematisch und einfach konstruieren lässt. Dabei wird die Matrix als quadratisches Zahlenschema zunächst auf Dreiecksgestalt dann auf Diagonalgestalt gebracht, d.h. die Einträge der Produktmatrix abseits ihrer Diagonalen werden sukzessive zu Null eliminiert.

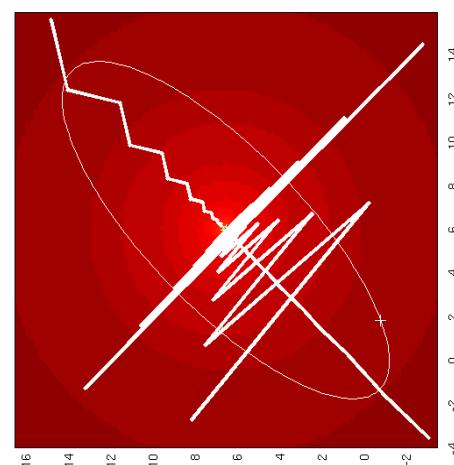
**4) Mehrgitterverfahren:** Viele Probleme lassen sich ähnlich wie Bilder „rastern“. Wenig Rasterpunkte bedeuten eine grobe, viele eine feine Auflösung. In analoger Weise können gewisse Ausgangsprobleme in mehr oder weniger große Gleichungssysteme überführt werden. Je mehr Genauigkeit gewünscht ist, desto größer die Gleichungssysteme aber desto aufwendiger auch deren Lösung. Kombiniert man geschickt kleinere Gleichungssysteme, welche eine schnelle aber ungenaue Lösung erlauben, mit größeren und großen Gleichungssystemen, so lassen sich letztere weit effizienter lösen als wenn man sie isoliert betrachtet. Durch diese Kopplung großer Gleichungssysteme mit einer Hierarchie kleinerer aber „ähnlicher“ Gleichungssysteme werden enorme Rechenbeschleunigungen erzielt. Im Detail handelt es sich jedoch um recht komplizierte Algorithmen, die auch den Einsatz von zu 1), 2) oder 3) zählenden Verfahren erfordern.

**Ein Problem**  
**Mx = b**  
**Viele Ideen**

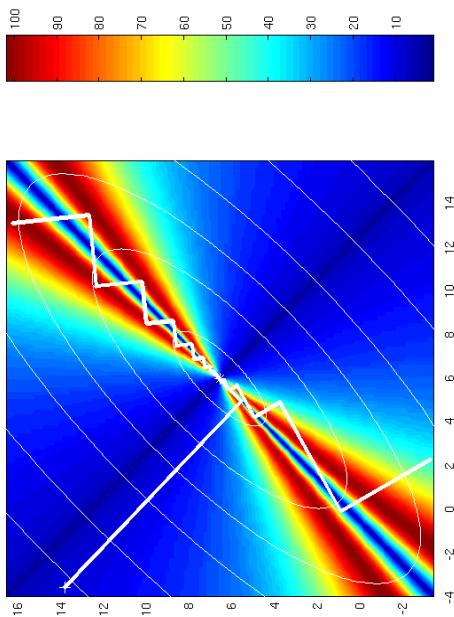
**2) Klassische Iterationsverfahren:** Man zerlegt **M** in zwei additive Bestandteile **M = P + Q**, wobei **P** möglichst einfach invertierbar sein soll. Dann ist **Mx = b** äquivalent zu **Px = -Qx + b** bzw. zu **x = P<sup>-1</sup>(b - Qx)**. Nun bedarf es eines kühnen Schrittes, denn diese sogenannte Fixpunktgleichung lässt sich oftmals iterativ lösen. Dazu wählt man einen Startwert **x<sub>0</sub>** und berechnet dann **x<sub>1</sub> = P<sup>-1</sup>(b - Qx<sub>0</sub>)**. Entsprechend lässt sich **x<sub>2</sub>** aus **x<sub>1</sub>** berechnen usw.. Derart wird eine Folge erzeugt, welche gegen die Lösung konvergiert, d.h. sich ihr immer besser annähert. Echte Iterationsverfahren liefern im Unterschied zu Eliminationsverfahren auch nach beliebig vielen Schritten niemals die exakte Lösung, sie kommen ihr aber beliebig nahe.

**3) Gradientenverfahren:** Lineare Gleichungssysteme können in Minimierungsproblem(e) verwandelt werden. Das Gleichungssystem wird dann dadurch gelöst, daß man den Tiefpunkt einer geeigneten trichter- bzw. kraterförmigen Fläche bestimmt. Wie aber lässt sich im Gelände ein Tiefpunkt ansteuern, wenn man nicht weiß, wo er liegt? Eine Möglichkeit besteht darin, immer dem steilsten Abstieg d.h. dem negativen Gradienten zu folgen. Außer in kreisförmigen Kratern gelangt man auf diese Weise zwar nicht direkt zum Tiefpunkt, sondern muß einige Haken schlagen; der Vorteil besteht jedoch darin, daß dies sozusagen auch mit verbundenen Augen funktioniert, d.h. es genügt allein Information über das lokale Gefälle.

## „In Aktion“



**Das Jacobi Verfahren** stellt das einfache klassische Iterationsverfahren dar.



Das Gradientenverfahren fußt auf der anschaulichen Methode des steilsten Abstiegs.

Um die Funktionsweise von Iterations- und Gradientenverfahren zu illustrieren, betrachten wir als Beispiel ein  $2 \times 2$  System, d.h. ein System mit zwei Gleichungen und zwei Unbekannten. Zwar ist es in diesem simplen Fall weder ratsam auf das eine noch auf das andere Verfahren zurückzugreifen – eine einfache Lösungsformel leistet hier weit bessere Dienste – aber die Wirkungsweise beider Verfahren lässt sich so optimal veranschaulichen.

Die Lösung unseres Testproblems ist durch zwei Zahlen gegeben. Diese legen einen Punkt in der Zahlenebene fest, welcher sich hier jeweils in der Mitte der rechteckigen Ausschnitte befindet. Beide Verfahren basieren auf einem iterativen Ansatz, d.h. auf dem wiederholten Auswerten einer Rechenvorschrift.

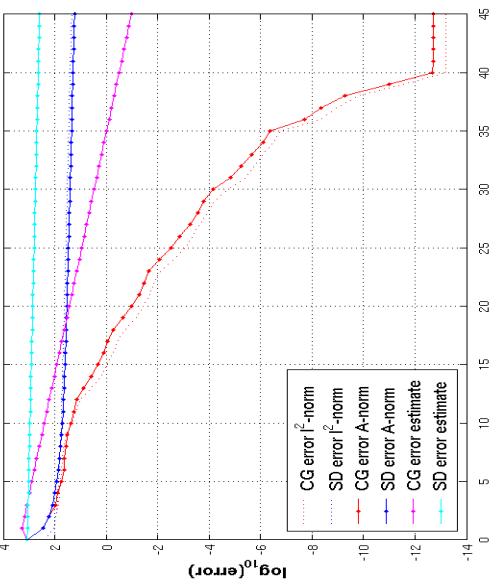
Dazu gibt man sich als Startwert ein Zahlenpaar (Punkt) vor und erzeugt dann nach der jeweiligen Vorschrift eine Folge von Zahlenpaaren (Punkten). Aus theoretischen Überlegungen geht hervor, daß die so erzeugten Folgen unter recht allgemeinen Voraussetzungen gegen die Lösung konvergieren müssen. Einige resultierende Punktfolgen sind als weiße, zickzackartige Linien dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich die Folgen abhängig von der Wahl des Startwerts in größeren oder kleineren Schritten und mit mehr oder weniger deutlichen Richtungswechseln der Lösung nähern.

Da jeder Punkt als Startwert wählbar ist, kann man sich fragen, in welchen Bereichen der Zahlenebene günstige Startwerte liegen, die eine schnelle Konvergenz bewirken. Diese Frage wird durch die Farbschattierung beantwortet. Der Farbwert in jedem Punkt gibt an, wieviele Iterationen (Schritte) benötigt werden, um die Lösung mit einem maximalen Abstand (Fehler) von  $10^{-10} = 0.0000000001$  zu erreichen, wenn der betreffende Punkt als Startwert eingesetzt wird. Es ergeben sich folgende Beobachtungen: Die Iterationsfunktion (Anzahl benötigter Iterationen) ist beim Jacobi Verfahren unabhängig von der Richtung des Startwerts (*isotrop*) und im wesentlichen nur durch den Abstand bestimmt. Dagegen ist sie beim Gradientenverfahren stark richtungshängig (*anisotrop*). Im Mittel konvergiert das Gradientenverfahren deutlich schneller als das Jacobi Verfahren.

Es wurde bereits erwähnt, daß das Gradientenverfahren eine Funktion minimiert; diese wird durch die Ellipsenschar dargestellt (siehe rechts), welche den Höhenlinien auf topographischen Landkarten bzw. den Isolinien auf Wetterkarten entsprechen. Die Ellipsen sind um den Tiefpunkt – die Lösung – zentriert. Das Gradientenverfahren bzw. die Methode des steilsten Abstiegs funktioniert nun so: Man bestimmt am aktuellen Standpunkt die Richtung des steilsten Gefälles. Dieser folgt man bis es nicht weiter bergab geht und führt sodann eine Kursänderung durch. In unserem zweidimensionalen Fall stellt sich heraus, daß man gerade einen Richtungsschwenk um 90 Grad vollziehen muß. Auf diese Weise nähert man sich automatisch dem Tiefpunkt.

Die Orientierung der Ellipsen wird durch die Systemmatrix bestimmt, deren Eigenvektoren in Richtung der Hauptachsen zeigen. Auch beim Jacobi Verfahren scheinen die Ellipsen eine Rolle zu spielen, wenn auch eine weniger offenkundige. Man beobachtet für Startwerte auf der längeren bzw. kürzeren Hauptachse ein Verhalten minimaler bzw. maximaler Oszillation.

# „Im Wettstreit“



## Gradientenverfahren *contra* CG Verfahren

Im obigen Diagramm tritt das Gradientenverfahren (blau) gegen das CG Verfahren (rot) an. Zur besseren Darstellung sehr kleiner Zahlen, ist der *Logarithmus* des Fehlers gegen die Anzahl der Iterationen aufgetragen, d.h. die Beschriftung 2, 0, -2, ... der vertikalen Achse entspricht  $10^2 = 100$ ,  $10^0 = 1$ ,  $10^{-2} = 0.01$ , ... .

Als Beispiel dient eine 40x40 Matrix (d.h. ein Gleichungssystem mit 40 Unbekannten), welche aus Zufallszahlen generiert wurde.

Während das CG Verfahren bereits nach 40 Iterationen konvergiert ist – ein Fehler kleiner als  $10^{-14}$  kann aufgrund Computer interner Rechenun genauigkeiten (Rundungsfehler) nicht unterschritten werden – bleibt das Gradientenverfahren mit einem Fehler von ungefähr 0.1 nach der gleichen Anzahl von Iterationen hoffnungslos abgeschlagen. Die cyan- und magenta farbene Linien stellen Fehlerabschätzungen dar, welche sich aus der Theorie ergeben. Offensichtlich erweisen sich beide Verfahren in der Praxis als weit besser, denn ihre Fehlerkurven liegen deutlich unterhalb der jeweiligen Vorhersage.

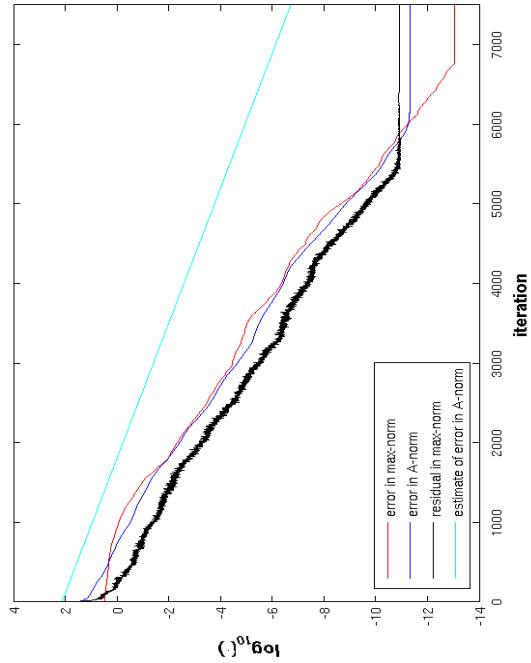
Bei der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen (siehe Anwendungsbeispiel) entstehen zwar risige Gleichungssysteme mit Tausenden von Unbekannten, jede Einzelgleichung setzt aber nur wenige (<10) Unbekannte miteinander in Beziehung. Dies führt zu sogenannten *dünnbesetzten* Matrizen. Wie sich das CG Verfahren in diesem Fall verhält, ist rechts oben zu sehen. Die Konstruktion des Verfahrens erzwingt stets einen monoton fallenden Fehler, welcher hier bezüglich unterschiedlicher Normen (Abstandsmaße) geplottet ist (rote bzw. blaue Kurve).

Das Gradientenverfahren (Abkürzung SD = *steepest descent*, steilster Abstieg) kann als Ausgangspunkt für deutlich leistungsfähigere Algorithmen wie das CG Verfahren (Verfahren der konjugierten Gradienten) angesehen werden. Die Idee des steilsten Abstiegs wird hier verknüpft mit speziellen *Orthogonalitätsrelationen* sowie mit der Tatsache, daß sich die Inverse einer Matrix *polynomial* darstellen läßt, d.h. als spezielle Summe endlich vieler ihrer Potenzen (siehe Satz von Cayley-Hamilton). Beide Verfahren können jedoch nur auf eine bestimmte Klasse von Matrizen angewendet werden (*positiv definite, symmetrische Matrizen*).

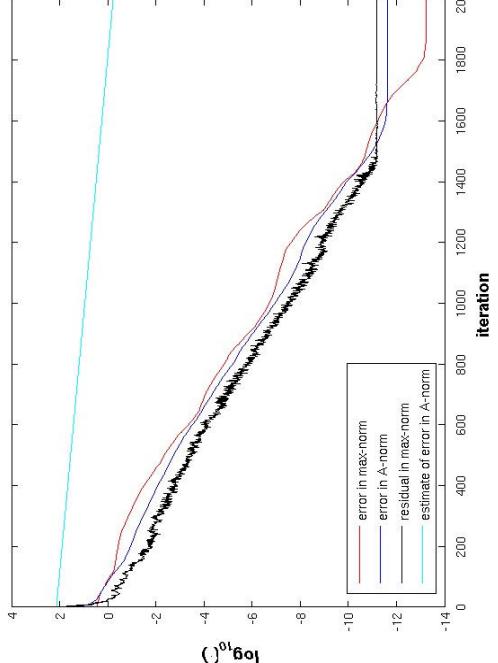
Im obigen Diagramm tritt das Gradientenverfahren (blau) gegen das CG Verfahren (rot) an. Zur besseren Darstellung sehr kleiner Zahlen, ist der *Logarithmus* des Fehlers gegen die Anzahl der Iterationen aufgetragen, d.h. die Beschriftung 2, 0, -2, ... der vertikalen Achse entspricht  $10^2 = 100$ ,  $10^0 = 1$ ,  $10^{-2} = 0.01$ , ... .

Als Beispiel dient eine 40x40 Matrix (d.h. ein Gleichungssystem mit 40 Unbekannten), welche aus Zufallszahlen generiert wurde.

Während das CG Verfahren bereits nach 40 Iterationen konvergiert ist – ein Fehler kleiner als  $10^{-14}$  kann aufgrund Computer interner Rechenun genauigkeiten (Rundungsfehler) nicht unterschritten werden – bleibt das Gradientenverfahren mit einem Fehler von ungefähr 0.1 nach der gleichen Anzahl von Iterationen hoffnungslos abgeschlagen. Die cyan- und magenta farbene Linien stellen Fehlerabschätzungen dar, welche sich aus der Theorie ergeben. Offensichtlich erweisen sich beide Verfahren in der Praxis als weit besser, denn ihre Fehlerkurven liegen deutlich unterhalb der jeweiligen Vorhersage.

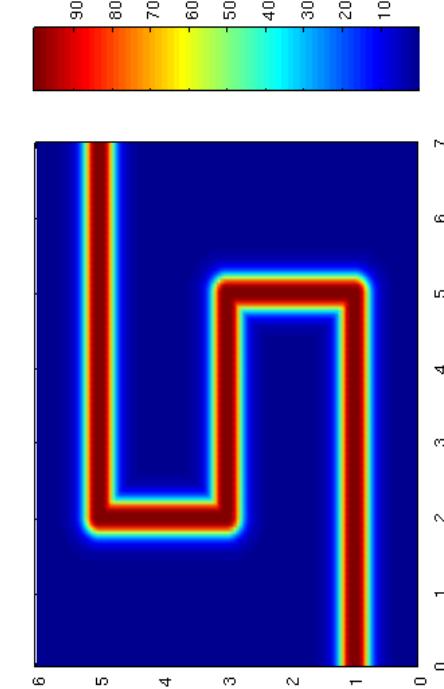


Das *Residuum* (schwarz) muß als Fehlermaß verwendet werden, wenn keine exakte Lösung bzw. Vergleichslösung wie in diesem Test zur Verfügung steht.



Die Technik der *Vorkonditionierung* ermöglicht eine Reduktion der benötigten Iterationen (in diesem Fall auf weniger als ein Drittel). Jedoch ist dann jede Iteration mit (etwas) mehr Aufwand verbunden.

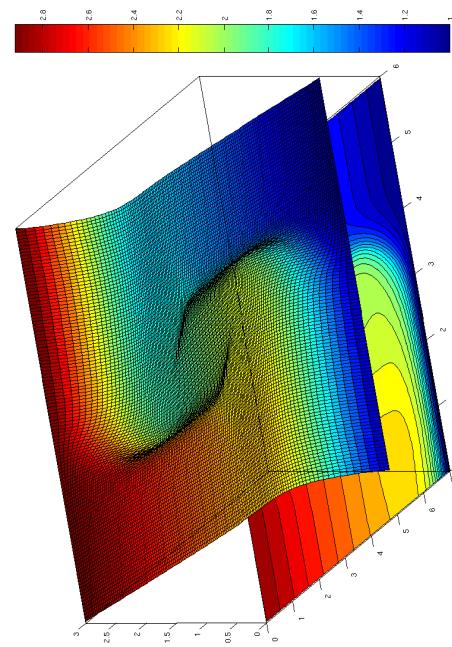
# Anwendungsbeispiel: Auch der elektrische Strom schnibbelt Kurven.



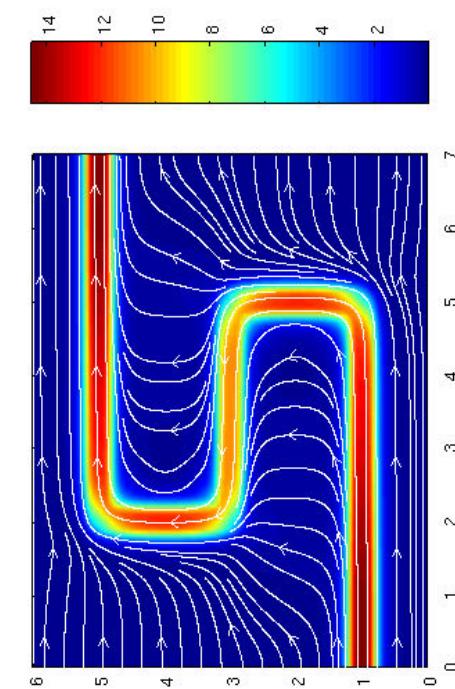
Man stelle sich das nebenstehende Rechteck als eine Platine vor mit einer S-förmigen Leiterbahn. Genauer besitze die Platine eine Beschichtung, welche entsprechend der Farbskala in den roten(blauen) Bereichen über eine hohe(niedrige) **elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$**  verfüge. Wie sieht der elektrische **Stromfluß  $\mathbf{j}$**  aus, wenn man an die linke bzw. rechte Seite ein elektrisches Potential von 3 Einheiten bzw. 1 Einheit, d.h. eine Potentialdifferenz (Spannung) von 2 Einheiten, anlegt? Da der Strom keine Ladungen anhäuft, wird er durch ein divergenzfreies Vektorfeld beschrieben, also  **$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$** . Diese Gleichung legt  **$\mathbf{j}$**  jedoch nicht eindeutig fest. Durch Rückgriff auf das **Ohmsche Gesetz** und die Darstellung der **elektrischen Feldstärke** vermöge des Gradienten einer **Potentialfunktion  $\mathbf{u}$**  gelangt man zu der Gleichung  **$\operatorname{div} (\sigma \operatorname{grad} \mathbf{u}) = 0$** , in welcher  **$\sigma$**  als gegebene Koeffizientenfunktion und  **$\mathbf{u}$**  als Unbekannte fungieren. Die Gleichung besitzt eine eindeutige Lösung  **$\mathbf{u}$** , wenn sie durch geeignete Randbedingungen ergänzt wird. Physikalisch motiviert sind **homogene Neumann Bedingungen** an den horizontalen Seiten (kein seitlicher Stromabfluß) sowie **Dirichlet Bedingungen** mit den Werten 3 (links) bzw. 1 (rechts) an den vertikalen Seiten, wo die Spannung angelebt wird.

Mittels **finiter Differenzen** lässt sich das Randwertproblem zu der obigen partiellen Differentialgleichung in ein lineares Gleichungssystem verwandeln, dessen Lösung eine näherungsweise Lösung des physikalischen Ausgangsproblems liefert. Die dreidimensionale Graphik, unterlegt mit einem Contour-Plot in der Grundebene, veranschaulicht das Potentialfeld  **$\mathbf{u}$** , welches sich beim Anlegen der Spannung auf der Platine einstellt.  **$\mathbf{u}$**  ist dabei auf einem 140x120 Gitter als Lösung eines Gleichungssystems mit 16800 Unbekannten berechnet worden. Deutlich sind die beiden Ränder zu erkennen, in denen  **$\mathbf{u}$**  die vorgeschriebenen konstanten Werte 3 bzw. 1 annimmt.

Die Fläche erinnert an zwei Haarnadelkurven wie man sie von Serpentinen kennt oder an ein Treppenhaus mit zwei Podesten, wobei die dritte Treppe nicht unter der ersten liegt -- eine solche Fläche kann übrigens nicht als Funktion dargestellt werden -- sondern seitlich versetzt ist. Es ist zu beachten, daß keine Punkte mit horizontaler Tangentialebene vorhanden sind; überall ist ein Gefälle vorhanden (**Maximumsprinzip**).



Aus dem Potential  **$\mathbf{u}$**  und der Leitfähigkeit  **$\sigma$**  läßt sich die Stromdichte  **$\mathbf{j} = \sigma \operatorname{grad} \mathbf{u}$**  berechnen. Im Gegensatz zu  **$\mathbf{u}$**  und  **$\sigma$**  ist  **$\mathbf{j}$**  ein Vektor, denn der Strom besitzt neben seiner Fließstärke auch eine Fließrichtung. Die nebenstehende Abbildung verdeutlicht erstere durch die Farbschattierung, letztere durch die pfeilbehafteten Linien. Im Unterschied zu ähnlichen Abbildungen ist die Dichte der Linien gleichmäßig gewählt und erlaubt keine Rückschlüsse auf die Stromstärke. Es ist klar zu erkennen, daß das Gros des Stromes wie erwartet der Leiterbahn folgt. Allerdings sind auch außerhalb der Leiterbahn schwache Stromstärken anzutreffen. Ein scharfer Blick enthüllt, daß der Strom die Kurven der Leiterbahn nicht gleichmäßig durchfließt. Stattdessen weisen die Innenkurven höhere Stromstärken auf als die blasser erscheinenden Außenkurven. Diese Beobachtung kann man als „Kurven-Schnibbeln“ interpretieren. Der Strom wählt immer den Weg des geringsten Widerstands, welcher innerhalb der Leiterbahn durch die kürzere Innenkurve als durch die längere Außenkurve gegeben ist. Abschließend sei darauf hingewiesen, daß es sich bei den Beobachtungen um die Konsequenzen eines mathematischen Modells handelt, welches das physikalische Phänomen des elektrischen Stromes gut beschreibt aber niemals vollends erfassen kann.



# Politik trifft Mathematik – Ein fiktives Interview

## Vom Dschungel der Differentialgleichungen

Martin Rheinländer

Auf einer interdisziplinären Tagung entwickelt ein **Politiker** einen **Mathematiker** in ein aufschlußreiches Gespräch.

**Die allgemeine Ratlosigkeit der Politik angesichts aktueller Probleme wird bedauerlicherweise immer offensichtlicher. Da wäre es höchst interessant, verehrter Professor, zu erfahren, wie in der Mathematik Probleme gemeistert werden. Vielleicht können wir von Ihnen lernen. Neulich erfuhr ich von schlimmen Gesellen, die im Dschungel der Differentialgleichungen ihr Unwesen treiben sollen und dort Unruhe stiftten. Von Separatisten und Autonomen war die Rede.**

Das klingt in der Tat durchaus bedrohlich; aber die Forschungsfront rückt unaufhaltsam weiter. Viele unsichere und verunsicherte Existenzien sind bereits zur Beruhigung aller Beteiligten eindeutig im festen Griff. Die Lösungsversuche verlaufen zwar nicht immer einmütig, aber bei maßvoller Beschränkung aller Seiten – ich meine hier vor allem auch die Rechte – lässt sich immer genau eine Lösung finden.

**Das klingt fast so, als ob von Links weniger zu befürchten wäre.**

$$\text{Allg. Form einer expliziten DGL 1. Ordnung} \quad x'(t) = F(t, x(t))$$

Lokaler Existenzsatz für Lösung des AWPs:

$$F \in C([a, b] \times [c, d]) \Rightarrow \\ \left[ \begin{array}{l} \forall t_0 \in (a, b), \forall x_0 \in (c, d), \exists \delta > 0, \exists x \in C^1((t_0 - \delta, t_0 + \delta)): \\ x(t_0) = x_0, \forall t \in (t_0 - \delta, t_0 + \delta) \quad x'(t) = F(t, x(t)) \end{array} \right]$$

Lokaler Existenz & Eindeutigkeitssatz (Picard-Lindelöf):

$$\begin{aligned} &\text{Es gebe eine Lipschitz-Schranke} \\ &\exists L > 0: \forall t \in [a, b], \forall x, y \in [c, d]: \|F(t, x) - F(t, y)\| < L \|x - y\| \\ &\Rightarrow \exists x \in C^1((t_0 - \delta, t_0 + \delta)) \text{ ist eindeutig!} \end{aligned}$$

Ein "Autonomer":  $x'' + \sin(x) - 2x x' = 0$

Autonomisierung

$$\begin{aligned} &\text{zeitabhängige Koeffizienten} \\ &x'(t) + a(t)x(t) = 0 \\ &\Leftrightarrow \\ &\left\{ \begin{array}{l} x_1'(t) + a(x_2(t))x_1(t) = 0 \\ x_2'(t) = 1 \end{array} \right. \\ &\text{zeitunabhängige Koeffizienten} \end{aligned}$$

Naja, es gibt auch Autonome, wie Sie vorhin schon selbst erwähnten. Wir Mathematiker haben ihre Autonomiebestrebungen näher beleuchtet und dabei schnell festgestellt, daß sie im wesentlichen nach ihren eigenen Gesetzen leben wollen. Dies ist ja die Bedeutung von *autonom*. Vor allem lehnen sie die Aufprägung äußerer, zeitlich bedingter Zwänge und Einflüsse ab. Diese Forderung wird oft mit dem Slogan *Invarianz unter Zeitverschiebungen* bezeichnet. Eigentlich eine sehr sinnvolle Idee, finden Sie nicht?

*Ich muß gestehen, mich dem Reiz dieses Gedankens nicht verschließen zu können. Die Schnellebigkeit unserer Zeit kommt den Grenzen des Menschen-Erträglichen bedenklich nahe, ganz zu schweigen von den ständig wechselnden Trends.*

Aus diesem Grunde gibt es in der Mathematik bereits ein simples Verfahren, welches bei Bedarf die Autonomisierung beliebiger Differentialgleichungen erlaubt.

*Man hat also den Geächteten eine Tugend abgewinnen können, die Vorbildcharakter zu haben scheint. Wie steht es aber mit den Separatisten. Ist man hier Herr der Lage.*

Absolut. Eigentlich handelt es sich bereits um ein Kapitel aus dem Geschichtsbuch, pardon, aus dem Lehrbuch. Trotz ihres manchmal wilden Aussehens lassen sie sich leicht zähmen, wenn man ihren separatistischen Tendenzen zunächst nachgibt. Bekanntlich sollte man Streithähne erst einmal auseinandernehmen. So nach Variablen getrennt lassen sich die Terme relativ leicht integrieren, anschließend werden sie durch umkehrabbildende Maßnahmen zu einer die Gleichung sowohl befriedenden wie befriedigenden Lösung wiedervereinigt.

*Wirklich eine äußerst effektive Methode der Konfliktbewältigung. Ich denke, unser Außenminister sollte davon schleunigst Kenntnis erhalten.*

Ein „Separatist“: $\frac{dx}{dt} = \sqrt{3t^4 - 2t + 4}(1+x(t)^2)$ Formale Lösung separabler DGLn: $\frac{dx}{dt} = \frac{f(t)}{g(x(t))}, \quad x(t_0) = x_0$	$g(x(t)) \frac{dx}{dt} = f(t)$ $\int_{t_0}^t g(x(\tau)) \frac{dx}{d\tau} d\tau = \int_{t_0}^t f(\tau) d\tau$ $\int_{x_0}^{x(t)} g(x) dx = \int_{t_0}^t f(\tau) d\tau$ $G(x(t)) - G(x_0) = F(t) - F(t_0)$ $x(t) = G^{-1}(F(t) - F(t_0) + G(x_0))$
---	--

Übrigens, ich vergaß anzumerken, daß die heutige geläufige Namensgebung die entschärfte Lage berücksichtigt. Deshalb sprechen wir nicht mehr von separatischen sondern von separablen Differentialgleichungen bzw. von Differentialgleichungen mit getrennten Veränderlichen.

*Welchen Stand hat denn die allgemeine Gleichberechtigung erreicht?*

Nun, Gleichberechtigung ist im Zusammenhang mit Gleichungen eine naheliegende Frage. In sozialer Hinsicht sind dank des Reduktionsverfahrens die einstmaligen Klassengrenzen niedergeworfen. Es ist ein allseits anerkanntes und leicht beweisbares Faktum, daß sich hinter jeder *Gleichung höherer Ordnung* stets ein *System erster Ordnung* verbirgt. Somit sind heute vom Standpunkt der Ordnung sämtliche Differentialgleichungen zumindest formal gleichgestellt.

### Reduktionsverfahren

Gleichung 2. Ordnung:  $x'' + ax' + bx = q$

$$\begin{aligned} \text{Setze } & \begin{cases} u := x(t) \\ v := x'(t) \end{cases} \\ \Rightarrow \text{System 1. Ordnung: } & \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -av - bu & q \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Numerisches Lösungsverfahren zu } & x' = F(t, x(t)) \\ \rightarrow & x_{n+1} = x_n + \Delta t F(t_n, x_n) \end{aligned}$$

**Was die Kenntnis von Lösungen anbetrifft, waren bis in die Mitte des letzten Jahrhunderts hinein große Unterschiede vorhanden, da analytische Methoden nur für recht spezielle Gleichungen vorbehalten bleiben. Das Computerzeitalter und die stürmische Entwicklung numerischer Verfahren ermöglichen jedoch endlich die prinzipielle Berechnung von Lösungen x beliebiger Differentialgleichungen.**

**Ihre sozialen Errungenschaften klingen wirklich famos. Aber eine Diskussion bezüglich Homos und Heteros etc., wird die unter den Differentialgleichungen auch in ähnlicher Weise geführt wie bei uns?**

Selbstverständlich wird dieser Konflikt nicht ausgeklammert. Sind alle Terme insbesondere bei einer linearen Gleichung in dem Sinne „gleichartig“, daß sie die Unbekannte enthalten, so spricht man von einer *homogenen* andernfalls von einer *inhomogenen* Gleichung. Tatsächlich treten die Inhomogenen in weit größerer Vielfalt auf und pochen auf die *Variation der Konstanten*, während die Homogenen am *Fundamentalsystem* festhalten. Daneben gibt es noch die Sekte der *Euler-homogenen* Differentialgleichungen, welche Abtreibungen – Verzeihung, ich meinte Ableitungen – ausschließlich bei begleitender Applikation geeigneter Potenzmittel zur Art-, pardon *Graderhaltung*, akzeptieren. Tja, auch die Differentialgleichungen sind ein sehr heterogenes Völkchen, wie Sie sehen.

Ich sollte darauf hinweisen, daß eine präzise Klassifikation der Differentialgleichungen die mathematische Version einer politisch korrekten Ausdrucksweise ist, welche insbesondere von den Novizen, unseren Studierenden, erwartet wird. Korrekte Namensbezeichnungen sind nicht nur eine Frage des Anstands sondern unterstützen das strukturelle Denken. Mitunter ist es sogar wie bei einer Fahndung der Kriminalpolizei – da zählt jede Information und Namen helfen oft weiter. Sie können vor allem nützliche Indikatoren sein, was den Einsatz bestimmter Lösungsmethoden anbelangt.

**Wenn mir auch die mathematische Fachbildung fehlt, um Ihnen vollends zu folgen, so klingt Ihre Analogie durchaus plausibel.**

$\text{homogenes AWP}$ $\begin{cases} X(t_0) = I \\ X'(t) + A(t)X(t) = 0 \end{cases}$ <p>für Fundamentalmatrix <math>X</math></p>	$\text{inhomogenes AWP}$ $\begin{cases} y(t_0) = y_0 \\ y'(t) + A(t)y(t) = q(t) \end{cases}$	<p>Lösungsansatz mittels Variation der Konstanten :</p> $y(t) = X(t)c(t) \Rightarrow c(t_0) = y_0 \wedge c'(t) = X^{-1}(t)q(t)$ $c(t) = y_0 + \int_{t_0}^t X^{-1}(\tau)q(\tau)d\tau$ $y(t) = X(t)y_0 + X(t)\int_{t_0}^t X^{-1}(\tau)q(\tau)d\tau$
---	--	---

Gestatten Sie eine letzte Frage mit Blick auf das stagnierende Wirtschaftswachstum bzw. die konstant hohe Arbeitslosenquote. Wo setzen Sie Ihre Schwerpunkte und welche Hinweise hätten Sie ggf. für unsere Wirtschafts- und Arbeitsminister parat.

Wachstum ist auch in der Mathematik von Interesse. So werden Lösungen von Differentialgleichungen auf ihre Wachstumseigenschaften hin analysiert. Man klassifiziert z.B. **asymptotisch beschränktes, lineares, polynomiales** und **exponentielles Wachstum**. Doch bereits ein harmlos wirkender quadratischer Reaktionsterm impliziert eine Lösung, welche in endlicher Zeit unendlich wächst. Überschnelles Wachstum hat damit ein explosionsartiges, jähes Ende zur Folge.

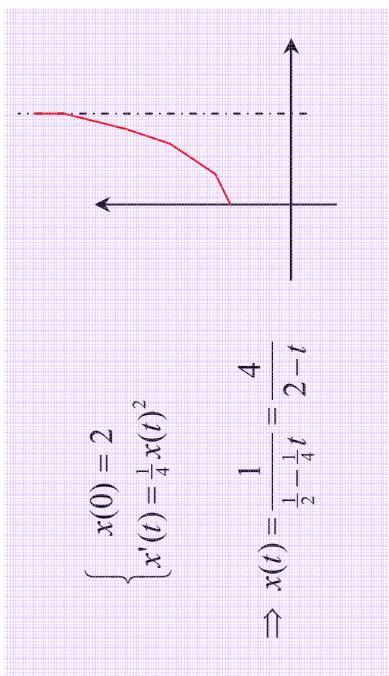
Vom Standpunkt der Mathematik ist der Begriff **Stabilität** von zentraler Bedeutung. Dieser spielt bei der Beurteilung von Modellgleichungen, Lösungsverfahren usw. eine wichtige Rolle und wird ausgiebig untersucht. Gleichungen, Verfahren usw. zu stabilisieren ist Aufgabe und Herausforderung vieler Mathematiker.

Was das Thema Arbeit anbetrifft, so gibt es unter den bekannten Differentialgleichungen fast Vollbeschäftigung. Man muß nur bereit sein, sie einzusetzen bzw. sich mit ihnen intensiv zu beschäftigen. Viele kommen in Forschung und Lehre zum Einsatz. Bei weitem am nutzbringendsten erweisen sie sich, wenn man sie auch außerhalb der Mathematik arbeiten läßt. Ingenieure und Naturwissenschaftler aber auch Ökonomen schätzen sie als gute Mitarbeiter. Fast überall wo heutzutage ernsthaft gerechnet wird, sind sie mit von der Partie.

*Ich bin wirklich zutiefst beeindruckt und danke Ihnen für die Einblicke, die Sie mir gewähren konnten. Bei Gelegenheit werde ich im Bundestag dezent auf Ihre Äußerungen hinweisen.*

Im Laufe der Konferenz ergab sich eine Fortsetzung dieses Austauschs, und beide wurden sich sogar eines gemeinsamen Prinzips bewußt. Konkrete Veränderungen ebenso wie konkrete Berechnungen erfordern oftmals ein sehr diskretes Vorgehen sei es im diplomatischen oder mathematischen Sinne.

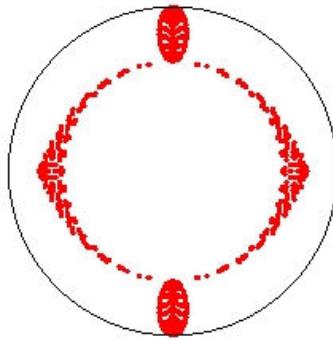
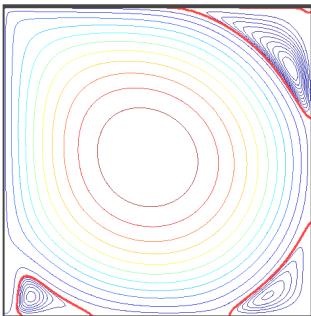
Zum Erstaunen des Politikers hatte der Mathematiker noch mehr zu erzählen; von **konservativen Feldern, Potentialen, integrierenden Faktoren, Propagandisten alias Propagatoren und Radikalen**. Auch wußte er von **Faktionen, Gruppen, Verbänden und anderen Körperschaften** zu berichten. Doch wollen wir es für heute hiermit bewenden lassen.



# Zwischen Anschaung und Abstraktion

## Computer-Simulationen mit bol(t)zenden Teilchen

Martin Rheinländer



Gebannt starre ich auf den Bildschirm, während eine bohrende Frage durch meinen Kopf jagte: „Würde es diesmal klappen?“ Beinahe unmerklich veränderte sich nach jedem Tastendruck das Diagramm auf dem Monitor. Wie erhofft rutschte die Fehlerkurve langsam abflachend nach rechts. Ich spürte, wie ein Anflug von Jubel in mir aufsteigen wollte, allein der Verstand weigerte sich, diesem nachzugeben. Unwillkürlich erhöhte sich meine Klickfrequenz, bis ich die Eingabetaste dauerhaft niederdrückte. In rasantem Tempo durchlief der Computer jetzt die Zeitschritte. Nur kurz flackerten die zugehörigen Diagramme auf, so daß die Fehlerkurve wie ein schwingendes Seil zu tanzen begann. Ein plötzliches Zucken meiner Hand ließ den Iterationszähler zum Stillstand kommen. Eine kleine Unebenheit in der Kurve war raketenhaft emporgeschossen und hatte ein chaotisches Gezappel ausgelöst. Einen kurzen Moment hielt ich inne. Ein Programmierfehler war ausgeschlossen. Folglich blieb nur die niederschlagende Erkenntnis, daß sich das soeben getestete Programm nicht in der gewünschten Weise verhielt. Wo lag bloß die Ursache für sein instabiles Verhalten? Die zugrunde liegende Idee schien keineswegs abwegig, basierte sie doch auf plausiblen Analogieschlüssen. Während der folgenden Tage keimte ein kritisches Hinterfragen. Hatte ich wirklich verstanden, was mein Algorithmus im Verborgenen trieb? Tatsächlich entpuppt sich Verständnis - die oftmals eingebildete Gewißheit über bestimmte Zusammenhänge - als eine sehr relative Angelegenheit. Frei nach Sokrates fängt wahres Verständnis damit an, deutlich abzugrenzen, was man nicht versteht.

Doch worum geht es konkret? Bevor ich zu meinem Problem zurückkehre, ist es notwendig, etwas auszuhören, um den Kontext zu erläutern. Betrachten wir zunächst als illustrierendes Beispiel die Umströmung eines Flugzeugs. Hierbei handelt es sich um einen physikalischen Vorgang, der für den notwendigen Auftrieb sorgt, jedoch bei weitem mehr Komplexität birgt, wenn man an Verwirbelungen und Turbulenzen denkt. Wie lässt sich ein solcher Prozess berechnen und simulieren, um ihn besser zu verstehen oder gar zu kontrollieren? Eine generelle Strategie zum Durchdringen einer komplizierten Struktur besteht darin, diese in überschaubarere Teilstrukturen zu zerlegen.

Um dieser Vorgehensweise zu folgen, sei daran erinnert, daß Luft mikroskopisch gesehen aus herumschwirrenden Molekülen besteht. Da hier allein mechanische Wechselwirkungen im Vordergrund stehen, ist es ausreichend, sich die Moleküle als winzige Kügelchen vorzustellen. Demnach lässt sich die Umströmung als ein dreidimensionales Billardspiel begreifen, bei dem das Flugzeug als reflektierende Bande für die miteinander kollidierenden Luftteilchen fungiert. Die Auftriebskraft kommt dadurch zustande, daß die Tragflächen eine besondere Strömung erzwingen, welche die Teilchen stärker gegen ihre Unter- als Oberseite prasseln lässt. Der Knackpunkt, warum nur eine spezielle Formgebung der Flügel die Teilchen veranlaßt, gerade in dieser Weise zu strömen, bleibt damit unbeantwortet.

Trotzdem haben wir eine wertvolle Einsicht gewonnen. Der komplizierte Umströmungsprozess ergibt sich als Summe ungleich einfacherer Prozesse, bestehend aus Stößen der Teilchen und ihrem Abprallen an der Flugzeugwand. Da Computer spielend mit großen Datemengen umgehen können, wie sie bei der Vielzahl der Teilchen anfallen, scheint es, als ob wir unser Problem zur endgültigen Lösung nur in sie hineinzufüttern bräuchten. Leider macht uns hier die Natur einen Strich durch die Rechnung. Nicht, daß es unmöglich wäre, Computer genau zu instruieren, wie sie die Teilchenstöße im Detail zu berechnen haben, nein, es sind einfach zu viele Teilchen im Spiel, vor deren schierer Unmenge selbst Höchstleistungsrechner kapitulieren müssen.

Daß unser Lösungsansatz so prompt scheitert, ist nicht verwunderlich. Schließlich schickten wir uns an, weit mehr Information zu berechnen als jedes praktische Interesse benötigt. Wen kümmert das genaue Verhalten von Teilchen XY? Die gigantische Anzahl der Teilchen degradiert jedes einzelne zur Belanglosigkeit. Tatsächlich können wir unsere Situation mit einer Bevölkerungsumfrage vergleichen. Dabei interessieren letztendlich keine Einzelmessen sondern statistische Mittelwerte. Außerdem ist es gar nicht notwendig, wirklich jeden Bürger zu befragen; es genügt eine repräsentative Stichprobe. Aus vergleichsweise wenigen Umfragen ergibt sich schließlich die Meinung von Otto Normalverbraucher, einer nicht-realnen Person mit starker Aussagekraft.

Ganz ähnlich läßt sich die Anzahl der Teilchen drastisch reduzieren, ohne einen wesentlichen Informationsverlust hinnehmen zu müssen. Eine weitere radikale Vereinfachung besteht darin, die nunmehr fiktiven Teilchen einer ebenfalls künstlichen Dynamik zu unterwerfen. Durch die Reduktion auf wenige zulässige Bewegungsrichtungen mit fester Geschwindigkeit, erreicht man, daß sich die Teilchen auf einem dreidimensionalen Gitter bewegen. Nach bestimmten Regeln ereignen sich die Stöße immer gleichzeitig in den Kreuzungspunkten der Gitterlinien bzw. in ihren Schnittpunkten mit der Außenwand des umströmten Objekts.

Die getaktete Abfolge simultaner Stoß- und Flugphasen, wie eben angedeutet, entspricht der prinzipiellen Funktionsweise einer ganzen Klasse numerischer Verfahren, welche dazu eingesetzt werden, Probleme der Strömungsmechanik näherungsweise mit Computern zu lösen. Obwohl die Grundidee auf den im 19. Jahrhundert wirkenden Physiker Ludwig Boltzmann zurückgeht, daher der Name Gitter-Boltzmann Methoden, sind die Verfahren noch nicht einmal 20 Jahre alt. Somit sind sie deutlich jünger als vergleichbare Standardverfahren, die auf ganz anderen Ansätzen beruhen. Zunehmender Beliebtheit erfreuen sich Gitter-Boltzmann Methoden vor allem ob ihrer guten softwaretechnischen Umsetzbarkeit und einer scheinbar weniger mathematisch als anschaulich verwurzelten Herleitung.

Worin bestand nun mein eingangs erwähntes Problem? Rekapitulieren wir dazu die obigen Betrachtungen auf einer abstrakteren Ebene. Unser Ziel ist es, das Verhalten eines realen Systems A, wie der Strömung von Fluiden, zu berechnen. Ausgehend von dem physikalischen Teilchenmodell, das für eine direkte Berechnung unbrauchbar ist, sind nun schrittweise Vereinfachungen zu vollziehen. Dabei durchläuft man in etlichen Zwischenetappen weitere Modelle höchst unterschiedlicher mathematischer Natur, bis man bei einem System B anlangt, dem Gitter-Boltzmann Verfahren. Dieses numerische Schema ist nun so beschaffen, daß es auf einem Computer implementiert werden kann.

Der Weg von A nach B und B selbst sind keineswegs zwingend. Beim Übergang muß man sich vor allem von Intuition inspirieren lassen. Trotz der angestrebten starken Parallelien zwischen A und B, entfaltet das fiktive System B sein Eigenleben. Die Grenze zwischen gleich- und andersartigem Verhalten ist oftmals schwer zu überblicken. Versucht man B zu modifizieren, wie ich es tat, um bestimmte Eigenschaften zu verbessern oder zusätzlich einzubauen, können unerwartete wie unerwünschte Reaktionen die Folge sein, wenn man sich dabei vor allem an dem physikalischen Ausgangssystem A orientiert. Genau an dieser Stelle lag mein Verständnisproblem; ich handelte in B, dachte aber in A. Intuition und Analogiedenken dienen jedoch nur als Leitfaden, und dürfen nicht überdehnt werden.

Während man bereitwillig löchrige Erklärungen akzeptiert, solange Erwartungen nicht enttäuscht werden, wecken gegenteilige Erfahrungen Fragen. So begründet die Herleitung der Gitter-Boltzmann Verfahren keinesfalls in einem mathematisch präzisen Sinne, warum sie funktionieren. Ein tieferes Verständnis erreicht man allerdings nicht, indem man versucht, die intuitiven Schritte der Herleitung kramphaft zu rechtfertigen. Der springende Punkt besteht darin, die Sichtweise umzudrehen, Gitter-Boltzmann Verfahren aus ihrem ursprünglichen Umfeld herauszulösen und sie als eigenständige Systeme mathematisch zu analysieren.

Dieser Aufgabe ist meine Dissertation gewidmet. Dazu habe ich spezielle Gitter-Boltzmann Verfahren ausgewählt, die einerseits hinreichend elementar sind, um sie mathematisch vollständig zu durchdringen, andererseits charakteristische Merkmale anwendungssrelevanter Gitter-Boltzmann Verfahren enthalten. Unter anderem lassen sich sogenannte Konvergenzaussagen beweisen. Darunter versteht man mathematische Sätze, die genau spezifizieren, unter welchen Umständen und in welcher Weise die Verfahren der physikalischen Realität nahe kommen, wobei das schwammige Wörtchen Realität einer vorausgehenden, strengen Präzisierung zu unterziehen ist. Die weniger gewünschten aber teilweise unvermeidbaren Eigenarten der Gitter-Boltzmann Verfahren äußern sich im Diskretisierungsfehler, in Anfangs- und Randschichten sowie Instabilitäten und treten als numerische Störeffekte bei Simulationen auf. Hierzu habe ich ebenfalls Untersuchungen durchgeführt und Werkzeuge entwickelt, mittels derer das Verhalten der Modellverfahren theoretisch vorhergesagt werden kann.

Nunmehr vertraut mit der Andersartigkeit der Gitter-Boltzmann Welt und ausgerüstet mit erprobten Werkzeugen zur systematischen Analyse, ist es Zeit, der Intuition wieder freien Lauf zu lassen, jenem zunächst unscharfen Denken, dem sich viele weiterbringende Ideen verdanken. Folgearbeiten zur Verbesserung der Gitter-Boltzmann Verfahren sind bereits abgeschlossen bzw. noch im Gange. Ob bei genauerer Anfangs- und Randbedingungen oder Gitterkopplungen, in vielen Fällen sind ähnliche Probleme zu meistern. So lassen sich aus den Parametern der fiktiven Teilchen eindeutig die physikalisch relevanten Größen berechnen, umgekehrt aber ist die Eindeutigkeit verloren. Dies jedoch ist eine andere Geschichte.