Zur theoretischen Absicherung moderner numerischer Verfahren für hyperbolische Erhaltungssätze

Sebastian Noelle

Öffentliche Antrittsvorlesung an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrichs-Wilhelms-Universität Bonn

Sehr geehrte Damen und Herren,

Ich möchte versuchen, Ihnen heute eine Reihe von Fragen, die Mathematiker in meinem Arbeitsgebiet beschäftigen, ein wenig näherzubringen.

Wenn man Nicht-Naturwissenschaftlern erzählt, daß man mathematische Forschung betreibt, wird einem oft die etwas ungläubig erstaunte Frage gestellt: Woran kann man denn in der Mathematik noch forschen? Ist dort nicht alles schon bekannt?

Nun, das uns bekannte, gesicherte mathematische Wissen ist tatsächlich zeitlos. Vielleicht wird es einmal vergessen werden, verschüttet von den uns ununterbrochen überrollenden Informationslawinen, aber es wird niemals widerlegt werden können.

Aber wie entsteht neue Mathematik? Woher kommen die Fragen, die uns Mathematiker umtreiben, die uns nicht loslassen, und deren Beantwortung uns beglückt?

Ich möchte zwei Arten von Fragen unterscheiden:

Die einen stellen sich, wenn man versucht, eine Mathematik zu entwickeln, die zum Verständnis der uns umgebenden Natur beitragen kann. Die anderen Fragen ergeben sich aus der inneren Logik der Mathematik selbst.

Eines der berühmtesten Beispiele hierzu ist die Fermatsche Vermutung aus dem 17. Jahrhundert: sei n eine natürliche Zahl größer oder gleich drei. In einer Notiz am Rande eines Buchmanuskripts stellte der französische Mathematiker Fermat die Behauptung auf, daß es keine ganzen Zahlen a, b und c geben könne, welche die Gleichung

$$a^n + b^n = c^n$$

erfüllen. Er schrieb noch dazu, daß er einen einfachen Beweis dieser Tatsache gefunden habe, daß aber der Platz am Rande des Manuskripts leider nicht ausreiche, ihn zu Papier zu bringen.

Wahrscheinlich hatte sich Fermat damals geirrt, und sein Beweis war noch nicht ganz vollständig. Jedenfalls haben Generationen von Mathematikern über dreihundert Jahre lang versucht, die Fermatsche Vermutung zu beweisen. Dabei haben sie ein fast unübersehbares Theoriegebäude geschaffen, das zwar eine Vielzahl von Fragen beantwortet, aber eben nicht die so einfach scheinende Ausgangsfrage selbst. Den Durchbruch schaffte erst Andrew Wiles von der Princeton University in den Jahren 1993 und 1994.

Ein anderes Beispiel ist die Quadratur des Kreises: konstruiere zu einem gegebenen Kreis allein mit Zirkel und Lineal ein Quadrat gleichen Flächeninhalts. An dieser Aufgabe verzweifelten schon die alten Griechen, und wir wissen seit dem 17. Jahrhundert, daß sie mit endlich vielen Konstruktionsschritten auch gar nicht lösbar ist, weil nämlich die Kreiszahl π nicht rational ist, sich also nicht durch das Verhältnis zweier ganzer Zahlen ausdrücken läßt.

Führen solche Fragen zu einem immer komplizierteren, barockeren Ausbau unseres Elfenbeinturmes in schwindelerregende Höhen, so führen die uns von anderen Disziplinen gestellten Probleme zu einer Verbreiterung der Basis der Mathematik. So haben sich in den vergangenen Jahrzehnten die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik, die Theorie der dynamischen Systeme und das wissenschaftliche Rechnen fest als Teildisziplinen der Angewandten Mathematik etabliert. Hinzukommen wird eine moderne Finanzmathematik.

1 Mathematik als Sprache der Physik: die Formulierung der Naturgesetze

Mein eigenes Arbeitsgebiet sind die partiellen Differential-Gleichungen und deren Numerik.

Die meisten der physikalischen Gesetze lassen sich als Differential-Gleichungen schreiben, und auch in den anderen Naturwissenschaften und der Ökonomie spielen diese Gleichungen eine wichtige Rolle.

Lassen Sie mich als Beispiel einer solchen Gleichung das Bewegungsgesetz der klassischen Mechanik diskutieren, welches Isaac Newton im Jahre 1687 formulierte. Es besagt, daß

$$\text{Kraft} = \text{Masse} \times \text{Beschleunigung}$$

ist. Warum ist dieses Gesetz eine Differential-Gleichung?

Nehmen wir an, daß wir die Geschwindigkeit eines Körpers zu zwei verschiedenen Zeitpunkten messen. Ist sie unterschiedlich groß, so ist der Körper in der Zwischenzeit entweder beschleunigt oder verlangsamt worden. Die Größe der Beschleunigung hängt nun nicht nur von der Differenz der beiden Geschwindigkeiten ab, sondern auch vom zeitlichen Abstand, der Differenz der Zeitpunkte, zu denen wir die Geschwindigkeiten gemessen haben. Ein Porsche, der in fünf Sekunden von null auf hundert Stundenkilometer gelangt, beschleunigt stärker als ein VW-Käfer, dem das vielleicht erst in zwanzig Sekunden gelingt. Die Beschleunigung definieren wir also als die Rate, mit der sich die Geschwindigkeit in der Zeit verändert.

Diesen Zusammenhang drückt man mathematisch aus, indem man die Differenz der gemessenen Geschwindigkeiten durch die Differenz der Zeitpunkte, zu denen sie gemessen wurden, dividiert. Das nennt man dann einen Differenzenquotienten. Viele von Ihnen werden sich aus der Schul- oder Studienzeit an diesen Begriff erinnern.

Der aus Messungen zu zwei verschiedenen Zeitpunkten berechnete Differenzenquotient allein gibt aber noch keine befriedigende Definition der Beschleunigung in einem einzigen Zeitpunkt. Man weiß nämlich nicht, wie sich der Körper in der zwischen den beiden Messungen liegenden Zeit bewegt hat. Stellen Sie sich ein Kind vor, daß in jeder Sekunde drei Schritte geht, zwei vor, einen zurück, zwei vor, einen zurück .... Jeder der Schritte sei einen halben Meter lang. Im Mittel bewegt sich das Kind mit einer Geschwindigkeit von einem halben Meter pro Sekunde vorwärts. Je nachdem, zu welchen Zeitpunkten wir es beobachten, kann es sich aber auch gerade mit einer Geschwindigkeit von anderthalb Metern pro Sekunde vor oder zurück bewegt haben.

Um nun also von anderen Größen abgeleitete Eigenschaften wie die Geschwindigkeit oder die Beschleunigung in einem einzigen Zeitpunkt definieren zu können, haben Mathematiker und Physiker wie Leibnitz und Newton ein Gedankenexperiment durchgeführt: dabei vergleicht man die Zustände eines Körpers an immer näher beieinander liegenden Zeitpunkten, deren Differenz schließlich unendlich klein, wir sagen infinitesimal wird. Nähern sich die dabei berechneten Differenzenquotienten einem einzigen Grenzwert an, so bezeichnet man diesen als Ableitung oder Differential. Die Beschleunigung ist also die Ableitung der Geschwindigkeit nach der Zeit. Deshalb ist das Newtonsche Gesetz eine Differential-Gleichung.

Nebenbei gesagt müssen Ableitungen längst nicht für alle Funktionen existieren. Es können zum Beispiel auch Oszillationen auftreten. Das beschriebene Kinderspiel deutet das bereits an.

Ich selber beschäftige mich mit Problemen aus der Kontinuumsmechanik. Wie der

Name schon sagt, geht es dabei nicht um einzelne Massenpunkte, die vielleicht eine Idealisierung von Planeten oder Molekülen darstellen, sondern um als kontinuierlich gedachte Strömungen wie die von Luft oder Wasser. Auch das Kontinuum ist natürlich eine Idealisierung.

In diesem Fall sagen grundlegende physikalische Prinzipien,

1. daß Masse weder vernichtet noch erzeugt wird,
2. daß die Strömung durch die auf sie wirkenden Kräfte beschleunigt oder verlangsamt wird und
3. daß die gesamte Energie sich proportional zu der Arbeit ändert, die von den vorhandenen Kräften geleistet wird.

Das führt zu sogenannten Erhaltungssätzen, im Falle von Strömungen zum Massen-, Impuls- und Energieerhaltungssatz. Dabei entspricht der Impulserhaltungssatz gerade dem Newtonschen Bewegungsgesetz.

Um diese Gesetze mit Leben zu erfüllen, muß man untersuchen, von welcher Art die auf die Strömung wirkenden Kräfte denn sind. Eine Kraft, die man fast nie vernachlässigen kann, ist der Druck, genauer gesagt, der Gradient des Druckes. Ist eine Flüssigkeit in einem Bereich stärker komprimiert als in dessen Umgebung, besteht also ein Druckgefälle, so wird die Strömung in Richtung des abfallenden Gradienten beschleunigt. Eine weitere Kraft, die so gut wie immer vorhanden ist, manchmal aber sehr klein sein kann, ist die Reibung. Diese bewirkt, daß eine sich schnell bewegende Strömungsschicht von der sie umgebenden langsameren Strömung abgebremst wird. An den Rändern entstehen Wirbelschichten.

Die Erhaltungssätze für eine Strömung mit Druck- und Reibungskräften werden Navier-Stokes-Gleichungen genannt. Ich möchte Ihnen diese Gleichungen kurz zeigen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) &= 0 \\ \frac{\partial (\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \times v) &= \nabla \cdot T \\ \frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e v) &= \nabla \cdot (T v). \end{aligned}$$

Dabei ist

$$T := (-p + \lambda \nabla \cdot v) I + 2\mu D$$

der Spannungstensor, welcher Druck- und Reibungskräfte beschreibt. λ und μ sind Konstanten, die die Größe der Reibungskräfte beschreiben.

Sie sehen, in welcher Kürze diese komplexen Naturgesetze formuliert werden können, welch hohe Sprachkultur hier in den vergangenen Jahrhunderten entwickelt wurde.

Vernachlässigt man die Reibungskräfte, setzt also

$$\lambda = \mu = 0,$$

so gelangt man zu den Euler-Gleichungen.

Die Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen bilden Systeme von Differential-Gleichungen, weil mehrere Größen, nämlich die Massendichte, die Geschwindigkeit und der Druck miteinander in Wechselwirkung treten. Sie sind nichtlinear, weil sie Produkte dieser Größen enthalten. Beides hat weitreichende mathematische und physikalische Konsequenzen. Anders als bei linearen Gleichungen ist die Schallgeschwindigkeit hier nicht konstant, sondern hängt vom vorliegenden Druck und der Dichte ab. Deshalb überlagern sich Wellen nicht mehr ungestört.

Da es eine Vielzahl von Differential-Gleichungen gibt, die zu vollkommen unterschiedlichen Phänomenen führen, werden diese Gleichungen in verschiedene Klassen eingeteilt.

Gleichungen, welche Wellenbewegungen beschreiben, die nicht von Reibungskräften gedämpft werden, nennt man hyperbolisch. Bei den Euler-Gleichungen, die die Erhaltung von Masse, Impuls und Energie beschreiben, handelt es sich um ein System hyperbolischer Erhaltungssätze. Andere hyperbolische Erhaltungssätze sind die Wellengleichung, die z.B. eine schwingende Saite beschreibt, und die Gleichungen der Einsteinschen Relativitätstheorie.

Damit habe ich Ihnen die letzten beiden im Titel des heutigen Vortrages auftretenden Worte erklärt.

2 Die mathematische Analysis als philosophisch-kritische Überprüfung der Naturgesetze

Mit der Aufstellung der Naturgesetze und der Definition ihres jeweiligen Gültigkeitsbereiches haben die Physiker einen wichtigen Teil ihrer Arbeit geleistet. Falls sich ein Experiment oder allgemeiner gesagt ein Naturereignis im Rahmen der von der Theorie geforderten Annahmen abspielt, so hoffen sie, ihre Beobachtungen mit Hilfe der Gesetze erklären zu können. Ja, sie sind der Überzeugung, daß die Zukunft aus diesen Gesetzen vorhersagbar sei.

Die mathematische Analysis versucht, diese Überzeugung kritisch zu überprüfen.

Dabei kann die Mathematik als in sich abgeschlossene, rein formal-logische Wissenschaft natürlich nicht beurteilen, ob die physikalischen Gesetze die Natur richtig beschreiben. Was wäre auch die Natur? Können wir sie erkennen? Was hieße richtig?

Stattdessen fragen wir, ob die Naturgesetze in sich widerspruchsfrei sind. Sind sie überhaupt erfüllbar, und wenn ja, sind sie vollständig in dem Sinne, daß ihre Lösungen eindeutig charakterisiert sind?

Man könnte sagen, daß die mathematische Analysis die Frage zu beantworten versucht, ob es überhaupt eine Welt geben könnte, die von den Naturgesetzen regiert würde. Damit meinen wir natürlich eine mathematische Welt, bevölkert von abstrakten Größen. Stehen in der Strömungsmechanik z.B. die Dichte, die Geschwindigkeit und der Druck für die vom Physiker oder Ingenieur gemessenen Größen, so sind sie für den Mathematiker nichts weiter als abstrakte Abbildungen, wir sagen auch Funktionen, die einem Punkt (x, t) in der Raum-Zeit einen Zahlenwert zuordnen.

Diese Funktionen müssen nun so beschaffen sein, daß sie die gegebene Differential-Gleichung und vorgegebene Daten erfüllen. Die Daten beschreiben dabei fest vorgeschriebene Werte, die z.B. der Ausgangssituation eines Experiments entsprechen. Solche Funktionen würde man dann als Lösung eines gegebenen Anfangswertproblems bezeichnen.

Die klassische Fragestellung der mathematischen Analysis ist also die nach der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der physikalischen Gesetze. Damit eine Funktion aber überhaupt Lösung einer Differential-Gleichung im eigentlichen Sinne sein kann, muß sie differenzierbar sein, d.h. eine gewisse Regelmäßigkeit oder Glattheit besitzen. Diese Forderung führt für viele nichtlineare Probleme aber schnell zu inneren Widersprüchen. Bereits im Jahre 1860 konstruierte Bernhard Riemann für die Gasdynamik Schallwellen, die sich ohne jede äußere Einwirkung, allein aufgrund des ihnen eigenen nichtlinearen Bewegungsgesetzes, brechen müssen. Solche Wellen sind keine exotischen Ausnahmen, sie stellen im Gegenteil den typischen Fall dar.

Sobald sich Wellen gebrochen haben (man spricht dann von Stoßwellen), besitzen die mathematischen Funktionen dort Sprünge, die wir auch Unstetigkeiten nennen. Sie sind schon gar nicht mehr differenzierbar. Unsere Gleichung, das Naturgesetz ist im klassischen Sinne nicht mehr erfüllt.

Die Mathematiker haben sich an dieser Stelle aber nicht damit begnügt, die Gesetze der Kontinuumsmechanik für gescheitert zu erklären und sich selbstzufrieden zur Ruhe zu setzen. Nein, dieses und ähnliche Probleme bilden geradezu den Ursprung der modernen Analysis.

In den vergangenen 50 bis 100 Jahren wurde ein umfangreicher, höchst subtiler Begriffsapparat aufgebaut, um die Regelmäßigkeit oder Regularität von Funktionen messen zu können.

Anstatt zum Beispiel Eigenschaften wie die Stetigkeit oder Differenzierbarkeit in jedem einzelnen Punkte zu fordern, genügt es oft, diese Eigenschaften nur in einem gewissen gemittelten Sinne zu verlangen. Abweichungen von der geforderten Regularität werden dabei auf sehr kleinen Mengen bewußt zugelassen. In den vergangenen Jahren werden auch oft Funktionen betrachtet, die einem Punkt nicht mehr einen festen Zahlenwert zuordnen, sondern nur noch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung von Werten.

Hat man den Funktionsbegriff einmal genügend erweitert, so ist es viel leichter, Lösungen einer Differential-Gleichung zu konstruieren. Die so entstehenden allgemeineren, wir sagen schwächeren Lösungen enthalten aber auch weniger Information. Deshalb ist es wichtig, ihre Eigenschaften genauer zu beschreiben und insbesondere ihre Regularität möglichst optimal zu charakterisieren. Im besten Fall möchte man zeigen, daß es zu gegebenen Anfangsdaten genau eine Lösung geben kann. Nur dann kann man nämlich aus den Naturgesetzen Zukunft vorhersagen.

Um ihnen einige der großen, bis heute zum Teil ungelösten Probleme ein wenig vor Augen zu führen, lassen Sie mich kurz den Stand der mathematischen Forschung für die Euler-Gleichungen der Gasdynamik, das heißt die Erhaltungssätze für reibungsfreie Strömungen, zusammenfassen:

In den 60er Jahren gelang es James Glimm vom Courant Institut, die Existenz von Lösungen zu zeigen, deren Anfangsdaten nur wenig von einem festen konstanten Zustand abweichen. Außerdem dürfen diese Daten nur in einer der drei Raumrichtungen überhaupt variieren. Erst Anfang der 90er Jahre, fast 30 Jahre später, konnte Alberto Bressan aus Triest die Eindeutigkeit dieser Lösungen zeigen. Variieren die Daten aber in mehr als einer der drei Raumrichtungen, so ist man weit von einer allgemeinen Existenztheorie entfernt, und es besteht noch keine vollständige Klarheit darüber, in welchen Funktionenräumen man überhaupt nach Lösungen suchen soll.

Nimmt man hingegen Reibungskräfte hinzu, betrachtet also die Navier-Stokes-Gleichungen, so ist die Situation weitaus besser. Eine allgemeine Existenztheorie wurde in den vergangenen Jahren von Pierre-Louis Lions aus Paris entwickelt. Die Frage der Eindeutigkeit ist aber auch hier in den meisten Fällen noch ungeklärt.

Selbst für die Gleichungen der klassischen Mechanik sind also grundlegende mathematische Fragen noch vollkommen offen. Noch viel größere Schwierigkeiten treten in der allgemeinen Relativitätstheorie auf, oder in der Magnetohydrodynamik, wo die strömungsmechanischen mit magnetischen Kräften in Wechselwirkung treten. Hinzu kommen eine Vielzahl mathematischer Modelle, die moderne technologische Entwicklungen wie Halb- und Supraleiter, elastisch-plastische Materialien oder komplizierte mikrobiologische Vorgänge beschreiben.

Aus meiner persönlichen Sicht liegt die eigentliche philosophische Brisanz der Mathematik also nicht in der formalen Logik oder der Mengenlehre, die zum Beispiel Bertrand Russel beschäftigt hat. Für wichtiger halte ich die grundlegende Überprüfung des naturwissenschaftlichen Weltbildes. Ist die Mathematik die Sprache der Naturwissenschaft, so ist die mathematische Analysis deren Sprachkritik.

3 Die Übersetzung der Differential-Gleichungen der Kontinuumsmechanik in die diskrete Sprache des Computers

Lassen Sie uns im folgenden den Standpunkt wechseln: Anstatt abstrakt nach der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen einer Differential-Gleichung zu fragen, möchten wir zu gegebenen Daten die Lösung nun tatsächlich berechnen. Natürlich ist das meist gar nicht möglich. Die Existenz- und Eindeutigkeits-Theorie sagt uns ja nur, daß es eine Lösung gibt, aber wir wissen nicht, wie sie aussieht. Könnten wir zu einem gegebenen Naturgesetz immer gleich eine daraus resultierende Formel angeben, die die Lösung vorhersagt, so hätten wir nicht solche Mühe auf den Aufbau einer abstrakten Theorie verwenden müssen.

Da diese Fragestellung unsere Rechenkünste also fast immer übersteigt, versuchen wir, uns der Rechenmaschine, des Computers, zu bedienen. Sofort stoßen wir aber auf ein prinzipielles Hindernis: der Computer ist zwar schnell, ungeheuer fleißig und ausdauernd, aber er verfügt nicht über menschliche Intelligenz. Sein Gedächtnis ist groß, aber nur endlich. Auch das Gedächtnis der meisten Mathematiker ist natürlich nicht unendlich groß. Im Gegensatz zum Computer sind wir jedoch in der Lage, gedankliche Grenzübergänge durchzuführen, bei denen Größen unendlich groß oder unendlich klein werden. Die gesamte Infinitesimalrechnung (der Name sagt das ja schon) beruht auf solchen Übergängen. Die Differential-Gleichungen der Kontinuumsphysik, ja die Annahme des Kontinuums selbst sind solche Idealisierungen. Der Computer kann diese mathematische Sprache prinzipiell nicht verstehen, und wenn er sie einmal verstehen sollte, so würde ihm das wahrscheinlich gar nicht helfen, Lösungen von Differential-Gleichungen zu bestimmen. Er würde auf diesselben Schwierigkeiten wie die Mathematiker stoßen, und müßte beginnen, über eine abstrakte Existenztheorie nachzudenken. Bevor wir überhaupt wieder ernsthaft fachlich mit ihm diskutieren würden, müßte er erst einmal Vorlesungen über Maß- und Interpolationstheorie, nichtlineare Funktionalanalysis und partielle Differential-Gleichungen hören.

Nehmen wir den Computer also lieber als das, was er ist: eine schnelle Rechenmaschine mit endlichem Gedächtnis.

Wir müssen nun das unendlich-dimensionale physikalische Problem durch ein endlich-dimensionales approximieren. Typischerweise wird dabei der Raum, in dem sich das gegebene Experiment oder Naturereignis abspielt, mit einem endlichen Gitter überzogen. An jedem Punkt des Gitters werden nun Zahlenwerte für Dichte, Geschwindigkeit und Druck vorgegeben. Das ist in gewisser Weise gar nicht so unterschiedlich zum Vorgehen des Ingenieurs oder Experimenatalphysikers, der auch nur an endlich vielen Punkten Meßdaten erheben kann.

Aus den gegebenen Zahlenwerten muß man nun die Kräfte errechnen, die die zeitliche Dynamik, die Entwicklung der Strömung bestimmen. Das geht natürlich ebenfalls nur näherungsweise. Wir haben schon die Druckkräfte diskutiert. Diese entstehen aus dem Gradienten, also der räumlichen Variation des Druckes. Man muß also von einem gegebenen Gitterpunkt aus die benachbarten Punkte betrachten und den dort vorliegenden Druck mit dem im Ausgangspunkt vergleichen. Das bedeutet, daß man die in den Naturgesetzen auftretenden Ableitungen oder Differentiale wieder durch Differenzenquotienten approximiert. Dabei hat man viele Entscheidungen zu treffen: man kann z.B. nur die allernächsten Punkte, oder aber auch weiterweg liegende Punkte miteinbeziehen. Man kann die Annahme machen, daß der Druck lokal eine lineare, eine quadratische oder sogar noch kompliziertere Funktion ist. Sie beginnen nun zu verstehen, daß es bei der Übersetzung einer Differential-Gleichung in die Sprache des Computers große Freiheiten gibt. Tatsächlich ist die Vielzahl von Computeralgorithmen, also Approximationsmodellen für Strömungsprobleme fast unübersehbar.

4 Die numerische Analysis als theoretische Absicherung der Computeralgorithmen

Nicht alle Algorithmen sind gleich gut. Manche naiv betrachtet vernünftige, mit der Differential-Gleichung konsistente Näherungen führen sogar zu ganz unphysikalischen Lösungen. Eine schöne bunte Graphik täuscht dann eine Wirklichkeit vor, die so gar nicht existieren kann. Trotz unbestrittener großer Erfolge von Computersimulationen passieren manchmal auch peinliche Malheurs: Autos kommen bei Testfahrten ins Schleudern, Bohrinseln brechen bei der ersten echten Belastungsprobe in sich zusammen und versinken im Meer, und Satelliten gehen im Weltall verloren.

Mit der sogenannten numerischen Analysis haben die Mathematiker eine Theorie entwickelt, welche die Verläßlichkeit der Computeralgorithmen auf so philosophisch-kritische und gründliche Weise untersucht, wie es die mathematische Analysis mit den Naturgesetzen tut. Zentrale Begriffe sind hier neben der Konsistenz die Stabilität und die Konvergenz. Konsistenz ist eine Selbstverständlichkeit, die besagt, daß die Lösung der dem Computeralgorithmus zugrundeliegende Differenzen-Gleichung lokal, also in jedem Gitterpunkt und in jedem einzelnen Rechenschritt in der Nähe einer Lösung der Differential-Gleichung liegen soll.

Stabilität ist die viel grundlegendere Frage, welche Kontrolle man nach einer Vielzahl von Rechenschritten noch über die approximative Lösung hat.

Der Begriff der Konvergenz geht wieder auf ein typisch mathematisches Gedankenexperiment zurück: Dabei stellen wir uns vor, wir hätten eine ganze Serie von immer größeren und schnelleren Computern zur Verfügung, deren Größe, obwohl jeder einzelne endlich beschränkt ist, schließlich doch ins Unendliche geht. Diese Computer würden uns erlauben, auf immer feineren Rechengittern zu arbeiten, deren Gitterpunkte den Raum schließlich dicht ausfüllen. Jeder der Computer liefert das von ihm berechnete Ergebnis ab. Wir vergleichen diese Ergebnisse und stellen die Frage, ob sie sich schließlich einem einzigen Endergebnis nähern, ob die erzeugten Wirklichkeiten schließlich übereinstimmen. Wenn ja, so sagen wir, daß der Algorithmus konvergiert, und nennen das Ergebnis den Grenzwert. Hinzu kommt die natürlich entscheidende Frage, ob der Grenzwert auch Lösung der Differential-Gleichung, also physikalisch sinnvoll ist.

Im einfachsten, linearen Fall weiß man seit den 50er Jahren, daß ein konsistentes Differenzenverfahren genau dann konvergiert, wenn es stabil ist. Das ist der Satz von Lax und Richtmyer.

Lassen Sie mich wieder den Stand der Forschung in meinem eigenen Arbeitsgebiet, den hyperbolischen Erhaltungssätzen, skizzieren: Da die betrachteten Gleichungen meist nichtlinear sind, kann man den Satz von Lax und Richtmyer nicht verwenden, um die Konvergenz zu zeigen. Statt dessen muß man jedes Problem gesondert betrachten. Ich habe bereits erwähnt, daß es für den eigentlich in der Strömungsmechanik wichtigen Fall, nämlich die dreidimensionalen Euler-Gleichungen, keine auch nur ansatzweise befriedigende mathematische Theorie gibt. Wir können also nur hoffen, Computeralgorithmen theoretisch zu begründen, wenn wir die physikalischen Annahmen vereinfachen. Eine typische Annahme ist es, nicht ein System von Größen wie der Dichte, der Geschwindigkeit und dem Druck zu betrachten, die miteinander in Wechselwirkung stehen, sondern sich auf eine einzige solche Größe zu beschränken.

Die zeitliche Entwicklung dieser einzelnen, wir sagen skalaren Größe ist zwar weniger kompliziert als die eines Systems sich gegenseitig beeinflussender Größen, sie folgt aber immer noch einem nichtlinearen Gesetz. Insbesondere werden Wellen sich verformen und typischerweise brechen.

In den sogenannten skalaren Erhaltungssätzen steckt also immer noch eines der wichtigsten Phänomene, die auch bei Schallwellen auftreten. Wählt man nun einen zu allgemeinen, wir Mathematiker würden sagen, zu schwachen Lösungsbegriff, so geht die Eindeutigkeit der Lösung verloren. Insbesondere werden Stoßwellen zugelassen, die den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik verletzen, der besagt, daß die Entropie in der Zeit immer nur zunehmen kann. Stellen Sie sich dabei die Entropie als ein Maß für die Unordnung eines Systems vor. Die Mathematiker haben, vom zweiten Hauptsatz ausgehend, Entropiebedingungen eingeführt, die zumindest für skalare Erhaltungssätze die Eindeutigkeit von Lösungen sichern. Die Theoriebildung ist in diesem Fall also im Wesentlichen abgeschlossen.

Das eröffnet nun die Möglichkeit, auch Computeralgorithmen rigoros zu untersuchen. Für eine Klasse besonders robuster Verfahren, sogenannter Verfahren erster Ordnung, konnte bereits in den fünfziger Jahren die Konvergenz gezeigt werden. Seit Beginn der neunziger Jahre weiß man das sogar auf Rechengittern, die im wesentlichen unstrukturiert sind. Man kann sogar den Fehler abschätzen, d.h. man weiß, wie schnell der Fehler kleiner wird, wenn man das Rechengitter verfeinert.

Verfahren erster Ordnung sind aber für die Praxis nur begrenzt nützlich. Sie sind zwar sehr robust, arbeiten zuverlässig und bedächtig wie ein schwerer Ackergaul, aber sie kümmern sich wenig um die subtileren Phänomene, die in der Strömung vorkommen mögen. Stellen Sie sich vor, Sie wollten die Luftzirkulation in einem Raum berechnen, in den sich ein Schmetterling verirrt hat. Das Verfahren erster Ordnung wird die kleinen Wellenbewegungen, die von seinen Flügelschlägen ausgehen, bald vergessen haben, bzw. es wird sie erst auf einem sehr, sehr feinem, und damit teuren, Rechengitter adäquat erfassen.

Deshalb geht das Hauptaugenmerk in der Praxis dahin, Verfahren höherer Ordnung zu entwickeln, die wir gerne hochauflösende Verfahren nennen. Die Gefahr bei diesen hochgezüchteten, nervösen Rennpferden ist jedoch, daß sie nach kurzer Zeit einen ganzen Schwarm von Schmetterlingen zu sehen glauben, wo eigentlich nur ein einziger, oder vielleicht gar keiner, war.

Die Kunst ist es nun, diese hochauflösenden Algorithmen geeignet zu stabilisieren. Dabei soll einerseits verhindert werden, daß rein numerische, unphysikalische Oszillationen erzeugt werden können, andererseits sollen die Verfahren immer noch einen möglichst hohen Grad an Genauigkeit besitzen.

Ich selber habe viel an der Analyse von Verfahren höherer Ordnung gearbeitet. Insbesondere ist es mir gelungen, Entropieabschätzungen für hochauflösende Verfahren herzuleiten, die analog zu den Entropiebedingungen im kontinuierlichen Fall sind. Dabei mußten die Verfahren natürlich geeignet stabilisiert werden. Hat man einmal diese zentralen Abschätzungen gezeigt, so kann man sich einer Fülle analytischer Hilfsmittel bedienen, um Konvergenz und sogar Fehlerabschätzungen zu beweisen. Dabei konnte ich nicht nur zuvor bekannte Ergebnisse in verschiedene Richtungen verallgemeinern, sondern einige der Beweise auch wesentlich verkürzen. Das macht uns Mathematikern immer besondere Freude.

Nun habe ich Ihnen auch den ersten Teil des Titels nähergebracht:
„Die theoretische Absicherung moderner numerischer Verfahren“.

5 Das wissenschaftliche Rechnen: Labor der Wirklichkeit

Zum Schluß meines Vortrages möchte ich auf das noch relativ junge Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens eingehen. Hier verläßt die Mathematik den Boden der lückenlos bewiesenen Lehrsätze und wendet sich echten Anwendungsproblemen zu.

Es sind vor allem zwei Sorten von Fragen, die die Naturwissenschaftler oder Ingenieure mit Computersimulationen großen Stils beantworten möchten:

Im ersten Falle sind sie der festen Überzeugung, die Gesetze zu kennen, die den Verlauf eines Ereignisses bestimmen. Sie glauben also daran, daß die aus diesen Gesetzen abgeleitete, mathematische Welt gut mit der Natur übereinstimmt. Nun möchten sie Ereignisse vorhersagen, die sie nicht beobachten können, weil entsprechende Experimente vielleicht zu teuer oder zeitaufwendig wären, oder weil diese Ereignisse weit weg im Weltall stattfinden und man keine geeigneten Instrumente besitzt, um die Effekte zu messen, die einen interessieren. Anstatt nun also ein Experiment oder eine Messung durchzuführen, simuliert man das Experiment mit Hilfe des Computers, das heißt, man berechnet eine approximative Lösung des mathematischen Gesetzes.

Die andere typische Fragestellung tritt bei der Entwicklung neuer naturwissenschaftlicher oder ökonomischer Theorien auf. Nehmen wir an, wir wollten Naturgesetze für neue Werkstoffe aufstellen, oder für Phänomene wie elastisch-plastische Deformationen, oder das Schwarmverhalten von Mikrobakterien. Dazu sei ein naturwissenschaftliches Experiment bekannt, das wir mit Hilfe der neuen Theorie erklären wollen, bzw. anhand dessen wir die Theorie verifizieren wollen. In dieser Situation kennen wir also das Naturereignis, aber wir wissen nicht, ob die aus dem angenommenen Gesetz folgende mathematische Welt mit der Natur übereinstimmt. Deshalb fragen die Ingenieure nun nach der mathematischen Lösung des Gesetzes. Eine zuverlässige Computersimulation soll diese Lösung im Rahmen einer vorgegebenen Fehlertoleranz, sagen wir zum Beispiel fünf Prozent, berechnen. Diese Rechnung wird dann mit dem Experiment verglichen, und die Theorie wird so entweder bestätigt oder verworfen.

Bei beiden Fragestellungen kann der Mathematiker helfen, Computeralgorithmen für die Simulation auszuwählen. Der Beitrag der numerischen Analysis wäre es, darauf hinzuweisen, welche Algorithmen wenigstens für vereinfachte Modellprobleme stabil und konvergent sind. Eine typische Aufgabe des wissenschaftlichen Rechnens ist es, die auftretenden Differenzen-Gleichungen möglichst effizient zu lösen. Im nächsten Schritt werden die Algorithmen in komplexeren Situationen getestet, für die es zwar keine vollständige mathematische Theorie mehr gibt, in denen aber ein Experiment gut mit den Vorhersagen der mathematischen Theorie oder bereits vorliegender zuverlässiger Computersimulationen übereinstimmt. Erst wenn der Algorithmus diese Hürden genommen hat, wird er auf das eigentliche, noch ungeklärte Problem angewendet.

Wie gesagt ist das wissenschaftliche Rechnen ein noch recht junges Fach. Am Bonner Institut für Angewandte Mathematik gibt es zum Beispiel erst seit zwei Jahren eine Professur in diesem Gebiet, und Professor Griebel hat heute nachmittag in seiner Antrittsvorlesung eine Fülle faszinierender Rechnungen und Probleme diskutiert. Deshalb möchte ich es heute bei diesen allgemeinen Bemerkungen belassen.

Ich glaube, Sie können sich nun vorstellen, welche Weite schon das eine mathematische Teilgebiet, über das ich heute gesprochen habe, besitzt: Es reicht von grundlegend-philosophischen Fragen zum naturwissenschaftlichen Weltbild über die theoretische Absicherung von Computeralgorithmen bis hin zu technologisch relevanten quantitativen Simulationen. Natürlich kann die Mathematik auf jedem dieser Gebiete nur Teilfragen beantworten. Es wird also immer eine Fülle von Fragen geben, an denen Mathematiker forschen.

Ich danke Ihnen für Ihre Aufmerksamkeit.

Bonn, im Mai 1998