

Softwarepraktikum

– mit einer Einführung in MAPLE –

Jens Struckmeier

Fachbereich Mathematik, Universität Hamburg

Sommersemester 2017

Informationsquellen.

- **STiNE.**

<https://www.stine.uni-hamburg.de/>

- **VORLESUNG.**

In den **ungeraden** Semesterwochen

Mittwoch, 16:15–17:45, Geom H2, ab 19. April 2017

- **PRAKTISCHE ÜBUNGEN IM CIP-POOL (RÄUME 143/144).**

In den **geraden** Semesterwochen

Dienstag, 14:15–15:45, ab 25. April (Rafiq Mehdiyev)

Freitag, 10:15–11:45, ab 28. April (Rafiq Mehdiyev)

- **SPRECHSTUNDE.**

siehe Homepage der Dozenten

Prüfungs- und Studienleistungen.

- **Praktische Übungen am Computer.**

Regelmäßige und aktive Teilnahme, Anwesenheit erforderlich.

- **Testatbogen.**

Jeder Studierende führt einen Testatbogen, erhältlich unter STiNE.

- **Zulassung zur Modulabschlussprüfung.**

Vollständig ausgefüllter Testatbogen.

- **MÜNDLICHE EINZELPRÜFUNG.**

Voraussetzung: erfolgreiche Teilnahme an den Praktischen Übungen.

Termin: in der letzten Semesterwoche.

Aufgaben und Ziele des Softwarepraktikums.

- **Grundaufgabe**

Erwerb von Grundkenntnissen zum Einsatz des Computeralgebra-Systems MAPLE.

- **mit dem Ziel**

- Mathematische Begriffe zu vertiefen und zu veranschaulichen.
- Mathematische Probleme konkret zu lösen.
- Neue mathematische Themen mit Hilfe eines Computeralgebra-Systems kennenzulernen.

- **und speziell für Lehramtsstudierende**

- Einsatz eines Computeralgebra-Systems im Schulunterricht.
- MAPLE als virtuelles Labor.

Geplante Themen.

- **Visualisierung von Funktionen, Kurven und Flächen.**
- **Grenzwerte und Ableitungen.**
- **Integralrechnung.**
- **Spezielle Funktionen.**
- **Zufallszahlen und Monte–Carlo Methoden.**
- **Gewöhnliche Differentialgleichungen.**
- **Störungstheorie bei Differentialgleichungen.**

Ausgewählte Bücher.

- **D. Bahns, Ch. Schweigert:** Softwarepraktikum – Analysis und Lineare Algebra. Ein MAPLE-Arbeitsbuch mit Beispielen und Lösungen, 1. Auflage, Vieweg, Wiesbaden, 2008.
- **N. Blachman, M.J. Mossinghoff:** Maple griffbereit, Vieweg, Wiesbaden, 1995.
- **R. Braun, R. Meise:** Analysis mit Maple, Vieweg, Wiesbaden, 1995.
- **E. Heinrich, H.–D. Janetzko:** Das Maple Arbeitsbuch, Vieweg, Wiesbaden, 1995.
- **H. Reckziegel, M. Kriener, K. Pawel:** Elementare Differentialgeometrie mit Maple, Vieweg, Wiesbaden, 1998.
- **T. Westermann:** Mathematische Probleme lösen mit MAPLE, Springer, Berlin, 2003.
- **T. Westermann et al.:** Mathematische Begriffe visualisiert mit Maple V für Lehrer und Dozenten, Springer, Berlin, 2000.

Ausgewählte Internetquellen.

- **N. Geers:** Maple Arbeitsblätter,
www.scc.kit.edu/downloads/sys/maplekurs_9.pdf
- **D. Henke:** Einführung in Maple,
www.henked.de/maple/einfuehrung.htm
- **F. Wünsch:** Einführung in Maple,
www.physik.uni-regensburg.de/studium/edverg/maple/script/pdf/Maplekurs.pdf
- **Weitere Internetquellen** unter
www.tu-ilmenau.de/num/team/werner-neundorf/sonstiges/maple/maple-kurse/

1 Visualisierung von Funktionen, Kurven und Flächen

1.1 Darstellung von Funktionen $f = f(x)$ oder $f = f(x, y)$

Gegeben sei eine auf dem Intervall $[a, b] \subseteq \mathbb{R}$ definierte (elementare) Funktion, zum Beispiel die auf ganz \mathbb{R} definierte Funktion

$$f(x) = \exp(-x) \sin(x)$$

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> f := x -> exp(-x) * sin(x);
```

```
> f(1);
```

```
> evalf(f(1));
```

oder

```
> g := unapply(1 + sqrt(x), x);
```


Abschnittsweise definierte Funktionen: betrachte die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} x^2 & : x < \frac{3}{2} \\ x + \frac{3}{4} & : \frac{3}{2} \leq x < 3 \\ \frac{27}{4} - x & : x \geq 3 \end{cases}$$

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> f := x -> piecewise(x < 3/2, x^2, x < 3, x + 3/4, 27/4 - x);
```

Funktionsgraphen elementarer Funktionen:

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> plot(f(x), x = -1..5);
```

```
> plot([sin(x), cos(x)], x = -Pi..Pi);
```

Optionale Parameter:

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> ?plot[options];
```

Logarithmische Darstellung von Funktionen:

- Logarithmische Skalierung der y -Achse:
⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> with(plots);
```

```
> logplot(3 * exp(4 * x), x = 1..10);
```

- Logarithmische Skalierung der x -Achse:
⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> with(plots);
```

```
> semilogplot([ln(x), ln(2 * x)], x = 1..10);
```

- Logarithmische Skalierung der x - und y -Achse:
⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> with(plots);
```

```
> loglogplot([ln(x), ln(2 * x), exp(x)], x = 1..10);
```

Parameterabhängige Funktionen $f = f(x, k)$ einer Veränderlichen:

Zur Darstellung von Kurvenscharen, zum Beispiel

$$g(x, k) = x + \frac{k}{x + 1} \quad \text{mit } k \in \mathbb{R}$$

kann man folgende Befehle verwenden

```
> plot({seq(x + k/(x + 1), k = -3..6)}, x = -4..4, y = -8..10, color = black);
```

oder

```
> g := (x, k) -> x + k/(x + 1);
```

```
> plot({seq(g(x, k), k = -3..6)}, x = -4..4, y = -8..10, color = black);
```

Die Option `color=black` bewirkt, dass alle Kurven in schwarz dargestellt werden.

Eine entsprechende dreidimensionale Darstellung der Kurvenschar erreicht man durch den Befehl

```
> plot3d(g(x, k), x = -4..4, k = -3..6, view = -8..10);
```

Durch die Option `view = -8 .. 10` erreicht man eine Einschränkung der z -Achse auf das Intervall $[-8, 10]$.

Darstellung einer Funktion $f(x, y)$ in zwei Variablen:

Gesucht ist der Graph einer Funktion $f = f(x, y)$ mit $(x, y) \in U \subseteq \mathbb{R}^2$, zum Beispiel

$$f(x, y) = \frac{\sin(\sqrt{x^2 + y^2})}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> f := (x, y) -> sin(sqrt(x^2 + y^2))/sqrt(x^2 + y^2);
```

```
> plot3d(f(x, y), x = -10..10, y = -10..10);
```

Es existieren wieder eine Reihe optionaler Parameter:

- Darstellung mit Höhenlinien

```
> plot3d(f(x, y), x = -10..10, y = -10..10, contours = 20, style = patchcontour);
```

- Darstellung ohne Gitter

```
> plot3d(f(x, y), x = -10..10, y = -10..10, style = patchnogrid);
```

1.2 Ebene algebraische Kurven

Eine ebene algebraische Kurve $V(p)$ ist gegeben durch die Nullstellenmenge eines (reellwertigen) Polynoms zweier unabhängiger Variablen vom (maximalen) Grad n , also ein Polynom $p = p(x, y)$ gegeben durch

$$p(x, y) = \sum_{j,k=0}^n a_{j,k} x^j y^k \quad \text{mit } a_{j,k} \in \mathbb{R}$$

Damit erhält man für $V(p)$ die Darstellung

$$V(p) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : p(x, y) = 0\}$$

Sei $(x_0, y_0) \in V(p)$. Dann liefert der Satz über implizite Funktionen ein Resultat zur lokalen Auflösbarkeit in der Form

$$p(x, y(x)) = 0 \quad \text{bzw.} \quad p(x(y), y) = 0$$

in Umgebungen der Punkte x_0 und y_0 .

Ein Punkt $(x_0, y_0) \in V(p)$ heißt **Singularität**, falls gilt

$$\frac{\partial p}{\partial x}(x_0, y_0) = \frac{\partial p}{\partial y}(x_0, y_0) = 0$$

Satz über implizite Funktionen:

Sei $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion, und sei

$$N = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : f(x, y) = 0\}$$

Ist $(x_0, y_0) \in N$ und gilt $(\partial f / \partial y)(x_0, y_0) \neq 0$, so gibt es Umgebungen U von x_0 und V von y_0 , sodass für jedes $x \in U$ genau eine Lösung $y \in V$ der Gleichung $f(x, y) = 0$ existiert.

Insbesondere ist $N \cap U \times V$ der Graph einer auf U implizit definierten Funktion g , für welche $f(x, g(x)) = 0$ für alle $x \in U$ gilt. Die Funktion g ist stetig differenzierbar.

Beispiel: Gegeben sei die Funktion

$$f(x, y) = y^2 - (x - 1)(x + 1)^2 - 1$$

Dann gilt

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x, y) = 2y$$

Wegen $f(-1, 1) = 0$ gibt es daher ein offenes Intervall I mit $-1 \in I$ sowie eine Funktion $g : I \rightarrow \mathbb{R}$, sodass $f(x, g(x)) = 0$ für alle $x \in I$.

Zur graphischen Darstellung ebener algebraischer Kurven kann in MAPLE der Befehl `implicitplot` verwendet werden.

Beispiel:

```
> f := (x, y) -> y2 - (x - 1) * (x + 1)2 - 1;  
> with(plots) :  
> p1 := implicitplot(f(x, y) = -0.2, x = -1.7..1.1, y = -1.1..1.1,  
> grid = [40, 40], color = red) :  
> p2 := implicitplot(f(x, y) = 0, x = -1.7..1.1, y = -1.1..1.1,  
> grid = [40, 40]) :  
> p3 := implicitplot(f(x, y) = 0.2, x = -1.7..1.1, y = -1.1..1.1,  
> grid = [40, 40], color = green) :  
> display(p1, p2, p3);
```

Die Zeichengenauigkeit wird mit `grid` eingestellt. Die Voreinstellung ist dabei `grid=[25,25]`.

Beispiel: Die **Neil'sche Parabel** ist eine ebene algebraische Kurve mit einer Singularität um Ursprung $(x, y) = (0, 0)$. Sie ist gegeben durch die Gleichung

$$y^2 - x^3 = 0$$

Eine Parametrisierung der Neil'schen Parabel ist einfach gegeben durch

$$c(t) = (t^2, t^3)^T \quad \text{mit } t \in \mathbb{R}$$

MAPLE hat große Schwierigkeiten, die Nullstellenmenge in der Nähe einer Singularität richtig wiederzugeben:

```
> p := (x, y) -> y^2 - x^3;  
> implicitplot(p(x, y), x = -1..1, y = -2..2);
```

Eine bessere Auflösung erhält man mit dem Befehl `gridrefine=n` mit $n \in \mathbb{N}$, zum Beispiel

```
> implicitplot(p(x, y), x = -1..1, y = -2..2, gridrefine = 4);
```


Beispiel: Der **Newtonsche Knoten** ist wie die Neil'sche Parabel eine ebene algebraische Kurve vom Grad 3 – eine sogenannte Kubik. Sie ist die Nullstellenmenge des Polynoms $p = p(x, y)$ gegeben durch

$$p(x, y) = y^2 - x^2(x + 1)$$

Eine Parametrisierung ist

$$c(t) = (t^2 - 1, t - t^3)^T$$

```
> p := (x, y) -> y^2 - x^2 * (x + 1);
```

```
> implicitplot(p(x, y), x = -2..2, y = -2..2, gridrefine = 2);
```

Eine Schar ebener algebraischer Kurven ist gegeben durch die Gleichung

$$p(x, y; \mu) = y^2 - x^2(x + \mu)$$

mit dem Parameter $\mu \in \mathbb{R}$, die wir in Abschnitt 1.4 nochmals betrachten werden.

```
> p := (x, y, r) -> y^2 - x^2 * (x + r);
```

```
> implicitplot({seq(p(x, y, r), r = -1..1, 0.2)}, x = -2..2, y = -2..2, gridrefine = 2);
```

1.3 Darstellung von Raumkurven im \mathbb{R}^3

Eine differenzierbare Raumkurve im \mathbb{R}^3 sei gegeben durch eine Parametrisierung

$$\begin{aligned} \mathbf{c} : [a, b] &\rightarrow \mathbb{R}^3 \\ t &\rightarrow (c_1(t), c_2(t), c_3(t))^T \end{aligned}$$

- Die **Bogenlänge** der Raumkurve ist gegeben durch das Integral

$$L(\mathbf{c}) = \int_a^b \|\dot{\mathbf{c}}\| dt$$

- Das **Kurvenintegral 1. Art** ist gegeben durch

$$\int_{\mathbf{c}} f(\mathbf{x}) ds = \int_a^b f(\mathbf{c}(t)) \|\dot{\mathbf{c}}(t)\| dt$$

- Das **Kurvenintegral 2. Art** ist gegeben durch

$$\int_{\mathbf{c}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) ds = \int_a^b \langle \mathbf{f}(\mathbf{c}(t)), \dot{\mathbf{c}}(t) \rangle dt$$

Zur graphischen Darstellung von Raumkurven kann in MAPLE der Befehl `spacecurve` verwendet werden.

Beispiel: Gegeben sei die Parametrisierung einer Schraubenlinie in der Form

$$c(t) = (t \cos(t), t \sin(t), t^2)^T \quad \text{mit } t \in [0, 12\pi]$$

```
> with(plots);  
> spacecurve([t * cos(t), t * sin(t), t^2]), t = 0..12 * Pi);
```

oder auch

```
> with(plots);  
> c := t -> (t * cos(t), t * sin(t), t^2);  
> spacecurve([c(t)], t = 0..12 * Pi);
```

Um die graphische Auflösung der Kurvendarstellung zu erhöhen, verwendet man eine höhere Zahl von Diskretisierungspunkten:

```
> spacecurve([t * cos(t), t * sin(t), t^2]), t = 0..12 * Pi, numpoints = 200);
```

1.4 Animation von Funktionen, Kurven und Flächen

Beispiel: Gegeben sei eine Funktion $f : [a, b] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Ortsvariablen $x \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$ und der Zeitvariablen $t \in \mathbb{R}_+$, also $f = f(x, t)$.

Wir suchen eine Animation des Funktionsgraphen über der Zeitvariablen t .

⇒ **MAPLE-Syntax**

```
> with(plots);  
> animate(sin(x - t), x = 0..2 * Pi, t = 0..2 * Pi);
```

oder

```
> with(plots);  
> animate(plot, [sin(x - t), x = 0..2 * Pi], t = 0..2 * Pi);
```

Es existieren wieder eine Reihe optionaler Parameter, etwa

```
> animate(plot, [sin(x - t), x = 0..2 * Pi], t = 0..2 * Pi, frames = n);
```

mit $n \in \mathbb{N}$ der Anzahl der Bilder im Parameterbereich der Variablen t und der Voreinstellung $n = 25$.

Der Befehl `animate` kann prinzipiell mit jedem anderen Plot-Befehl kombiniert werden.

Beispiel: Wir betrachten die Schar der Kubiken aus Abschnitt 1.2 gegeben durch

$$p(x, y; \mu) = y^2 - x^2(x + \mu)$$

Eine Animation erhält man mit den Befehlen

```
> with(plots);  
> p := (x, y, r) -> y^2 - x^2 * (x + r);  
> animate(implicitplot, [p(x, y, r), x = -2..2, y = -2..2, gridrefine = 2], r = -1..1);
```

Weitere Beispiele:

```
> animate(plot3d, [sin(x+t)*cos(y-t), x = -2*Pi..2*Pi, y = -2*Pi..2*Pi], t = -5..5);
```

oder

```
> animate(tubeplot, [[r * sin(t), r * cos(t), 0], t = 0..2 * Pi, radius = 1], r = 0..1);
```

2 Grenzwerte und Ableitungen

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit dem Einsatz von MAPLE zur Berechnung von Grenzwerten und Ableitungen.

Dabei unterteilen wir das Kapitel in die folgenden Unterabschnitte:

- Grenzwerte von Folgen und Reihen
- Grenzwerte und Stetigkeit bei Funktionen
- Ableitungen
- Taylorentwicklungen

Als mathematische Grundlage beziehen wir uns wieder auf die Analysis–Lehrbücher von Otto Forster und fassen gleichzeitig die Abschnitte 4,7,11,22,25,28–30 aus dem MAPLE–Lehrbuch von Braun und Meise zusammen.

2.1 Grenzwerte von Folgen und Reihen

Gegeben sei eine Folge $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ reeller Zahlen – definiert durch eine Abbildung $\mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$.

Die Folge heißt *konvergent* gegen $a \in \mathbb{R}$, falls gilt:

Zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert ein $N \in \mathbb{N}$, so dass $|a_n - a| < \varepsilon$ für alle $n \geq N$.

Man schreibt dann

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$$

Mit Hilfe einer solchen Folge kann man eine (unendliche) Reihe definieren, in dem man die Folge $(s_m)_{m \in \mathbb{N}}$ der *Partialsummen* betrachtet:

$$s_m = \sum_{n=0}^m a_n$$

und schreibt dann kurz

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n$$

Man nennt eine Reihe konvergent, falls die Folge $(s_m)_{m \in \mathbb{N}}$ konvergiert.

Ist $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge, die man auf Konvergenz untersuchen möchte, so kann in MAPLE der Befehl `limit` verwendet werden:^a

`> limit(A, k = infinity);`

Dabei ist A entweder ein Ausdruck in k oder der Name eines solchen.

MAPLE liefert dann eine der folgenden Ausgaben:

- a , wenn $(a_k)_{k \in \mathbb{N}}$ gegen $a \in \mathbb{R}$ konvergiert,
- $\pm\infty$, wenn $(a_k)_{k \in \mathbb{N}}$ bestimmt gegen $+\infty$ oder $-\infty$ divergiert,
- *undefined*, wenn $(a_k)_{k \in \mathbb{N}}$ unbeschränkt ist, aber nicht bestimmt divergiert,
- $a..b$, wenn MAPLE keinen Grenzwert findet, aber feststellen kann, dass alle Häufungspunkte im Intervall $[a, b]$ liegen,
- $\lim_{k \rightarrow \infty} a_k$, wenn MAPLE nichts herausfindet.

^ain MAPLE werden Folgen gewöhnlich über die Variable $k \in \mathbb{N}$ indiziert.

Beispiele: In den folgenden Beispielen verwenden wir zusätzlich den Befehl `Limit`:

> `Limit(k/(k + 1), k = infinity) = limit(k/(k + 1), k = infinity)`

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k}{k + 1} = 1$$

Durch die Verwendung des Befehls `Limit` wird also nicht einfach nur das Ergebnis, sondern zusätzlich noch die definierte Folge mit der Grenzwertbildung ausgegeben.

Weitere Beispiele (ohne die MAPLE-Ausgabe)

> `Limit(k2/2k, k = infinity) = limit(k2/2k, k = infinity)`

> `e := exp(1);`

> `Limit(k! * ek / (kk * k(1/2)), k = infinity) = limit(k! * ek / (kk * k(1/2)), k = infinity)`

> `Limit(5k/k5, k = infinity) = limit(5k/k5, k = infinity)`

> `Limit(((−1)k + 1) * k, k = infinity) = limit(((−1)k + 1) * k, k = infinity)`

> `Limit(sin(k * Pi), k = infinity) = limit(sin(k * Pi), k = infinity)`

Rekursiv definierte Folgen

Wir betrachten nun den Fall einer rekursiv definierten Folge, zum Beispiel

$$\begin{aligned}a_0 &= 4 \\ a_k &= \frac{1}{2} \left(a_{k-1} + \frac{2}{a_{k-1}} \right)\end{aligned}$$

Solche Folgen müssen in MAPLE zunächst *programmiert* werden:^a

```
> a := proc(n) options remember;
>   if n < 2 then 4
>   else (a(n - 1) + 2/a(n - 1))/2
>   fi
> end;
```

Erinnern Sie sich gegen welchen Wert diese Folge konvergiert?

Allerdings können Grenzwerte rekursiv definierter Folgen mit Hilfe des `limit`-Befehls im Allgemeinen **nicht** berechnet werden.

^aEine Alternative sind `for`-Schleifen.

Um den `limit`-Befehl anwenden zu können, muss zunächst untersucht werden, ob die Folge mit dem Befehl `rsolve` in einen geschlossenen Ausdruck umgewandelt werden kann.

```
> rsolve({a(k) = (a(k - 1) + 2/a(k - 1))/2, a(0) = 4}, a)
> limit(%, k = infinity)
```

Dabei bedeutet das Symbol `%`, dass die letzte Ausgabe weiter bearbeitet werden soll. Einzelne Folgenglieder können aber auch direkt berechnet werden:

```
> a(8);
```

```
211630974145232462355602332426326887943688596058528433962179271791787931137
149645696927208787266305857687806254067025071363492174537458107855166806272
```

Hier entstehen schnell Brüche mit riesigen Zählern und Nennern.

Um dies zu vermeiden, ersetzt man im Befehl `proc` den Anfangswert $a(0) = 4$ durch $a(0) = 4$. MAPLE rechnet dann mit Fließkommazahlen und man erhält:

```
> a(8);
1.41423562
```

Unendliche Reihen

Gegeben sei eine Folge $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ reeller Zahlen. Dann betrachten wir die zugehörige (unendliche) Reihe definiert über die Partialsummen

$$s_m = \sum_{n=0}^m a_n$$

Zur Berechnung von Grenzwerten unendlicher Reihen steht in MAPLE der Befehl `sum` zur Verfügung – wieder zusammen mit dem *trägen* Operator `Sum`:

> `Sum(1/(k * (k + 1)), k = 1..infinity) = sum(1/(k * (k + 1)), k = 1..infinity);`

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)} = 1$$

> `Sum(1/k^2, k = 1..infinity) = sum(1/k^2, k = 1..infinity);`

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} = \frac{1}{6} \pi^2$$

Weitere Beispiele zeigen wir direkt in MAPLE.

2.2 Grenzwerte und Stetigkeit bei Funktionen

Wir erinnern noch einmal an die Definition von stetigen Abbildungen auf metrischen Räumen (siehe etwa Otto Forster, Analysis 2):

Seien X und Y metrische Räume und $f : X \rightarrow Y$ eine Abbildung. f heißt *stetig* im Punkt $a \in X$, falls

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a)$$

d.h. wenn für jede Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von Punkten aus X mit $\lim x_n = a$ gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = f(a)$$

Die Abbildung heißt stetig auf X , falls f in jedem Punkt $a \in X$ stetig ist.

Grundsätzlich können Grenzwerte wieder mit dem `limit`-Befehl berechnet werden, aber es existieren noch weitere MAPLE-Befehle, die wir vorstellen möchten. ^a

^aDas angegebene Lehrbuch von Braun und Meise bezieht sich auf MAPLE V, Release 3. In späteren MAPLE-Versionen sind eine Reihe neuer Befehle aufgenommen worden. Die 2. Auflage des Lehrbuchs aus dem Jahr 2011 ist leider (noch) nicht in unserer Bibliothek vorhanden.

Die größte Vielfalt an Befehlen zur Berechnung von Grenzwerten und Stetigkeitsuntersuchungen bietet MAPLE bei Funktionen einer Veränderlichen.

- Mit dem Befehl

`> limit(f(x), x = a);`

berechnet MAPLE – falls möglich – den Grenzwert $\lim_{x \rightarrow a} f(x)$. Statt $f(x)$ kann man auch einen beliebigen von x abhängigen Ausdruck einsetzen.

- Mit dem Befehl

`> discontinuity(f(x), x);`

berechnet MAPLE die (möglichen) Unstetigkeitsstellen der Funktion $f(x)$. Wieder kann $f(x)$ durch einen beliebigen von x abhängigen Ausdruck ersetzt werden.

- Schließlich liefert der Befehl

`> iscontinuous(f(x), x = a..b);`

das Ergebnis *true* oder *false*, falls $f(x)$ auf dem **offenen** Intervall stetig ist oder nicht. Mit einem dritten Argument 'closed' kann auch das abgeschlossene Intervall $[a, b]$ betrachtet werden.

Beispiel: In Anlehnung an das erste Übungsblatt betrachten wir die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} x^2 \sin(1/x) & : \quad -\infty < x < 0 \text{ und } 0 < x < \infty \\ 0 & : \quad x = 0 \end{cases}$$

Wir untersuchen jetzt mit Hilfe von MAPLE die angegebene Funktion:

```
> f := x -> x^2 * sin(1/x);
> g := x -> piecewise(x = 0, 0, x^2 * sin(1/x));
> f(0);
> g(0);
> Limit(f(x), x = 0) = limit(f(x), x = 0);
> discont(f(x), x);
> discont(g(x), x);
> iscont(f(x), x = -1..1);
> iscont(g(x), x = -1..1);
```

Beispiel: Gegeben sei die bis auf den Nullpunkt auf ganz \mathbb{R} definierte Funktion

$$f(x) = \frac{\exp(1/x)}{x}$$

Der Befehl `limit` liefert bei $x = 0$ das Ergebnis *undefined*:

```
> f := exp(1/x)/x;
```

```
> Limit(f, x = 0) = limit(f, x = 0);
```

Man sieht aber leicht ein, dass links- bzw. rechtsseitige (uneigentliche) Grenzwerte existieren:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{\exp(1/x)}{x} = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{\exp(1/x)}{x} = \infty$$

Verwendet man im `limit`-Befehl die Optionen `left` oder `right`, werden diese beiden Grenzwerte berechnet:

```
> Limit(f, x = 0, left) = limit(f, x = 0, left);
```

```
> Limit(f, x = 0, right) = limit(f, x = 0, right);
```


Bei Funktionen in mehreren Variablen steht bei Grenzwertberechnungen und Stetigkeitsuntersuchungen im Prinzip nur der Befehl `limit` zur Verfügung. Zur Untersuchung einzelner Punkte kann man aber auch die beiden Befehlen `discont` und `iscont` sinnvoll einsetzen.

Beispiel: Wir betrachten die auf $\mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$ definierte Funktion

$$f(x, y) = \frac{xy^2}{x^2 + y^4}$$

Zunächst stellen wir die Funktion graphisch dar und berechnen den Grenzwert gegen den Ursprung:

```
> f := (x, y) -> x * y^2 / (x^2 + y^4);  
> with(plots);  
> animate(plot3d, [f(x, y), x = -1..1, y = -1..1, grid = [80, 80],  
> orientation = [t, 60], axes = boxed], t = 0..360, frames = 50);  
> limit(f(x, y), {x = 0, y = 0});
```

Das Ergebnis des `limit`-Befehls ist allerdings *undefined*.

Wie kann man sich klarmachen, dass der Grenzwert $\lim_{(x,y) \rightarrow (0,0)} f(x,y)$ nicht existiert?^a

- Zunächst besitzt der Zähler $x^2 + y^4$ auf $\mathbb{R} \setminus \{(0,0)\}$ keine Nullstelle. Also kann in einer beschränkten Umgebung um den Nullpunkt nur bei $(x,y) = (0,0)$ ein singulärer Punkt liegen.
- Betrachten wir also Kurven $c : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^2$, die den Nullpunkt durchlaufen. Zum Beispiel

$$c_1 : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad c_1(t) = (t, t)$$

Berechnen wir $f(c_1(t))$, so erhalten wir

$$f(c_1(t)) = f(t, t) = \frac{t \cdot t^2}{t^2 + t^4} = \frac{t^3}{t^2(1 + t^2)} = \frac{t}{1 + t^2}$$

Demnach gilt

$$\lim_{t \rightarrow 0} f(c_1(t)) = 0$$

^aBesser gesagt: dass der MAPLE-Befehl `limit` den Grenzwert als *undefined* bezeichnet.

- Für $c_2(t) = (t, t^2)$ erhalten wir

$$f(c_2(t)) = \frac{t \cdot t^4}{t^2 + t^8} = \frac{t^5}{1 + t^6} \Rightarrow \lim_{t \rightarrow 0} f(c_1(t)) = \lim_{t \rightarrow 0} f(c_2(t)) = 0$$

Setzen wir nun $c_3(t) = (t^2, t)$, so ergibt sich

$$f(c_3(t)) = \frac{t^2 \cdot t^2}{t^4 + t^4} = \frac{1}{2} \neq 0$$

Damit erhalten wir also

$$\lim_{t \rightarrow 0} f(c_1(t)) = \lim_{t \rightarrow 0} f(c_2(t)) = 0 \neq \frac{1}{2} = \lim_{t \rightarrow 0} f(c_3(t))$$

Ein Grenzwert $\lim_{(x,y) \rightarrow (0,0)} f(x,y)$ existiert also **nicht**.

- Wir betrachten nun die Kurve $c_4(t) = (t^\alpha, t^\beta)$ mit $t \in (0, 1)$ und $\alpha, \beta > 0$:

$$f(c_4(t)) = \frac{t^\alpha \cdot t^{2\beta}}{t^{2\alpha} + t^{4\beta}} = \frac{t^{\alpha+2\beta}}{t^{2\alpha} + t^{4\beta}} = \frac{t^{\alpha+2\beta}}{t^{2\alpha} \cdot (1 + t^{4\beta-2\alpha})} = \frac{t^{2\beta-\alpha}}{1 + t^{4\beta-2\alpha}}$$

Um im Grenzwert $t \rightarrow 0$ eine divergente Folge zu erhalten, müsste also gelten

$$2\beta - \alpha < 0 \quad \text{und} \quad 4\beta - 2\alpha > 0,$$

was zu einem Widerspruch führt.

2.3 Ableitungen

Zur Berechnung und Auswertung von Ableitungen stehen in MAPLE eine Reihe von Befehlen zur Verfügung, die wir kurz zusammenstellen wollen:

- Ist A ein von der Variablen x abhängiger Ausdruck, so berechnet der Befehl `diff` die Ableitung, die wiederum einem Ausdruck zugeordnet werden kann:

```
> A := x * sin(1/x);
```

```
> Atrich := diff(A, x);
```

Möchte man den Wert der Ableitung an einem bestimmten Punkt auswerten, verwendet man

```
> eval(Atrich, x = 1);
```

```
> evalf(%);
```

Für die n -te Ableitung steht der Operator `$` zur Verfügung:^a

```
> Diff(A, x$n) = diff(A, x$n);
```

^aHier zusammen mit dem *trägen* Operator `Diff`.

- Ist $f = f(x)$ eine über die Pfeilnotation definierte Funktion einer Veränderlichen, so generiert der Befehl `D` die Funktion $f' = f'(x)$, die direkt ausgewertet werden kann:

```
> f := x -> x * sin(1/x);
```

```
> D(f);
```

```
> D(f)(1);
```

```
> evalf(%);
```

Die Funktion $f^{(n)} = f^{(n)}(x)$ erhält man durch den Befehl

```
> D(n)(f);
```

- Ist A ein von n Variablen abhängiger Ausdruck bzw. $f = f(x_1, \dots, x_n)$ eine über die Pfeilnotation definierte Funktionen der n Variablen x_1, \dots, x_n , so lauten die entsprechenden MAPLE-Befehle

```
> diff(A, x1$i1, ..., xn$in);
```

```
> D[1, ..., 1, 2, ..., n, ..., n](f);
```

Alternativ kann im letzten Befehl auch wieder der Operator `$` verwendet werden.

- Für vektorwertige Funktionen $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $n \geq 1, m > 1$, muss zunächst das MAPLE-Paket `VectorCalculus` geladen werden, um Ableitungen komponentenweise berechnen zu können. Das Paket funktioniert allerdings nur mit von Variablen abhängigen Ausdrücken und **nicht** mit über die Pfeilnotation definierten Funktionen.

`VectorCalculus` verwendet verschiedene Darstellungen für einen Vektor $v \in \mathbb{R}^m$. Mit der Voreinstellung `BasisFormat()` werden benannte Basisvektoren wie beispielsweise e_x verwendet:

$$\begin{aligned} > v := \langle t, t^2, t^3 \rangle; \\ & \quad (t)e_x + (t^2)e_y + (t^3)e_z \end{aligned}$$

Wir benutzen im Folgenden eine Darstellung von Vektoren in Spaltenform, was durch den Befehl `BasisFormat(false)` erreicht wird:

```
> BasisFormat(false);  
> v;
```

Andere Formate sind Darstellungen in Polar- oder sphärischen Koordinaten.

Wir erinnern noch einmal kurz an spezielle Differentialoperatoren im \mathbb{R}^n : sei U eine offene Teilmenge des \mathbb{R}^n , $n \geq 1$, $f : U \rightarrow \mathbb{R}$, $g : U \rightarrow \mathbb{R}^m$, $m > 1$ und v ein Vektorfeld auf U , also $v : U \rightarrow \mathbb{R}^n$.

- *Gradient und Nabla-Operator*

$$\text{grad } f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$

$$\text{grad } f(x) = \nabla f(x)$$

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

- *Divergenz*

$$\text{div } v = \sum_{i=1}^n \frac{\partial v_i}{\partial x_i} = \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \dots + \frac{\partial v_n}{\partial x_n}$$

$$\text{div } v = \langle \nabla, v \rangle$$

- *Laplace-Operator*

$$\Delta f = \text{div grad } f = \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}$$

- *Hesse-Matrix*

$$(\text{Hess } f)(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_1} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x_n} \end{pmatrix}$$

- *Jacobi-Matrix*

$$(\text{D}g)(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial g_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Einige Beispiele hierzu zeigen wir auf der nächsten Seite.

Beispiel: Gegeben sei die Funktion

$$f(x, y, z) = ax^2 + by^2 + cz^2$$

mit den Parametern $a, b, c \in \mathbb{R}$. Wir berechnen den Gradienten von f :

$$> \mathbf{f} := a * x^2 + b * y^2 + c * z^2;$$

$$> \mathbf{g} := \text{Gradient}(\mathbf{f}, [x, y, z]);$$

Die Richtungsableitung in eine Richtung $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3$, $\|\mathbf{n}\|_2 = 1$, erhält man über das Skalarprodukt $(\text{grad } f, \mathbf{n}) \in \mathbb{R}$:

$$> \mathbf{t} := \langle b * y, -a * x, 0 \rangle;$$

$$> \mathbf{n} := \mathbf{t} / \text{Norm}(\mathbf{t}, 2);$$

$$> \text{DotProduct}(\mathbf{g}, \mathbf{n});$$

0

Die Richtungsableitung in die angegebene Richtung ist gleich Null – also steht der Richtungsvektor senkrecht auf dem Gradienten.

Beispiel: Gegeben sei die Funktion

$$f(x, y) = (4x^2 + y^2) \exp(-x^2 - 4y^2)$$

Gesucht sind die lokalen Extremwerte der Funktion:

```
> f := (4 * x^2 + y^2) * exp(-x^2 - 4 * y^2);  
> g1 := Gradient(f, [x, y]);  
> g := map(factor, g1);  
> L := solve({g[1], g[2]}, {x, y});  
> H := map(factor, Hessian(f, [x, y]));  
> A := seq(subs(L[k], H), k = 1..5);  
> with(LinearAlgebra);  
> seq(IsDefinite(A[k], query = negative_definite), k = 1..5);  
> seq(IsDefinite(A[k], query = positive_definite), k = 1..5);  
> seq(IsDefinite(A[k], query = indefinite), k = 1..5);  
> plot3d(f, x = -3/2..3/2, y = -3/2..3/2);
```

2.4 Taylorentwicklungen

Gegeben sei eine (hinreichend oft) differenzierbare Funktion $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ mit $U \subset \mathbb{R}^n$, $n \geq 1$. Die Taylorsche Formel liefert dann eine sukzessive Approximation der Funktionswerte von f in einer Umgebung eines Punktes $x_0 \in U$ durch die sogenannten *Taylor–Polynome*.

Für ein n -tupel $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ sei

$$|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$$

$$\alpha! = \alpha_1! \alpha_2! \cdot \dots \cdot \alpha_n!$$

Ist f eine $|\alpha|$ -mal stetig differenzierbare Funktion, so setzt man

$$D^\alpha f = D_1^{\alpha_1} D_2^{\alpha_2} \dots D_n^{\alpha_n} f = \frac{\partial^\alpha f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$$

wobei

$$D_i^{\alpha_i} = \underbrace{D_i D_i \dots D_i}_{\alpha_i\text{-mal}}$$

und für $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ sei $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \cdot \dots \cdot x_n^{\alpha_n}$.

Im Fall $n = 1$ erhält man für $f \in C^{k+1}(U)$ und $x, x_0 \in U$ die Formel

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k + R_{k+1}(x, x_0)$$

mit dem (Lagrangeschen) Restglied in der Form

$$R_{k+1}(x, x_0) = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}(x - x_0)^{k+1}$$

für ein geeignetes ξ zwischen x und x_0 .

Im mehrdimensionalen Fall $n > 1$ lautet der Taylorsche Satz:

Sei $U \subset \mathbb{R}^n$ offen, $x \in U$ und $\xi \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor derart, dass die Strecke $x + t\xi$, $0 \leq t \leq 1$, ganz in U liegt. Weiter sei $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine $(k+1)$ -mal stetig differenzierbare Funktion. Dann existiert ein $\theta \in [0, 1]$, so dass

$$f(x + \xi) = \sum_{|\alpha| \leq k} \frac{D^\alpha f(x)}{\alpha!} \xi^\alpha + \sum_{|\alpha|=k+1} \frac{D^\alpha f(x + \theta\xi)}{\alpha!} \xi^\alpha$$

Als Corollar folgt für eine k -mal stetig differenzierbare Funktion die Formel

$$f(x + \xi) = \sum_{|\alpha| \leq k} \frac{D^\alpha f(x)}{\alpha!} \xi^\alpha + o(\|\xi\|^k) \quad \text{für } \xi \rightarrow 0$$

Zur Berechnung von Taylorentwicklungen stehen in MAPLE die beiden Befehle `taylor` und `mtaylor` zur Verfügung, die sich in ihrer Syntax sehr ähneln, in ihrer Ausgabe aber leicht unterscheiden.

- Der `taylor`-Befehl hat folgende grundlegende Gestalt:

$$> \text{taylor}(A, x = a, k + 1);$$

Dabei ist A ein Ausdruck in x , a der Entwicklungspunkt und $k + 1$ die Ordnung **inklusive** Restglied (mit der Voreinstellung $k = 5$). In der Ausgabe wird auch das Landau-Symbol angezeigt, so dass man das Ergebnis erst mit dem Befehl `convert` in ein Polynom umwandeln muss.

- Der Befehl `mtaylor` hat folgende grundlegende Form:

$$> \text{mtaylor}(A, [x_1 = y_1, \dots, x_n = y_n], k + 1);$$

A ist jetzt ein Ausdruck in $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, $(y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$ der Entwicklungspunkt und $k + 1$ die Ordnung – wieder inklusive Restglied. Die Ausgabe enthält **kein** Landau-Symbol, kann also direkt als Taylorpolynom $T_k(x, y)$ weiterverarbeitet werden.

Beispiel: Für $n = 1$ betrachten wir die Funktion

$$f(x) = \frac{\sqrt{1+x}}{\sqrt{1+x^2}}$$

und berechnen mit dem Befehl `taylor` die Taylorentwicklung um $x_0 = 0$.

```
> f := x -> sqrt(1+x)/sqrt(1+x^2);  
> t := taylor(f(x), x = 0, 8);  
> p := convert(t, polynom);
```

Damit enthält der Ausdruck `p` jetzt das Taylorpolynom mit Ordnung 7.

Nun können wir etwa die Taylorpolynome erster bis dritter Ordnung mit der Funktion `f` mit Hilfe des Befehls `plot` graphisch vergleichen.

```
> s := seq(convert(taylor(f(x), x = 0, k), polynom), k = 2..4);  
> plot({f(x), s}, x = -0.8..0.8);
```

Weitere Beispiele zeigen wir wieder direkt in MAPLE.

Beispiel: Für $n = 2$ betrachten wir die Funktion

$$f(x, y) = (1 - y^2) \exp(-x^2 - y)$$

und berechnen mit dem Befehl `mtaylor` die Taylorentwicklung um $x_0 = 0$.

```
> f := (x, y) -> (1 - y^2) * exp(-x^2 - y);  
> p := seq(mTaylor(f(x, y), [x, y], k), k = 1..9);  
> seq(print(p[k]), k = 1..6);
```

Um zu sehen, wie gut die Taylorpolynome die gegebene Funktion annähern, visualisieren wir die Funktion und die Taylorpolynome mit dem `plot3d`-Befehl:

```
> plot3d(f(x, y), x = -1..1, y = -1..1, view = 0..3/2,  
> orientation = [-30, 70], axes = boxed);  
> plot3d(p[6], x = -1..1, y = -1..1, view = 0..3/2,  
> orientation = [-30, 70], axes = boxed);  
> animate(plot3d, [{f(x, y), p[9]}, x = -1..1, y = -1..1, view = 0..3/2,  
> orientation = [t, 70], axes = boxed], t = 0..360);
```

3 Integration

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit dem Einsatz von MAPLE zur Berechnung von Integralen.

Dabei unterteilen wir das Kapitel in die folgenden Unterabschnitte:

- Das Riemannsches Integral
- Substitutionsregel und partielle Integration
- Uneigentliche und parameterabhängige Integrale
- Asymptotische Entwicklungen von Integralen

Als mathematische Grundlage beziehen wir uns wieder auf die Analysis–Lehrbücher von Otto Forster und fassen gleichzeitig die Abschnitte 18–20 und 32 aus dem MAPLE–Lehrbuch von Braun und Meise zusammen.

Für den letzten Abschnitt empfehlen wir als weiterführende Lektüre das Buch *Perturbation Methods* von E.J. Hinch, Cambridge University Press, 1994.

3.1 Das Riemannsches Integral

Ist $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine Riemann-integrierbare Funktion, so kann ihr Integral als Grenzwert von Riemannschen Summen

$$\sum_{k=0}^{n-1} f(\xi_k)(x_{k+1} - x_k)$$

dargestellt werden.

Dabei ist

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$$

eine Unterteilung von $[a, b]$ und $\xi_k \in [x_k, x_{k+1}]$.

Beispiel: Mit Hilfe der bereits aus Kapitel 2 bekannten Befehlen `sum` und `limit` lassen sich in MAPLE die Grenzwerte Riemannscher Summen berechnen:

$$\begin{aligned} > S := \text{sum}\left(\frac{\exp(k/n)}{n}, k = 0..n - 1\right); \\ > \text{limit}(S, n = \text{infinity}); \end{aligned}$$

Wir verwenden also eine äquidistante Unterteilung des Intervalls $[0, 1]$ sowie $\xi_k = x_k, k = 0, \dots, n - 1$.

Bemerkung: Im MAPLE-Paket Student [Calculus1] steht zur Visualisierung Riemannscher Summen der Befehl RiemannSum zur Verfügung:

```
> with(Student[Calculus1]);
```

```
> RiemannSum(exp(x), x = 0..1, output = plot, method = left, partition = 20);
```

Zur Berechnung bestimmter Integrale verwendet man den MAPLE-Befehl int:

```
> int(f(x), x = a..b);
```

falls $f(x)$ eine über die Pfeilnotation definierte Funktion ist bzw.

```
> int(A, x = a..b);
```

falls A ein von x abhängiger Ausdruck (oder der Namen eines solchen) ist.

Beispiele: Weitere Beispiele und Erläuterungen in der Vorlesung.

```
> Int(sqrt(1 - x2), x = -1..1) = int(sqrt(1 - x2), x = -1..1);
```

```
> Int(sin(x)/x, x = 0..Pi) = int(sin(x)/x, x = 0..Pi);
```

```
> Int(xn, x = 1..a) = int(xn, x = 1..a);
```

3.2 Substitutionsregel und partielle Integration

Mit Hilfe des `int`-Befehls berechnet MAPLE natürlich auch die Stammfunktion einer integrierbaren Funktion $f = f(x)$:

$$\begin{aligned} > \text{Int}(\text{sqrt}(1 + x), x) = \text{int}(\text{sqrt}(1 + x), x); \\ \int \sqrt{1 + x} \, dx &= \frac{2}{3}(1 + x)^{1/2} \end{aligned}$$

Das Ergebnis läßt sich im Prinzip mit dem `diff`-Befehl überprüfen, aber es kann auch vorkommen, dass die von MAPLE angegebene Funktion **keine** Stammfunktion ist.

MAPLE kann aber auch

- die Substitutionsregel anwenden,
- partiell integrieren und
- eine Partialbruchzerlegung durchführen.

Die entsprechenden Befehle sind `Change`, `Parts` und `convert(r,parfrac,x)`, was wir anhand einiger Beispiele demonstrieren wollen.

Beispiel: Wir betrachten das unbestimmte Integral

$$\int \frac{\sin(\ln(x))}{x} dx$$

und substituieren $u = \ln(x)$. Mit $du/dx = 1/x$ ergibt sich

$$\int \frac{\sin(\ln(x))}{x} dx = \int \sin(u) du = -\cos(u) = -\cos(\ln(x))$$

Eine Umsetzung in MAPLE lautet:

```
> with(IntegrationTools);  
> h := Int( $\frac{\sin(\ln(x))}{x}$ , x);  
> Change(h, ln(x) = u);  
> value(%);  
> h = subs(u = ln(x), %);
```

Man muss zunächst das Paket `IntegrationTools` laden, um den Befehl `Change` zur Verfügung zu haben.

Beispiel: Hier zur Erinnerung die Formel der *partiellen Integration*:

$$\int_a^b u(x)v'(x) dx = u(x)v(x) \Big|_a^b - \int_a^b u'(x)v(x) dx$$

Ebenfalls im Paket `IntegrationTools` befindet sich der Befehl `Parts`, der zwei Argumente besitzt:

- das erste Argument ist ein bestimmtes oder unbestimmtes Integral,
- das zweite Argument ist der Teil des Integranden, der differenziert werden soll.

Ein symbolisches Beispiel in MAPLE:

```
> g := Int(u(x) * D(v)(x), x);  
> g = Parts(g, u(x));
```

Ein MAPLE–Beispiel für ein bestimmtes Integral:

```
> h := Int(x * sin(x), x = 0..Pi);  
> h = Parts(h, x);  
> h = value(rhs(%));
```

Beispiel: Aus den Analysis–Vorlesungen wissen Sie, dass die Stammfunktion einer gebrochen rationalen Funktion $r = r(x)$ leicht berechnet werden kann, wenn eine *Partialbruchzerlegung* von $r(x)$ vorliegt.

Zur Berechnung einer Partialbruchzerlegung existiert der MAPLE–Befehl

```
> convert(r, parfrac, x);
```

Dabei ist r ein Ausdruck in x , der eine gebrochen rationale Funktion darstellt. Ist $r(x)$ eine über die Pfeilnotation definierte Funktion, so lautet der entsprechende Befehl

```
> convert(r(x), parfrac, x);
```

Das folgende Beispiel liefert nach der Berechnung der Partialbruchzerlegung die Stammfunktion mittels des `int`–Befehls:

```
> r := 
$$\frac{(2 \cdot x^4 - 6 \cdot x^3 + 3 \cdot x^2 + 6 \cdot x - 2)}{x^5 - 3 \cdot x^4 + 3 \cdot x^3 - x^2};$$

```

```
> r = convert(r, parfrac, x);
```

```
> Int(r, x) = int(r, x);
```

3.3 Uneigentliche und parameterabhängige Integrale

Als *uneigentliche* Integrale bezeichnet man Integrale, bei denen der Integrationsbereich *nicht* beschränkt ist.

Ein klassisches Beispiel ist die Gammafunktion $\Gamma = \Gamma(x)$ definiert als

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

mit $\Gamma(n+1) = n!$ für $n \in \mathbb{N}$.

Bei einem *parameterabhängigen* Integral integriert man eine Funktion $f(x, y)$ bezüglich einer Variablen aus und erhält damit eine Funktion einer Veränderlichen:

$$g(x) = \int f(x, y) dy$$

Ein klassisches Beispiel hierfür ist die *Fourier-Transformation* einer integrierbaren Funktion $f \in L^1(\mathbb{R})$

$$\hat{f}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixt} dx$$

Die *Laplace-Transformation* ist ein weiteres bekanntes Beispiel.

Beispiel: Wir geben im Folgenden einige Beispiele für uneigentliche Integrale und zeigen dann direkt in der Vorlesung die entsprechenden Berechnungen in MAPLE:

$$\int_0^{\infty} x e^{-x} dx = 1$$

$$\int_2^{\infty} \frac{1}{x \ln(x)^2} dx = \frac{1}{\ln(2)}$$

$$\int_2^{\infty} \frac{1}{x \ln(x)} dx = \infty$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\ln(x)^2}{(1+x)^2} dx = \frac{1}{3} \pi^2$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+x^8} dx = \frac{1}{4} \frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi}{8}\right)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+x^4+x^8} dx = \frac{\pi}{\sqrt{3}}$$

Prinzipiell kann man mit MAPLE die Fourier–Transformierte einer Funktion über den `int`–Befehl berechnen lassen, da der Integrationsbereich unbeschränkt sein kann. Es ist aber empfehlenswert dazu die beiden Befehle `fourier` und `invfourier` aus dem Paket `inttrans` (Integraltransformationen) zu verwenden:

```
> fourier(A, x, t);
```

Dabei ist A wieder ein Ausdruck in x , von dem die Fourier–Transformierte bezüglich x berechnet werden soll. Die Angabe t im dritten Argument legt fest, dass die Fourier–Transformierte durch die Variable t ausgedrückt werden soll. Entsprechend erhält man die *inverse* Fourier–Transformation über den Befehl

```
> invfourier(A, t, x);
```

Beispiel: Die Fourier–Transformierte der Funktion $f(x) = e^{-|x|}$ ist gegeben durch

$$\hat{f}(t) = 2/(1 + t^2)$$

In der MAPLE–Syntax:

```
> fourier(exp(-abs(x)), x, t);
```

3.4 Asymptotische Entwicklungen von Integralen

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der Herleitung von (asymptotischen) Reihenentwicklungen von Grenzwerten $\lim_{x \rightarrow x_0} I(x)$ von Funktionen, die als (uneigentliche oder parameterabhängige) Integrale der Form

$$I(x) = \int_a^b f(x, t) dt \quad \text{mit } a, b \in \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$$

definiert sind.

In der *asymptotischen Analysis* existieren eine Reihe von Methoden solche Reihenentwicklungen herzuleiten:

- geeignete partielle Integration,
- das Watson–Lemma,
- die Methode des steilsten Abstiegs und
- die Methode der stationären Phase.

Wir beginnen mit einem klassischen Beispiel, nämlich der Herleitung einer Reihenentwicklung für die Fehlerfunktion $\operatorname{erf}(x)$ für $|x| > 1$.

Beispiel: Wir betrachten die *Fehlerfunktion* $\operatorname{erf} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definiert als

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

die vor allem in der Statistik oder bei der Theorie partieller Differentialgleichungen ihre Anwendung findet.

Zum Beispiel läßt sich die Verteilungsfunktion $F(x)$ der *Standardnormalverteilung* mit Hilfe der Fehlerfunktion ausdrücken:

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right) \right)$$

Der Wertebereich der Fehlerfunktion ist das Intervall $(-1, 1)$: die Funktion ist streng monoton wachsend und es gilt

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \operatorname{erf}(x) = -1 \quad \text{bzw.} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{erf}(x) = 1$$

Die Funktion ist aber nicht in geschlossener Form darstellbar, sodass man zur Berechnung der Funktionswerte geeignete Entwicklungen der Fehlerfunktion – etwa mit Hilfe einer Potenzreihendarstellung in x – herleiten muss.

Der Integrand $\exp(-t^2)$ ist eine in der komplexen Ebene analytische Funktion und kann daher in eine auf ganz \mathbb{R} konvergente Potenzreihe entwickelt werden:

$$e^{-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{t^{2n}}{n!}$$

Durch gliedweise Integration erhalten wir damit eine auf ganz \mathbb{R} konvergente Potenzreihenentwicklung der Fehlerfunktion:

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(x) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{t^{2n}}{n!} dt \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x (-1)^n \frac{t^{2n}}{n!} dt \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)n!} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{10}x^5 - \frac{1}{42}x^7 + \frac{1}{216}x^9 - \frac{1}{1320}x^{11} + \dots \right) \end{aligned}$$

Frage: Ist das ein guter Ansatz, um Funktionswerte der Fehlerfunktion zu berechnen?

Leider ist die von uns hergeleitete Potenzreihenentwicklung der Fehlerfunktion **alternierend** und daher nicht für alle $x \in \mathbb{R}$ zu gebrauchen. Entscheidend ist die Größenordnung von $|x|$: sei

$$p_N(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)n!}$$

die aus den ersten N Termen bestehende zugehörige endliche Potenzreihe.

- Für $|x| \ll 1$ genügen wenige Terme, um eine hinreichend genaue Approximation der Funktionswerte der Fehlerfunktion zu erhalten:

$$|\operatorname{erf}(1/4) - p_3(1/4)| \leq 1 \cdot 10^{-5}$$

- Für $|x|$ in der Nähe der Eins bestimmten im wesentlichen die (betragsmäßigen) Koeffizienten $c_n = 1/((2n+1)n!)$ die Approximationsgüte:

$$|\operatorname{erf}(1) - p_3(1)| \leq 1 \cdot 10^{-1}$$

$$|\operatorname{erf}(1) - p_8(1)| \leq 1 \cdot 10^{-5}$$

- Für $|x| \gg 1$ muss N sehr groß gewählt werden, um die Funktionswerte hinreichend genau zu approximieren:

$$|\operatorname{erf}(3) - p_3(3)| \leq 1 \cdot 10^2$$

$$|\operatorname{erf}(3) - p_8(3)| \leq 1 \cdot 10^3$$

$$|\operatorname{erf}(3) - p_{25}(3)| \leq 1 \cdot 10^{-5}$$

Der Grund für die schlechte Konvergenzeigenschaft unserer Potenzreihenentwicklung für $|x| \gg 1$ liegt daran, dass die Fehlerfunktion für wachsende $|x|$ *exponentiell schnell* gegen ± 1 konvergiert und dies mit Hilfe von Potenzen in x nur schlecht wiedergegeben werden kann.

Alternativ schreiben wir

$$\operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$$

und verwenden beim Integral auf der rechten Seite *partielle Integration*:

$$\int_x^\infty e^{-t^2} dt = \int_x^\infty \frac{d}{dt} e^{-t^2} \left(-\frac{1}{2t} \right) dt = -\frac{e^{-t^2}}{2t} \Big|_x^\infty - \int_x^\infty \frac{e^{-t^2}}{2t^2} dt = \frac{e^{-x^2}}{2x} - \int_x^\infty \frac{e^{-t^2}}{2t^2} dt$$

Führt man das Prinzip der partiellen Integration fort, so erhält man schließlich folgende Reihenentwicklung

$$\begin{aligned} \operatorname{erf}(x) &= 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt \\ &= 1 - \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} (1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n-1)) \left(-\frac{1}{2x^2}\right)^n \\ &= 1 - \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}} \left(1 - \frac{1}{2x^2} + \frac{3}{4x^4} - \frac{15}{8x^6} + \dots\right) \end{aligned}$$

Setzen wir nun

$$q_N(x) = 1 - \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{N-1} (1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2n-1)) \left(-\frac{1}{2x^2}\right)^n$$

so erhalten wir für $q_1(x) = 1 - \frac{e^{-x^2}}{x\sqrt{\pi}}$

$$|\operatorname{erf}(3) - q_1(3)| \leq 1 \cdot 10^{-5}$$

Aber: Die durch partielle Integration hergeleitete Reihe ist für alle $x \in \mathbb{R}$ **divergent!**

Unsere oben stehenden Berechnungen lassen sich alle in MAPLE durchführen:

```
> n := 6;
> p1 := taylor(exp(-t^2), t, n);
> p := convert(p1, polynom);
> Ef := 2 * int(p, t = 0..x)/sqrt(Pi);
> evalf(abs(erf(1/4) - subs(x = 1/4, Ef)));
> with(IntegrationTools);
> E := Int(exp(-t^2), t = x..infinity);
> Parts(E, -1/(2*t));
> Ef := 1 - exp(-x^2)/(x*sqrt(Pi));
> evalf(abs(erf(3) - subs(x = 3, Ef)));
```

Eine Approximation der Fehlerfunktion für große $|x|$ geht aber in MAPLE einfacher:

```
> asympt(2 * int(exp(-t^2), t = 0..x)/sqrt(Pi), x, 4);
```


Der MAPLE-Befehl

`> asympt(A, x, n);`

liefert also (falls möglich) eine asymptotische Entwicklung eines von x abhängigen Ausdrucks A im Grenzfall $x \rightarrow \infty$. Dabei ist $n \in \mathbb{N}$ die Ordnung der Entwicklung mit der Voreinstellung $n = 6$.

Einige weitere Beispiele zur asymptotischen Entwicklung von Integralen:

- Eine Aufspaltung des Integrals und wiederholte partielle Integration liefert:

$$\int_x^\infty e^{-t^4} dt \sim \Gamma\left(\frac{5}{4}\right) - x + \frac{x^5}{5} - \frac{x^9}{18} \quad \text{für } x \rightarrow 0$$

- Wieder mit partieller Integration ergibt sich:

$$\int_0^x e^{t^2} dt \sim \frac{1}{2x} e^{x^2} \quad \text{für } x \rightarrow \infty$$

- Mit Hilfe einer Deformation des Integralpfads in der komplexen Ebene erhält man:

$$\int_0^1 e^{ixt} \ln(t) dt \sim i \frac{\ln(x)}{x} - \frac{i\gamma + \pi/2}{x} \quad \text{für } x \rightarrow \infty$$

4 Spezielle Funktionen

Unter **speziellen Funktionen** versteht man in der Mathematik

- elementar darstellbare Funktionsklassen, die besondere Eigenschaften besitzen, wie etwa die **Legendre–Polynome**, die ein vollständiges Orthogonalsystem des Hilbertraums $L^2([-1, 1], \mathbb{R})$ aller quadratintegrierbarer auf $[-1, 1]$ definierten reellwertigen Funktionen mit Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x)g(x) \, dx$$

bilden,

- spezielle Funktionen, die sich **nicht** in geschlossener Form durch **elementare** Funktionen darstellen lassen, wie etwa der **Integralsinus**

$$\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} \, dt$$

der bereits im letzten Kapitel aufgetaucht ist.

Computeralgebrasysteme wie MAPLE haben das Teilgebiet **Spezielle Funktionen** in der Mathematik revolutioniert:

- in dem Nachschlagewerk von Milton Abramowitz und Irene A. Stegun
Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1972
sind auf mehr als 1000 Seiten Definitionen, Approximationsformeln, Graphiken und Wertetabellen von unzähligen speziellen Funktionen zu finden.
- in den MAPLE-Versionen ab 1995 sind nahezu alle speziellen Funktionen aus dem Nachschlagewerk sowie weitere spezielle Funktionen (algebraisch) implementiert und können bei der Lösung mathematischer Probleme verwendet werden.

Wir zeigen dies im vorliegenden Kapitel anhand dreier Beispiele: **orthogonale Polynome**, **Besselfunktionen** sowie der **Lambertschen W -Funktion**.

Neben dem Buch von Braun/Meise verweisen wir als weiterführende Literatur auf

- Earl D. Rainville, *Special Functions*, New York, 1972,
- R.M. Corless et al., *On the Lambert W Function*, *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 5 (1996), 329–359.

4.1 Orthogonale Polynome

MAPLE stellt mit dem Paket `orthopoly` die gängigen orthogonalen Polynome zur Verfügung:

- $G(n, \alpha, x)$ generiert das n -te Gegenbauer-Polynom,
- $H(n, x)$ das n -te Hermite-Polynom,
- $L(n, x)$ das n -te Laguerre-Polynom,
- $L(n, \alpha, x)$ das n -te verallgemeinerte Laguerre-Polynom,
- $P(n, x)$ das n -te Legendre-Polynom,
- $P(n, a, b, x)$ das n -te Jakobi-Polynom,
- $T(n, x)$ das n -te Tschebycheff-Polynom 1. Art und
- $U(n, x)$ das n -te Tschebycheff-Polynom 2. Art.

Wir beschäftigen uns zunächst mit einigen Grundlagen zu orthogonalen Polynomen.

Einfache Mengen von Polynomen

Sei $\{q_n(x)\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ eine **einfache** Menge von reellwertigen Polynomen einer Veränderlichen $x \in \mathbb{R}$, d.h. das Polynom $q_n(x)$ besitzt genau den Grad n .

Dann existieren Konstanten c_k , sodass sich jedes Polynom $p(x)$ vom Grad m als Linearkombination

$$p(x) = \sum_{k=0}^m c_k q_k(x)$$

darstellen läßt.

Orthogonalität

Für eine auf dem Intervall $[a, b]$ definierte (und integrierbare) Gewichtsfunktion $w(x) > 0$ nennt man die Polynome **orthogonal** bzgl. w auf dem Intervall $[a, b]$, falls gilt

$$\langle q_m, q_n \rangle = \int_a^b w(x) q_m(x) q_n(x) dx = 0 \quad \text{für } m \neq n$$

Äquivalent zu dieser Orthogonalitätsbedingung ist die Eigenschaft

$$\int_a^b w(x) x^k q_n(x) dx = 0 \quad k = 0, 1, \dots, n-1$$

Klassische Beispiele:

- Legendre–Polynome

$$(a, b) = (-1, 1), \quad w(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

- Tschebycheff–Polynome 1. Art

$$(a, b) = (-1, 1), \quad w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1$$

- Laguerre–Polynome

$$(a, b) = (0, \infty), \quad w(x) = e^{-x}, \quad L_1(x) = 1 - x, \quad L_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1$$

- Hermite–Polynome

$$(a, b) = (-\infty, \infty), \quad w(x) = e^{-x^2}, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2$$

- Gegenbauer–Polynome (mit $\alpha > -1/2$)

$$(a, b) = (-1, 1), \quad w(x) = (1-x^2)^{\alpha-1/2}, \quad G_1^{(\alpha)}(x) = 2\alpha x, \quad G_2^{(\alpha)}(x) = 2\alpha(\alpha+1)x^2 - \alpha$$

Repräsentationsformeln orthogonaler Polynome

Spezielle Klassen orthogonaler Polynome lassen sich in verschiedenen Darstellungen angeben.

Wesentliche Formen sind dabei

- Darstellungen über Dreitermrekursionen,
- Lösungsscharen parameterabhängiger gewöhnlicher Differentialgleichungen,
- Rodrigues–Formeln und
- Darstellungen mittels erzeugender Funktionen.

In dem Textbuch von Rainville wird anhand einer Reihe von Beispielen gezeigt, wie die unterschiedlichen Darstellungen ineinander überführt werden können.

Auf den folgenden Seiten gehen wir kurz auf die vier oben genannten Darstellungsformen ein und geben Beispiele zu den auf der vorhergehenden Seite vorgestellten orthogonalen Polynome.

Dreitermrekursion und orthogonale Polynome

Sei $\{q_n(x)\}$ eine einfache Menge orthogonaler Polynome mit den Höchstkoeffizienten $h_n, n \geq 0$. Dann gibt es Zahlen c_{n+1}, a_n, b_{n-1} , sodass gilt

$$c_{n+1}q_{n+1}(x) = (x - a_n)q_n(x) - b_{n-1}q_{n-1}(x) \quad \text{für } n \geq 0$$

mit den Startpolynomen $q_{-1}(x) = 0$ und $q_0(x) = 1$ sowie

$$c_{n+1} = \frac{h_n}{h_{n+1}}, \quad a_n = \frac{\langle xq_n, q_n \rangle}{\langle q_n, q_n \rangle}, \quad b_{n-1} = \frac{h_{n-1} \langle q_n, q_n \rangle}{h_n \langle q_{n-1}, q_{n-1} \rangle}$$

Beispiele:

Tschebycheff–Polynome 1. Art

$$c_{n+1} = \frac{1}{2}, \quad a_n = 0, \quad b_{n-1} = \frac{1}{2}$$

Laguerre–Polynome

$$c_{n+1} = -(n+1), \quad a_n = 1 + 2n, \quad b_{n-1} = -n$$

Hermite–Polynome

$$c_{n+1} = \frac{1}{2}, \quad a_n = 0, \quad b_{n-1} = n$$

Gewöhnliche Differentialgleichungen und orthogonale Polynome

Orthogonale Polynome können als Lösungsschar einer parameterabhängigen Differentialgleichung geschrieben werden.

Beispiel: Das Legendre–Polynome $P_n(x)$ löst die gewöhnliche Differentialgleichung

$$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + n(n - 1)y(x) = 0$$

Rodrigues–Formeln und orthogonale Polynome

Eng verwandt damit sind die Rodrigues–Formeln. Darunter versteht man die Darstellung eines orthogonalen Polynom als n -te Ableitung einer elementaren Funktion.

Beispiele:

- Legendre–Polynome

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n]$$

- Laguerre–Polynome

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

Erzeugende Funktionen und orthogonale Polynome

Wir betrachten eine Funktion $F(x, t)$, die eine formale (nicht notwendigerweise konvergente) Potenzreihenentwicklung in t besitzt:

$$F(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n f_n(x) t^n$$

wobei $\{c_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ eine gegebene von x und t unabhängige Folge reeller Zahlen ist.

Man bezeichnet die Funktion $F(x, t)$ dann als **erzeugende Funktion** der Funktionenfolge $\{f_n(x)\}_{n \in \mathbb{N}_0}$. In unserem Fall sind die f_n 's gerade orthogonale Polynome.

Beispiele:

- Legendre–Polynome

$$(1 - 2xt - t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x) t^n$$

- Hermite–Polynome

$$\exp(2xt - t^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n$$

4.2 Die Bessel–Funktionen

Die *Bessel–Funktionen* (oder auch *Zylinderfunktionen*) gehören zu den am häufigsten verwendeten speziellen Funktionen.

In MAPLE sind die folgenden Bessel–Funktionen verfügbar:

- $\text{BesselJ}(\gamma, x)$ als Bessel–Funktion 1. Art mit Parameter $\gamma \in \mathbb{C}$,
- $\text{BesselY}(\gamma, x)$ als Bessel–Funktion 2. Art,
- $\text{BesselI}(\gamma, x)$ als modifizierte Bessel–Funktion 1. Art,
- $\text{BesselK}(\gamma, x)$ als modifizierte Bessel–Funktion 2. Art,
- $\text{HankelH1}(\gamma, x) = \text{BesselJ}(\gamma, x) + i \cdot \text{BesselY}(\gamma, x)$,
- $\text{HankelH2}(\gamma, x) = \text{BesselJ}(\gamma, x) - i \cdot \text{BesselY}(\gamma, x)$.

wobei die Hankel–Funktionen auch als Bessel–Funktionen 3. Art bezeichnet werden.

Alle Funktionen sind Lösungen der *Besselschen Differentialgleichung*.

Die nach Friedrich Wilhelm Bessel (deutscher Naturwissenschaftler, 1784–1846) benannte **Besselsche Differentialgleichung** ist gegeben durch

$$x^2 y''(x) + xy'(x) + (x^2 - \gamma^2)y(x) = 0$$

mit $\gamma \in \mathbb{C}$.

Die allgemeine Lösung ist dann gegeben durch

$$y(x) = C_1 \cdot \text{BesselJ}(\gamma, x) + C_2 \cdot \text{BesselY}(\gamma, x)$$

Entsprechend erhalten wir für die (modifizierte) Besselsche Differentialgleichung

$$x^2 y''(x) + xy'(x) - (x^2 + \gamma^2)y(x) = 0$$

die allgemeine Lösung

$$y(x) = C_1 \cdot \text{BesselI}(\gamma, x) + C_2 \cdot \text{BesselK}(\gamma, x)$$

Wo taucht die Besselsche Differentialgleichung auf?

Es gibt zahlreiche Anwendungen in der Physik etc., bei denen Bessel-Funktionen eine Rolle spielen.

Eine Anwendung: Zylinderwellen bei der Wellengleichung

Wir betrachten die Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u$$

für eine unbekannte Funktion $u = u(x, t)$, $x \in \mathbb{R}^3$, $t > 0$, wobei der Vektor x in Zylinderkoordinaten gegeben ist, also

$$x = (r \cos \varphi, r \sin \varphi, z)^T$$

Entsprechend schreiben wir den Laplace-Operator Δ in Zylinderkoordinaten

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Wir suchen nun nach speziellen Lösungen der Form

$$u(x, t) = e^{it} g(r, \varphi)$$

d.h. u ist unabhängig von der Zylinderachse z und bzgl. der Zeitvariablen t eine Schwingung.

Einsetzen in die Wellengleichung ergibt dann

$$-g = \frac{\partial^2}{\partial r^2} g + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} g + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} g$$

Wählen wir nun für g einen *Produktansatz*

$$g(r, \varphi) = p(r)q(\varphi)$$

so muss gelten

$$-p(r)q(\varphi) = p''(r)q(\varphi) + \frac{p(r)}{r^2} q''(\varphi) + \frac{1}{r} p'(r)q(\varphi)$$

Das läßt sich aber umschreiben als

$$r^2 p''(r)q(\varphi) + r p'(r)q(\varphi) + r^2 p(r)q(\varphi) = -p(r)q''(\varphi)$$

oder noch besser

$$r^2 \frac{p''}{p} + r \frac{p'}{p} + r^2 = -\frac{q''}{q}$$

Da die linke Seite der letzten Gleichung nur von r abhängt und die rechte Seite nur von φ , muss gelten

$$r^2 \frac{p''}{p} + r \frac{p'}{p} + r^2 = \gamma^2 = -\frac{q''}{q}$$

mit einem $\gamma \in \mathbb{R}$.

Dies liefert aber gerade die Besselsche Differentialgleichung für die unbekannte Funktion $p = p(r)$:

$$r^2 p''(r) + r p'(r) + (r^2 - \gamma^2) p(r) = 0$$

und die Lösungen lassen sich mit Hilfe der Besselfunktionen angeben

$$p(r) = C_1 \cdot \text{BesselJ}(\gamma, r) + C_2 \cdot \text{BesselY}(\gamma, r)$$

Für die Funktion $q(\varphi)$ ergibt sich die Differentialgleichung

$$q''(\varphi) + \gamma^2 q(\varphi) = 0$$

mit der allgemeinen Lösung $q(\varphi) = D_1 \cos(\gamma\varphi) + D_2 \sin(\gamma\varphi)$.

Insgesamt erhalten wir also

$$u(x, t) = e^{it} \cdot (C_1 \cdot \text{BesselJ}(\gamma, r) + C_2 \cdot \text{BesselY}(\gamma, r)) \cdot (D_1 \cos(\gamma\varphi) + D_2 \sin(\gamma\varphi))$$

4.3 Die Lambertsche W -Funktion

Die nach dem Mathematiker Johann Heinrich Lambert (1728–1777) benannte Lambertsche W -Funktion ist definiert als die Umkehrfunktion von $f(x) = xe^x$, d.h. für $x \in \mathbb{R}$ gilt

$$x = W(x)e^{W(x)} \quad (1)$$

Nun gilt aber

$$f^{(n)}(x) = (x + n)e^x$$

und daher besitzt die Funktion $f(x)$ bei $x = -1$ ein globales Minimum. Das bedeutet aber, dass die Funktion $f(x)$ auf dem Intervall $(-\infty, 0]$ nicht injektiv ist.

Demnach besitzt die Lambertsche W -Funktion (auf dem Intervall $[-1/e, 0)$) zwei Funktionsäste:

- den sogenannten Hauptast $W_0(x) \geq -1$ und
- den Nebenast $W_{-1}(x) < -1$.

Erweitert man die Gleichung (1) auf komplexe Zahlen $z \in \mathbb{C}$, so besitzt die komplexwertige Lambertsche W -Funktion sogar unendlich viele Äste $W_k(x)$ mit $k \in \mathbb{Z}$.

MAPLE kennt die Lambertsche W -Funktion unter dem Namen $\text{LambertW}(x)$ bzw. $\text{LambertW}(k, x)$ mit $k \in \mathbb{Z}$, wobei k dann den entsprechenden Funktionsast angibt:

```
> f := x * exp(x);
> plot(f, x = -2..1);
> diff(f, x$n);
> solve(diff(f, x), x);
> ?LambertW;
> plot({LambertW(x), LambertW(-1, x)}, x = -1/2..3);
> alias(W = LambertW);
> dW := diff(W(x), x);
> plot({W(x), dW}, x = -1/2..3);
> Limit(W(x), x = infinity) = limit(W(x), x = infinity);
> int(W(x), x);
> int(W(x), x = 0..3);
> evalf(%);
```

Ein Beispiel aus der Mathematischen Biologie

Wir betrachten die *retardierte* gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{y}(t) = \alpha y(t - 1)$$

und suchen nach einer Lösung der Gleichung in der Form

$$y(t) = \exp(st) \quad \text{mit } s \in \mathbb{C} \text{ fest}$$

Einsetzen in die Differentialgleichung ergibt

$$s \exp(st) = \alpha \exp(s(t - 1)) \quad \Rightarrow \quad s \exp(s) = \alpha \quad \Rightarrow \quad s = W_k(\alpha)$$

Wir erhalten also eine Lösung der Gleichung, die die Lambertsche W -Funktion enthält:

$$y(t) = \exp(W_k(\alpha)t)$$

Da die Differentialgleichung *linear* ist, folgt mit dem *Superpositionsprinzip*

$$y(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \exp(W_k(\alpha)t)$$

mit geeigneten Koeffizienten $\{c_k\}_{k \in \mathbb{Z}}$.

5 Zufallszahlen und Monte-Carlo Methoden

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit Zufallszahlen bzw. Zufallszahlengeneratoren sowie der Monte-Carlo-Methode, die nicht ohne Zufallszahlengeneratoren auskommt.

Dabei unterteilen wir das Kapitel in die folgenden Unterabschnitte:

- Hochdimensionale numerische Integration
- Zufallszahlengeneratoren
- Quasi-Monte-Carlo-Methoden
- Anwendungen in MAPLE

Als zusätzliche Literatur verwenden wir dabei die Textbücher

- *Stochastik für Einsteiger* von N. Henze, Vieweg Verlag, 2003.
- *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods* von H. Niederreiter, SIAM, 1992.
- *Die Monte-Carlo-Methode* von I. M. Sobol, Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1991.

Zunächst aber einmal ein paar einschlägige Zitate zum Thema.

Der Mathematiker Norbert Henze schreibt in seinem oben genannten Lehrbuch am Anfang von Kapitel 20 (Pseudozufallszahlen und Simulation):

Die Simulation (von lateinisch simulare: ähnlich machen, nachahmen) stochastischer Vorgänge im Computer ist ein wichtiges Werkzeug zur Analyse von Zufallsphänomenen, welche sich aufgrund ihrer Komplexität einer analytischen Behandlung entziehen. Beispiele hierfür sind Lagerhaltungsprobleme mit komplizierter zufallsabhängiger Nachfrage, die möglichst naturgetreue Nachbildung von Niederschlagsmengen an einem Ort im Jahresverlauf oder das „Durchspielen“ von Verkehrsabläufen mit zufällig ankommenden Autos an einer Ampelkreuzung.

...

Bausteine für die stochastische Simulation sind sogenannte gleichverteilte Pseudozufallszahlen, die von Pseudozufallszahlengeneratoren erzeugt werden. Das im Folgenden nur der Kürze halber weggelassene Präfix Pseudo soll betonen, dass die durch Aufrufen von Befehlen oder Drücken von Tasten wie Random, RAN oder Rd bereitgestellten Zufallszahlen nur zufällig erzeugt scheinen.

Der Mathematiker I.M. Sobol schreibt im einleitenden Kapitel seines oben genannten Textbuchs:

Die Monte-Carlo Methode ist eine numerische Methode zur Lösung mathematischer Probleme mit Hilfe der Modellierung von Zufallsgrößen.

Weiter schreibt er über den Ursprung der Methode:

Als Geburtsjahr der Monte-Carlo-Methode gilt das Jahr 1949, in dem eine Arbeit mit dem Titel The Monte Carlo method erscheint. Als Begründer dieser Methode sind die Mathematiker J. v. Neumann und S. Ulam anzusehen.

Gemeint ist hier die Arbeit N. Metropolis und S. Ulam, *The Monte Carlo Method*, J. Amer. statistical Assoc., 44, 335–341 (1949).

Bezüglich der Namensgebung führt er weiter aus:

Die Bezeichnung Monte-Carlo-Methode geht auf die Stadt Monte Carlo im Fürstentum Monaco zurück, die besonders durch ihr Spielkasino bekannt geworden ist. Eines der einfachsten mechanischen Geräte zur Realisierung von Zufallsgrößen ist nämlich das Roulette. ... Hier wollen wir nur die häufig gestellte Frage beantworten: „Hilft die Monte-Carlo-Methode, beim Roulette-Spiel zu gewinnen?“ Nein, sie hilft nicht! Sie beschäftigt sich nicht einmal damit.

5.1 Hochdimensionale numerische Integration

Wir betrachten im Folgenden die numerische Integration in Dimension $s \geq 1$.

Die bekannteste Integrationsregel für $s = 1$ ist die zusammengesetzte Trapezregel, also

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \sum_{n=0}^m w_n f\left(\frac{n}{m}\right)$$

mit $m \in \mathbb{N}$ und den Gewichten w_n , wobei $w_0 = w_m = \frac{1}{2m}$ und $w_n = \frac{1}{m}$ für $n = 1, \dots, m-1$ gilt. Ist f zweimal stetig differenzierbar, so ist der Integrationsfehler von der Ordnung $O(m^{-2})$.

Im mehrdimensionalen Fall $s \geq 2$ sei der Integrationsbereich gerade durch $I^s = [0, 1]^s$ gegeben. Dann liefert ein kartesisches Produkt die mehrdimensionale Trapezregel in der Form

$$\int_{I^s} f(x) dx \approx \sum_{n_1=0}^m \dots \sum_{n_s=0}^m w_{n_1} \dots w_{n_s} f\left(\frac{n_1}{m}, \dots, \frac{n_s}{m}\right)$$

und der Integrationsfehler ist weiterhin von der Größenordnung $O(m^{-2})$, sofern die zweiten partiellen Ableitungen $\partial^2 f / \partial x_i^2$ für $i = 1, \dots, s$ auf I^s stetige Funktionen sind.

Betrachtet man den Fehler allerdings in Abhängigkeit der Knotenzahl $N = (m + 1)^s$, so ergibt sich

$$O(m^{-2}) = O(N^{-2/s})$$

und je größer die Dimension ist, desto schlechter wird die Integrationsregel: möchte man einen absoluten Fehler $\leq 10^{-2}$ haben, so benötigt man ungefähr 10^s Knoten. Dieses Phänomen wird auch als

Fluch der Dimension (engl. curse of dimensionality)

bezeichnet.^a

Die Monte-Carlo-Methode umgeht dieses Phänomen, indem hochdimensionale Integrale mit Hilfe von Zufallszahlen angenähert werden: sei $\{x_1, \dots, x_N\}$ eine Folge von (unabhängigen und identisch) gleichverteilten Zufallszahlen aus dem s -dimensionalen Einheitsintervall I^s . Dann ist eine Monte-Carlo-Integration gegeben durch

$$\int_{I^s} f(x) \, dx \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n)$$

^aIn der Finanzmathematik werden zum Beispiel Integrale mit Dimension $s \geq 1000$ betrachtet.

Die theoretischen Untersuchungen der Monte-Carlo-Methode basiert auf den Konzepten der Wahrscheinlichkeitstheorie, was wir hier nur kurz andeuten können:

- Man interpretiert das gegebene s -dimensionale Integral als *Erwartungswert* der Zufallsvariablen f

$$E(f) = \int_{I^s} f(x) dx$$

bzgl. der Gleichverteilung aus I^s .

- Nach dem *Gesetz der großen Zahlen* folgert man dann die *fast sichere* Konvergenz der Form

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) = E(f)$$

- Mit Hilfe der Varianz $\sigma^2(f)$ der Zufallsgröße f erhält man dann für die Monte-Carlo-Integration die *probabilistische* Fehlerordnung $O(N^{-1/2})$ – unabhängig von der Dimension s .

Man umgeht damit den *Fluch der Dimension*, erhält allerdings nur probabilistische Fehlerordnungen. Bei der praktischen Umsetzung gilt es zudem, *effiziente und hinreichend gute* Zufallszahlengeneratoren zu verwenden.

5.2 Zufallszahlengeneratoren

Bei der praktischen Umsetzung einer Monte-Carlo-Methode hängt die Qualität der numerischen Ergebnisse entscheidend von den zum Einsatz kommenden Zufallszahlengenerator ab, mit dem die notwendigen (Pseudo-)Zufallszahlen auf dem Computer generiert werden.

Dementsprechend gibt es eine große Zahl unterschiedlicher Generatoren, von denen wir im vorliegenden Abschnitt nur die beiden erst genannten genauer vorstellen wollen:

- die Methode der mittleren Ziffern von Quadraten,
- lineare Kongruenzgeneratoren,
- inverse Kongruenzgeneratoren,
- der Mersenne-Twister-Generator,
- der KISS-Generator von George Marsaglia.

Insbesondere die *Verschlüsselungstheorie* führte in den letzten Jahren zur Entwicklung von sogenannten *kryptographisch sicheren Generatoren*.

Der (wohl) erste Algorithmus zur Erzeugung von Pseudozufallszahlen wurde von *John von Neumann*^a vorgeschlagen: Gegeben sei die Zahl

$$x_0 = 0.9876$$

Wir quadrieren die Zahl und erhalten $x_0^2 = 0.97535376$. Aus der Zahlendarstellung entnehmen wir nun die mittleren vier Dezimalstellen und setzen

$$x_1 = 0.5353$$

Das Quadrat von x_1 ergibt $x_1^2 = 0.28654609$ und wir setzen daher

$$x_2 = 0.6546$$

Eine weitere Anwendung dieses Prinzips ergibt:

$$x_3 = 0.8501, \quad x_4 = 0.2670, \quad x_5 = 0.1289$$

Eine genauere Untersuchung zeigt, dass diese Methode mehr kleine Zahlen erzeugt als gewünscht ist.

^aJohn von Neumann, US-amerikanischer Mathematiker, 1903–1957, geboren in Budapest

Ein häufig verwendeter Zufallsgenerator ist der sogenannte *lineare Kongruenzgenerator*: gegeben seien die nichtnegativen ganzen Zahlen

m : Modul

a : Faktor

b : Inkrement

z_0 : Anfangswert

Das *iterative lineare Kongruenzschema* ist dann gegeben durch

$$z_{j+1} = a \cdot z_j + b \pmod{m} \quad (j = 0, 1, 2, \dots)$$

Aufgrund der Operation *modulo m* gilt stets

$$0 \leq z_j \leq m - 1 \quad (j = 0, 1, 2, \dots)$$

und durch die Normierung

$$x_j = \frac{z_j}{m}$$

liefert das Schema eine (gleichverteilte) Folge x_0, x_1, \dots im Einheitsintervall $[0, 1]$.

Beispiel: Wir betrachten die Zahlen

$$m = 100, a = 18, b = 11, z_0 = 40$$

Dann folgt:

$$z_1 = 18 \cdot 40 + 11 = 731 = 31 \pmod{100}$$

$$z_2 = 18 \cdot 31 + 11 = 569 = 69 \pmod{100}$$

$$z_3 = 18 \cdot 69 + 11 = 1253 = 53 \pmod{100}$$

und damit

$$x_0 = 0.4, x_1 = 0.31, x_2 = 0.69, x_3 = 0.53$$

Berechnet man die nächsten Folgenglieder erhält man allerdings

$$z_4 = 65, z_5 = 81, z_6 = 69 = z_2$$

d.h. nach zwei Schritten laufen wir in die *Periode* 69, 53, 65, 81 der Länge 4. Damit ist dieser Kongruenzgenerator vollkommen ungeeignet.

Es ist leicht einsichtig, dass ein linearer Kongruenzgenerator aufgrund der oben angegebenen Rekursionsvorschrift eine *maximale Periodenlänge* besitzt und diese wegen

$$z_j \in \{0, 1, \dots, m - 1\} \quad (j = 0, 1, 2, \dots)$$

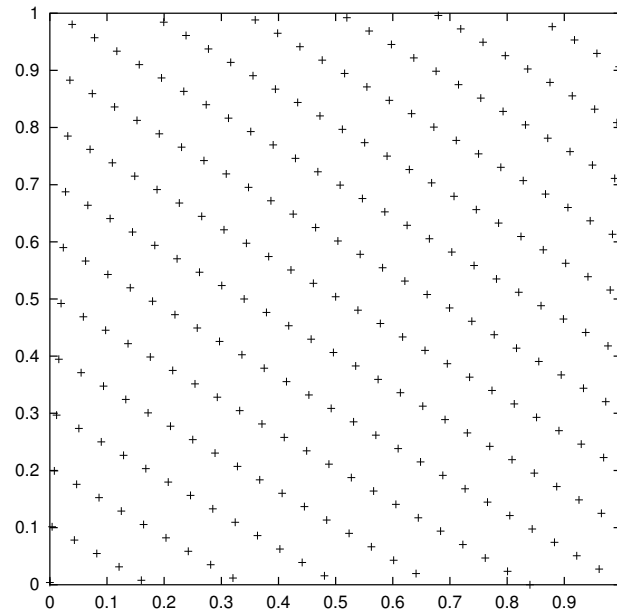
gerade durch die Zahl m gegeben ist, d.h. in praktischen Anwendungen sollte daher m möglichst groß wählen.

Im Fall $b \geq 1$ wird diese Länge genau dann erreicht, wenn folgende Bedingungen erfüllt sind:

- Das Inkrement b ist teilerfremd zu m .
- Jede Primzahl, die m teilt, teilt auch $a - 1$.
- Ist m durch 4 teilbar, so muss auch $a - 1$ durch 4 teilbar sein.

Eine weitere prinzipielle Schwäche linearer Kongruenzgeneratoren ist deren *Gitterstruktur*. Fasst man aufeinanderfolgende Punkte der Folge zu s -Tupeln zusammen, d.h. man betrachtet die s -dimensionalen Vektoren $(x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+s-1})$, $i \geq 0$, so läßt sich leicht zeigen, dass diese stets auf einem Gitter im s -dimensionalen Raum \mathbb{R}^s liegen.

Der lineare Kongruenzgenerator mit den Parametern $m = 256$, $a = 25$, $b = 1$ und $z_0 = 1$ erzeugt die nachfolgend dargestellte Punktmenge im Einheitsquadrat.



Ein historisches Beispiel dazu ist der Anfang der 60er Jahre des letzten Jahrhunderts von der Computerfirma IBM eingeführte Zufallsgenerator RANDU mit den Parametern $m = 2^{31}$, $a = 65539$, $b = 0$. Dieser Pseudo-Zufallszahlengenerator besitzt die Periode 2^{29} , erzeugt aber 2^{29} Tripel (x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) , die auf nur 15 (!) Ebenen im \mathbb{R}^3 liegen. Diese Eigenschaft wurde erst sehr viel später entdeckt und nach Bekanntwerden von der IBM umgehend korrigiert.

5.3 Quasi-Monte Carlo Methoden

Monte-Carlo-Methoden liefern universell einsetzbare Simulationsverfahren mit vielen praktischen Anwendungen, insbesondere in der Physik, den Wirtschaftswissenschaften oder der Finanzmathematik.

Es gibt allerdings auch einige Defizite bei der Methode:

- alle Fehlerabschätzungen gelten im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie,
- spezielle Eigenschaften des zu behandelten Problems bleiben unberücksichtigt, zum Beispiel die Regularität des Integranden bei der in Abschnitt 5.1 behandelten hochdimensionalen Integration,
- die verwendeten Zufallszahlengeneratoren sind häufig fehlerbehaftet.

Daher werden seit den 60er Jahren des letzten Jahrhunderts sogenannte *Quasi-Monte-Carlo-Methoden* entwickelt, denen die folgende Idee zugrundeliegt:

Ersetze die verwendeten Pseudozufallszahlen durch deterministische Punktmengen mit sogenannter *niedriger Diskrepanz*, die mathematisch *kontrolliert* werden können.

Der Begriff der Diskrepanz von Punktmengen aus $[0, 1]^s$

Ein zentrales mathematisches Werkzeug bei Quasi-Monte-Carlo-Methoden ist der von Bergström im Jahr 1936 eingeführte Begriff der *Diskrepanz*, der die Abweichung einer gegebenen Punktmenge in I^s von der Gleichverteilung quantifiziert.

Für $s = 1$ seien die N Punkte $\{x_1, \dots, x_N\}$ aus dem Intervall $I = [0, 1]$ gegeben. Wir setzen jetzt für ein $a \in I$ als $A(a; x_1, \dots, x_N)$ die Anzahl der Punkte $x_i, i = 1, \dots, N$, die im Intervall $[0, a]$ liegen und definieren die *Stern-Diskrepanz* $D_N^*(x_1, \dots, x_N)$ als

$$D_n^*(x_1, \dots, x_N) = \sup_{a \in [0,1]} \left| \frac{A(a; x_1, \dots, x_N)}{N} - a \right|$$

Entsprechend definiert man die (*extreme*) *Diskrepanz* der Punktmenge $\{x_1, \dots, x_N\}$, indem man das Supremum über alle Teilintervalle $[a, b] \subseteq I$ bildet

$$D_n(x_1, \dots, x_N) = \sup_{[a,b] \subseteq I} \left| \frac{A([a, b]; x_1, \dots, x_N)}{N} - (b - a) \right|$$

Eine Erweiterung dieser beiden Definitionen der *Diskrepanz* auf den mehrdimensionalen Fall $s > 1$ sind selbsterklärend und werden daher hier nicht angegeben.

Ein zentrales Resultat zur numerischen Approximation hochdimensionaler Integrale bildet die folgende – als *Koksma–Hlawka–Ungleichung* bezeichnete – Abschätzung: Ist f eine Funktion mit beschränkter Variation $V(f)$ auf I^s , so gilt für alle Punktmengen $\{x_1, \dots, x_N\}$ aus I^s die Abschätzung

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) - \int_{I^s} f(x) \, dx \right| \leq V(f) D_N^*(x_1, \dots, x_N)$$

Wir erhalten also für solche Funktionen eine *deterministische* Fehlerabschätzung, die *linear* von der *Diskrepanz* der verwendeten Punktmenge abhängt.

Es stellt sich nun die Frage, welche Abschätzungen für die Diskrepanz von Punktmengen bekannt sind:

- eine *endliche* Punktmenge liefert für festes $N \in \mathbb{N}$ eine eindeutig definierte endliche Folge $\{x_1, \dots, x_N\}$. Erweitert man die gegebene Folge um einen einzelnen Punkt x_{N+1} , so ändern sich **alle** vorgehenden Folgenglieder,
- eine *unendliche* Punktmenge liefert für festes $N \in \mathbb{N}$ eine eindeutig definierte Folge $\{x_1, \dots, x_N\}$. Erweitert man die gegebene Folge um einen einzelnen Punkt x_{N+1} , so ändern sich alle vorgehenden Folgenglieder **nicht**.

Diskrepanzabschätzungen

Im Fall $s = 1$ sind solche Abschätzungen hinreichend bekannt:^a

- für *endliche* Punktmengen gilt

$$D_N^*(x_1, \dots, x_N) \geq \frac{1}{2N}$$

wobei die Gleichheit für $x_n = (2n - 1)/2N, n = 1, \dots, N$ angenommen wird bzw.

$$D_N(x_1, \dots, x_N) \geq \frac{1}{N}$$

wobei Gleichheit ebenfalls für $x_n = (2n - 1)/2N, n = 1, \dots, N$ gilt,

- für *unendliche* Punktmengen gilt

$$D_N^*(x_1, \dots, x_N) \geq 0.06 \frac{\ln N}{N}$$

bzw.

$$D_N(x_1, \dots, x_N) \geq c \frac{\ln N}{N}$$

mit $c \geq 0.12$,

^aDen Fall $s \geq 2$ diskutiere ich kurz in der Vorlesung.

Die van-der-Corput-Folge

Wie bei (Pseudo-)Zufallszahlengeneratoren gibt es auch für deterministische Punktfolgen eine Vielzahl unterschiedlicher Ansätze. Eine klassische deterministische Folge wollen wir kurz vorstellen.^a

n	Binär	Spiegelung	Dezimal
0	0	0.0	0
1	1	0.1	1/2
2	10	0.01	1/4
3	11	0.11	3/4
4	100	0.001	1/8
5	101	0.101	5/8
6	110	0.011	3/8
7	111	0.111	7/8
8	1000	0.0001	1/16
...

^aWeitere Erläuterungen dazu gibt es direkt in der Vorlesung.

5.4 Anwendungen in MAPLE

MAPLE stellt mit dem Paket `RandomTools` verschiedene Zufallszahlengeneratoren zu Verfügung:

- lineare Kongruenzgeneratoren,
- quadratische Kongruenzgeneratoren,
- den Mersenne-Twister-Generator,
- den BlumBlumShub-Generator für kryptographische Anwendungen.

Daneben gibt es im Paket `MathApps` ein Simulationstool zur Berechnung der Zahl π mit Hilfe einer Monte-Carlo-Methode.

6 Gewöhnliche Differentialgleichungen

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit dem Einsatz von MAPLE zur Berechnung von Lösungen gewöhnlicher Differentialgleichungen, wobei wir zunächst nach expliziten Lösungsdarstellungen suchen. Für den Fall, dass MAPLE keine explizite Lösung findet, zeigen wir, wie man mit MAPLE Differentialgleichungen mit Hilfe *numerischer Verfahren* lösen kann.

Dabei unterteilen wir das Kapitel in die folgenden Unterabschnitte:

- Differentialgleichungen erster Ordnung
- Differentialgleichungen höherer Ordnung
- Differentialgleichungssysteme
- Numerische Lösung von Differentialgleichungen

Wir folgen dabei im wesentlichen den Kapiteln 33–36 aus dem MAPLE–Lehrbuch von Braun und Meise. Für die numerische Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen verweisen wir auf Standardlehrbücher zur Numerischen Mathematik, zum Beispiel den Klassiker *Numerische Mathematik II* von Stoer und Bulirsch.

6.1 Differentialgleichungen erster Ordnung

Eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung ist gegeben durch eine Gleichung der Form

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

wobei die rechte Seite der Differentialgleichung $f : D \rightarrow \mathbb{R}$, $D \subset \mathbb{R}^2$, eine vorgegebene Funktion ist.

Eine Lösung der Gleichung ist eine auf einem Intervall $I \subset \mathbb{R}$ definierte Funktion $y = y(x)$, die die folgenden Bedingungen erfüllt:

- y ist stetig auf ganz I ,
- y ist stetig differenzierbar im Innern von I ,
- es gilt: $\{(x, y(x)) : x \in I\} \subset D$,
- die Funktion $y = y(x)$ erfüllt für alle x im Innern von I die Gleichung

$$y'(x) = f(x, y(x))$$

Gilt für die Lösung zusätzlich $y(x_0) = y_0$ für ein $x_0 \in I$ und ein vorgegebenes, aber festes $y_0 \in \mathbb{R}$ mit $(x_0, y_0) \in D$, so spricht man von einem *Anfangswertproblem*

$$\begin{cases} y'(x) &= f(x, y(x)) \\ y(x_0) &= y_0 \end{cases}$$

Nach dem Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung ist eine äquivalente Darstellung eines Anfangswertproblems gegeben durch die *Integralgleichung*

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, y(t)) dt$$

Daraus lassen sich einige klassische Resultate zur Existenz und Eindeutigkeit (lokaler) Lösungen von Anfangswertproblemen ableiten:

- ist die rechte Seite $f(x, y)$ eine stetige Funktion, so existiert stets eine (lokale) Lösung des Problems in einer Umgebung des Anfangspunktes x_0 ,
- erfüllt die rechte Seite (in dieser Umgebung) eine Lipschitzbedingung der Form

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq L|y_1 - y_2|$$

so ist die Lösung eindeutig.

Zur Lösung von Differentialgleichungen steht in MAPLE der bereits in Übung 4 verwendete zentrale Befehl `dsolve` zur Verfügung. Neben Differentialgleichungen erster Ordnung lassen sich damit auch Lösungen von Gleichungen höherer Ordnung sowie von Systemen von Differentialgleichungen berechnen. Daneben kann man auch numerische Approximationen von Lösungen berechnen lassen.

Mit Hilfe dieses Befehls lassen sich

- die *allgemeine* Lösung einer Differentialgleichung erster Ordnung berechnen, wobei die MAPLE-Ausgabe dann stets eine *Integrationskonstante* enthält:

$$> \text{dsolve}(\text{Dgl}, y(x))$$

- die *spezielle* Lösung eines Anfangswertproblems erster Ordnung berechnen, wobei der neben der Differentialgleichung auch die Anfangsbedingung angegeben werden muss:

$$> \text{dsolve}(\{\text{Dgl}, \text{Ab}\}, y(x))$$

Dabei definiert der Ausdruck `Dgl` die Differentialgleichung bzw. `Ab` die zugehörige Anfangsbedingung eines Anfangswertproblems.

Beispiel: Gegeben sei die lineare, inhomogene Differentialgleichung

$$y'(x) = y(x) - x^3 + 3x - 2$$

die für jede Anfangsbedingung $y(x_0) = y_0$, $x_0, y_0 \in \mathbb{R}$, eine auf ganz \mathbb{R} definierte Lösung besitzt.

Die zugehörige homogene Gleichung $y' = y$ hat die allgemeine Lösung

$$y(x) = Ce^x$$

mit der Integrationskonstanten $C \in \mathbb{R}$.

Über die Methode der *Variation der Konstanten* läßt sich per Hand leicht die allgemeine Lösung der inhomogenen Gleichung berechnen.

Man schreibt einfach

$$y(x) = C(x)e^x$$

und setzt dies in die inhomogene Differentialgleichung ein. Man erhält damit eine einfache Differentialgleichung für die unbekannte Funktion $C(x)$, die direkt per Integration gelöst werden kann.

In MAPLE definieren wir zunächst die gegebene Differentialgleichung

$$> g := \text{diff}(y(x), x) - y(x) + x^3 - 3x + 2$$

und bestimmen dann die *allgemeine* Lösung der Gleichung

$$> \text{dsolve}(g = 0, y(x))$$

Entsprechend können wir ein zugehöriges Anfangswertproblem lösen

$$> \text{Lsg} := \text{dsolve}(\{g = 0, y(0) = 1\}, y(x))$$

und zum Beispiel die vorgegebene Anfangsbedingung überprüfen

$$> f1 := \text{rhs}(\text{Lsg})$$

$$> \text{eval}(f1, x = 0)$$

Zur graphischen Darstellung betrachten wir neben zwei weiteren Anfangsbedingungen auch das sogenannte *Richtungsfeld* einer Differentialgleichung erster Ordnung: hier ordnet man jedem Punkt (x, y) den Richtungsvektor $[1, f(x, y)]^T$ zu.

Die entsprechenden MAPLE-Sequenz lautet dann:

```
> f2 := rhs ( dsolve ( { g = 0, y(0) = 1/2 }, y(x) ) )
> f3 := rhs ( dsolve ( { g = 0, y(0) = 3/2 }, y(x) ) )
> with(plots) :
> v := [1, y - x3 + 3x - 2]
> p := fieldplot(v, x = -1.5..2, y = -2..5, color = blue) :
> q := plot([f1, f2, f3], x = -1.5..2, color = [red, green, magenta]) :
> display({p, q}, axes = frame)
```

In dem Buch von Braun und Meise werden im Zusammenhang mit dem `dsolve`-Befehl noch die folgenden Punkte detailliert diskutiert:

- Definitionsbereiche von Lösungen und
- mehrere Lösungen eines Anfangswertproblems.

6.2 Differentialgleichungen höherer Ordnung

Mit Hilfe des Befehls `dsolve` lassen sich nicht nur Gleichungen erster Ordnung, sondern auch Differentialgleichungen höherer Ordnung lösen. Wir verweisen hier nochmals auf den Abschnitt 2.3 der Vorlesung, in dem wir die verschiedenen Möglichkeiten diskutiert hatten, in MAPLE Ableitungen höherer Ordnung zu definieren.

Sehr gut verstanden ist der Fall linearer Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten, also Gleichungen der Form

$$y^{(n)} + a_{n-1}y^{(n-1)} + \dots + a_1y' + a_0 = b(x)$$

Bei homogenen Problemen ($b = 0$) ist der Lösungsraum ein n -dimensionaler Untervektorraum von $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$, für den eine Basis explizit angegeben werden kann, sofern man die Nullstellen des *charakteristischen Polynoms*

$$p(z) = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + \dots + a_1z + a_0$$

der homogenen Gleichung kennt. Der Lösungsraum eines inhomogenen Problems ergibt aus dem Lösungsraum des homogenen Problems durch Addition einer speziellen Lösung des inhomogenen Problems.

Beispiel: Bei Schwingungsproblemen – etwa in der Physik – treten sehr häufig (lineare) Differentialgleichungen zweiter Ordnung auf, die wir im Folgenden mit Hilfe von MAPLE diskutieren wollen.

Wir betrachten zunächst den sogenannten *harmonischen Oszillator* ohne Dämpfung, der durch die Gleichung

$$y''(x) + y(x) = 0$$

gegeben ist.

Hier ist (aus der Analysis) bekannt, dass die allgemeine Lösung durch eine Linearkombination der Sinus- und Cosinusfunktion gegeben ist:

$$y(x) = c_1 \cdot \sin(x) + c_2 \cdot \cos(x)$$

Betrachtet man ein zugehöriges Anfangswertproblem, so müssen jetzt **zwei** Anfangsbedingungen vorgegeben werden

$$y(x_0) = y_0, \quad y'(x_0) = z_0$$

Interessant sind nun die Auswirkungen auf das Lösungsverhalten, wenn man in der obigen Differentialgleichung einen Dämpfungsterm $\alpha_1 y'(x)$ hinzunimmt.

Ein Vergleich zwischen gedämpften und ungedämpften Schwingungen

```
> g1 := diff(y(x), x, x) + y(x)
> dsolve(g1 = 0, y(x))
> f1 := rhs(dsolve({g1 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}, y(x)))
> g2 := diff(y(x), x, x) +  $\frac{\text{diff}(y(x), x)}{4}$  + y(x)
> f2 := rhs(dsolve({g2 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}, y(x)))
> g3 := diff(y(x), x, x) +  $\frac{\text{diff}(y(x), x)}{3}$  + y(x)
> f3 := rhs(dsolve({g3 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}, y(x)))
> plot([f1, f2, f3], x = 0..4 * Pi, color = [red, blue, green])
> with(plots) :
> animate(plot, [[f1, f2, f3], x = 0..t, color = [red, blue, green]], t = 0..8 * Pi)
```

Interessant wird es nun, wenn man den Koeffizienten von y' weiter erhöht.

Aperiodischer Grenzfall

Wie oben erwähnt hängt die Struktur des Lösungsraum bei linearen Differentialgleichungen höherer Ordnung im wesentlichen von den Nullstellen des charakteristischen Polynoms ab:

$$\begin{aligned}
 &> \text{solve}(z^2 + a \cdot z + 1 = 0, z) \\
 &\quad -\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}\sqrt{a^2 - 4}, -\frac{1}{2}a - \frac{1}{2}\sqrt{a^2 - 4}
 \end{aligned}$$

Für $a < 2$ sind die Nullstellen komplex und man erhält als Lösungsraum gerade Schwingungen.

Bei $a = 2$ hat das Polynom eine doppelte reelle Nullstelle und das bezeichnet man als den *aperiodischen Grenzfall*. Man erhält Lösungen die sich nicht mehr als Summe trigonometrischer Funktionen darstellen lassen.

```

> g4 := diff(y(x), x, x) + 2 · diff(y(x), x) + y(x)
> f4 := rhs(dsolve({g4 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = -2}, y(x)))
> f5 := rhs(dsolve({g4 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}, y(x)))
> animate(plot, [[f4, f5], x = 0..t, color = [red, blue]], t = 0..6)
    
```

Kriechfall

Ist die Dämpfung größer als im aperiodischen Grenzfall ergibt sich der sogenannte *Kriechfall*, der sich dadurch auszeichnet, dass die x -Achse in keinem Fall überschritten wird.

```
> g5 := diff(y(x), x, x) + 3 · diff(y(x), x) + y(x)
> f6 := rhs(dsolve({g5 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = -2}, y(x)))
> f7 := rhs(dsolve({g5 = 0, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}, y(x)))
> animate(plot, [[f6, f7], x = 0..t, color = [red, blue]], t = 0..6)
```

Angeregte Schwingungen

Den Fall eines harmonischen Oszillators, der durch eine äußere periodische Kraft angeregt wird, untersuchen wir in den praktischen Übungen. Wichtige Begriffe sind hier

- Schwebungen, die auftreten, wenn die Frequenz der Anregung nahe bei der Frequenz des harmonischen (ungedämpften) Oszillators liegt,
- Resonanzkatastrophe, die dann auftritt, wenn die Anregung eine zum harmonischen (ungedämpften) Oszillator identische Frequenz hat.

6.3 Differentialgleichungssysteme

Der MAPLE-Befehl `dsolve` kann analog zu den beiden vorangegangenen Abschnitten auch zur Lösung von Systemen von Differentialgleichungen erster oder höherer Ordnung verwendet werden.

Bei linearen Systemen erster Ordnung mit einer konstanten Koeffizientenmatrix, also $y'(x) = Ay(x)$ mit $y \in \mathbb{R}^n$ und $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ steht außerdem im Paket `LinearAlgebra` der Befehl `MatrixExponential(A,t)` zur Verfügung, der den Ausdruck $\exp(At)$ berechnet. Die allgemeine Lösung eines linearen Systems ist nämlich gerade gegeben durch

$$y(x) = \exp(At) \cdot c \quad \text{mit } c \in \mathbb{R}^n$$

Wir gehen hier allerdings nicht näher darauf ein und beschränken uns auf den zentralen Befehl `dsolve`.

Beispiel: Wir betrachten zwei ungedämpfte gekoppelte Pendel, die die gleiche Länge besitzen, mit kleiner Amplitude schwingen und über eine Feder miteinander verbunden sind.

Ein (vereinfachtes) mathematisches Modell hierfür ist ein System von zwei Differentialgleichungen zweiter Ordnung:

$$\begin{aligned}x'' + (1 + a)x - ay &= 0 \\y'' + (1 + b)y - bx &= 0\end{aligned}$$

wobei die beiden Parameter a und b von der Feder und den Massen der Pendel herrühren.

Der Befehl `dsolve` findet nun die allgemeine Lösung als auch Lösungen von zugehörigen Anfangswertproblemen:

```
> sys := {diff(x(t), t, t) + (1 + a) * x(t) - a * y(t), diff(y(t), t, t) + (1 + b) * y(t) - b * x(t)}
> dsolve(sys, {x(t), y(t)})
> a := 1/7 : b := 1/7 :
> sys := {diff(x(t), t, t) + (1 + a) * x(t) - a * y(t), diff(y(t), t, t) + (1 + b) * y(t) - b * x(t),
          x(0) = 0, D(x)(0) = 1, y(0) = 1, D(y)(0) = 0}
> p := dsolve(sys, {x(t), y(t)})
> animate(plot, [{rhs(p[1]), rhs(p[2])}], t = 0..x, x = 0..100)
```

6.4 Numerische Lösung von Differentialgleichungen

Natürlich lassen sich nicht alle Differentialgleichungen oder entsprechende Systeme in geschlossener Form lösen.

Findet MAPLE mit dem `dsolve`-Befehl keine geschlossene Lösung, so kann die Option `type=numeric` verwendet werden. Dann liefert MAPLE eine Prozedur zur numerischen Lösung mit Hilfe eines numerischen Integrationsverfahrens, wie zum Beispiel dem klassischen Runge–Kutta Verfahren.

Wir können hier nicht näher auf solche Verfahren eingehen und verweisen stattdessen auf das eingangs erwähnte Buch von Stoer und Bulirsch (oder andere Standardwerke zur Numerischen Mathematik).

Im Folgenden schauen wir uns nur ein Beispiel zur numerischen Lösung genauer an.

Beispiel: Das mathematische Pendel ist gegeben durch die nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$y''(x) + \sin(y(x)) = 0$$

Bei kleinen Auslenkungen $|y(x)| \ll 1$ führt die Approximation $\sin(y(x)) \approx y(x)$ gerade auf den ungedämpften harmonischen Oszillator aus Abschnitt 6.2.

Wir versuchen zunächst mit MAPLE die Lösung eines Anfangswertproblems in geschlossener Form zu berechnen.

```
> Dgl := diff(y(x), x, x) - sin(y(x))
> Ab := y(0) =  $\frac{\text{Pi}}{8}$ , D(y)(0) = 0
> dsolve({Dgl, Ab}, y(x))
```

Eine numerische Lösung erhalten wir durch

```
> p := dsolve({Dgl, Ab}, y(x), type = numeric)
> with(plots) :
> odeplot(p, [x, y(x)], x = 0..40, frames = 40)
```

Zur graphischen Darstellung haben wir hier den speziellen Befehl `odeplot` verwendet.

7 Störungstheorie bei Differentialgleichungen

Der van–der–Pol–Oszillator^a modelliert ein nichtlineares schwingendes System und ist gegeben durch eine Differentialgleichung 2. Ordnung mit einer nichtlinearen Dämpfung ($k \geq 0$),

$$\ddot{x} + k \dot{x} (x^2 - 1) + x = 0$$

Besonders interessant sind die beiden folgenden Grenzfälle:

- für $k \rightarrow 0$ geht der van–der–Pol–Oszillator *formal* in den ungedämpften harmonischen Oszillator über. Wie sehen also die Lösungen für $k \ll 1$ aus?
- für $k \rightarrow \infty$ ergibt sich *formal* die Gleichung

$$\dot{x} (x^2 - 1) = 0,$$

die aber keine Schwingung darstellt. Wie sehen also die Lösungen für $k \gg 1$ aus?

Führt man den *kleinen* (positiven) Parameter $\varepsilon \ll 1$ ein, so behandelt die Störungstheorie bei Differentialgleichungen gerade diese Frage.

^aBalthasar van der Pol, 1889–1959, niederländischer Elektroingenieur und Physiker.

Mit dem *kleinen* (positiven) Parameter $\varepsilon \ll 1$ ergeben sich also die beiden folgenden Gleichungen

$$\ddot{x} + \varepsilon \dot{x} (x^2 - 1) + x = 0$$

und

$$\ddot{x} + \frac{1}{\varepsilon} \dot{x} (x^2 - 1) + x = 0$$

Dabei treten im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ zwei *klassische* Phänomene der Störungstheorie auf:

- Mehrskalenentwicklungen (bei regulär-gestörten Problemen),
- die Grenzschichttheorie (bei singular-gestörten Problemen).

Die erste Gleichung bezeichnet man als *regulär-gestört*, da sich im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ die Ordnung der Differentialgleichung *nicht* ändert. Dagegen ist die zweite Gleichung *singular-gestört*, da sich die Ordnung für $\varepsilon \rightarrow 0$ reduziert.

In Abschnitt 7.1 präsentieren wir zunächst einige mit Hilfe des MAPLE-Befehls `dsolve` generierte numerischen Lösungen für den van-der-Pol-Oszillator in den beiden Grenzfällen $k \rightarrow 0$ und $k \rightarrow \infty$.

Abschnitt 7.2 behandelt Mehrskalenentwicklungen im Fall $k \rightarrow 0$ und schließlich zeigen wir in Abschnitt 7.3 die zentralen Methoden der Grenzschichttheorie.

7.1 Numerische Lösungen zum van–der–Pol–Oszillator

Numerische Lösungen mit Hilfe des `dsolve`-Befehls lassen sich zum einem für die gegebene Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\ddot{x} + k \dot{x} (x^2 - 1) + x = 0$$

mit den Anfangsbedingungen

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = y_0$$

berechnen.

Daneben kann man das Problem auch als ein System erster Ordnung formulieren

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= y(t) \\ \dot{y}(t) &= -k y(t) (x(t)^2 - 1) - x(t)\end{aligned}$$

Für Anfangswertprobleme setzt man dann die beiden Anfangsbedingungen

$$x(0) = x_0, \quad y(0) = y_0$$

Damit können die Lösungskurven auch einfacher im Phasenraum dargestellt werden.

7.2 Mehrskalenenwicklungen zum van–der–Pol–Oszillator

In diesem Abschnitt betrachten wir das Anfangswertproblem für den van–der–Pol–Oszillator im Grenzfall $\varepsilon \rightarrow 0$ gegeben durch

$$\ddot{x} + \varepsilon \dot{x} (x^2 - 1) + x = 0, \quad x(0) = 1, \quad \dot{x}(0) = 0$$

und versuchen auf analytischem Wege mit Hilfe einer Mehrskalenenwicklung eine Näherungslösung der Gleichung herzuleiten.

Setzen wir $\varepsilon = 0$, so erhält man den ungedämpften harmonischen Oszillator mit der Lösung

$$x_0(t) = \cos t$$

Die Idee der Störungstheorie ist nun, eine Lösung in der Form

$$x(t; \varepsilon) \sim x_0(t) + \varepsilon x_1(t)$$

zu suchen, die das gegebene Anfangswertproblem approximativ löst. Dabei sollte die Störung *klein* gegenüber der ungestörten Lösung sein, d.h. wir versuchen die Bedingung $x_1(t) = O(1)$ einzuhalten.

Setzt man den Ansatz $x(t; \varepsilon) = x_0(t) + \varepsilon x_1(t)$ in die Gleichung des van-der-Pol-Oszillators ein, so ergibt sich für $x_1(t)$ die Differentialgleichung

$$\ddot{x}_1 + x_1 = -\dot{x}_0(x_0^2 - 1)$$

Mit der Lösung $x_0(t) = \cos t$ ergibt sich die rechte Seite als

$$\dot{x}_0(x_0^2 - 1) = \sin^3 t$$

und wir erhalten für $x_1 = x_1(t)$ den ungedämpften harmonischen Oszillator mit Anregung:

$$\ddot{x}_1 + x_1 = -\sin^3 t$$

Kritisch ist hier der *Resonanzfall*, d.h. die Anregungsfrequenz der Inhomogenität fällt mit der Eigenfrequenz des (ungedämpften) harmonischen Oszillators zusammen.

Die *wichtige* Frage ist also: tritt dieser Fall hier auf?

Nach den Additionstheoremen für trigonometrische Funktionen gilt nun:

$$-\sin^3 t = \frac{1}{4} \sin 3t - \frac{3}{4} \sin t$$

Wir lösen also das folgende Anfangswertproblem

$$\ddot{x}_1 + x_1 = \frac{1}{4} \sin 3t - \frac{3}{4} \sin t, \quad x_1(0) = 0, \quad \dot{x}_1(0) = 0$$

und erhalten

$$x_1(t) = \frac{3}{8} (t \cos t - \sin t) - \frac{1}{32} (\sin 3t - 3 \sin t)$$

Insgesamt ergibt sich also

$$x(t; \varepsilon) \sim \cos t + \varepsilon \left[\frac{3}{8} (t \cos t - \sin t) - \frac{1}{32} (\sin 3t - 3 \sin t) \right]$$

Für große Zeiten $t \sim \varepsilon^{-1} =: \delta$ bedeutet dies aber

$$\begin{aligned} x(\delta; \varepsilon) &\sim \cos \delta + \varepsilon \left[\frac{3}{8} (\delta \cos \delta - \sin \delta) - \frac{1}{32} (\sin 3\delta - 3 \sin \delta) \right] \\ &\sim \frac{11}{8} \cos \delta + O(\varepsilon) \\ &\neq \cos \delta + O(\varepsilon) \end{aligned}$$

Die naive Vorgehensweise zur Herleitung einer störungstheoretischen, approximativen Lösung im Fall $\varepsilon \ll 1$ bricht also für große Zeiten $t \sim \varepsilon^{-1}$ zusammen und dies liegt daran, dass in der Gleichung

$$\ddot{x} + \varepsilon \dot{x}(x^2 - 1) + x = 0$$

simultan zwei Phänomene auf zwei unterschiedlichen Zeitskalen aktiv sind.

Ein Ausweg ist die Verwendung einer *Mehrskalentwicklung*, d.h. wir definieren zwei Zeitskalen:

$$\tau = t, \quad T = \varepsilon t$$

Die Zeitskala

- definiert durch τ ist eine *schnelle* Skala und beschreibt die Schwingungen des van-der-Pol Oszillators,
- definiert durch T ist eine *langsame* Skala und beschreibt Änderungen der Amplitude beziehungsweise eine Phasenverschiebung auf der langsamen Skala.

Wir verwenden daher den *Mehrskalenansatz*

$$\chi(\mathbf{t}; \varepsilon) = \chi(\tau, T; \varepsilon)$$

mit $\tau = t$ und $T = \varepsilon t$ und suchen eine asymptotische Entwicklung der Form

$$\chi(\mathbf{t}; \varepsilon) \sim \chi_0(\tau, T) + \varepsilon \chi_1(\tau, T)$$

wobei die Entwicklung auch für $T = \text{ord}(1)$ bzw. $\tau = \text{ord}(1/\varepsilon)$ gültig bleiben soll, d.h. insbesondere, dass

$$\chi_1(1/\varepsilon, 1) = \text{ord}(1)$$

gelten soll.

Nach der Kettenregel gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial T} \\ \frac{d^2}{dt^2} &= \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + 2\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial \tau \partial T} + \varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} \end{aligned}$$

Setzen wir den Mehrskalenansatz in unsere Gleichung ein, so erhalten zunächst in nullter Ordnung die Differentialgleichung

$$\frac{\partial^2 x_0}{\partial \tau^2} + x_0 = 0$$

Mit den beiden Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned}x_0(0, 0) &= 1 \\ \frac{\partial x_0}{\partial \tau}(0, 0) &= 0\end{aligned}$$

ergibt sich die Lösung als

$$x_0(\tau, T) = R(T) \cos(\tau + \Phi(T))$$

wobei

$$R(0) = 1 \quad \text{und} \quad \Phi(0) = 0$$

gelten muss.

In erster Ordnung erhalten wir die Gleichung

$$\frac{\partial^2 x_1}{\partial \tau^2} + x_1 + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial \tau \partial T} = - \frac{\partial x_0}{\partial \tau} (x_0^2 - 1)$$

und unter Verwendung der Lösung x_0 ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x_1}{\partial \tau^2} + x_1 &= 2R \cos(\tau + \theta) \frac{d\theta}{dT} + 2 \frac{dR}{dT} \sin(\tau + \theta) \\ &+ \left(\frac{1}{4} R^3 - R \right) \sin(\tau + \theta) + \frac{R^3}{4} \sin 3(\tau + \theta) \end{aligned}$$

Nun folgt der entscheidende Schritt bei der Verwendung einer Mehrskalenerwicklung für den van-der-Pol Oszillator.

Um Resonanzen und damit einen Anstieg der Amplitude in der Funktion $x_1(\tau, T)$ zu vermeiden, müssen alle Terme der Inhomogenität auf der rechten Seite, die Resonanzen erzeugen können, unterdrückt werden.

Die Gleichung für x_1 beschreibt eine *erzwungene Schwingung*.

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 x_1}{\partial \tau^2} + x_1 &= 2R \cos(\tau + \theta) \frac{d\theta}{dT} + 2 \frac{dR}{dT} \sin(\tau + \theta) \\ &\quad + \left(\frac{1}{4}R^3 - R\right) \sin(\tau + \theta) + \frac{R^3}{4} \sin 3(\tau + \theta)\end{aligned}$$

Wollen wir Resonanzen unterdrücken, so müssen die folgenden Bedingungen erfüllt sein.

$$\frac{d\theta}{dT} = 0, \quad 2 \frac{dR}{dT} + \left(\frac{R^3}{4} - R\right) = 0,$$

Mit den Randbedingungen $R(0) = 1$ und $\theta(0) = 0$ ergeben sich die beiden Lösungen

$$\theta(T) = 0, \quad R(t) = 2 \left(1 + 3e^{-T}\right)^{-1/2},$$

und damit die asymptotische Entwicklung nullter Ordnung

$$x(t; \varepsilon) \sim 2 \left(1 + 3e^{-\varepsilon t}\right)^{-1/2} \cos t$$

Entsprechend lautet die Gleichung erster Ordnung jetzt

$$\frac{\partial^2 x_1}{\partial \tau^2} + x_1 = \frac{R^3}{4} \sin 3\tau$$

Die Lösung dieser Gleichung berechnet sich zu

$$x_1(\tau, T) = -\frac{1}{32} R^3(T) \sin 3\tau + S(T) \sin(\tau + \varphi(T))$$

wobei S and φ wiederum unbekannte Funktionen der langsamen Zeitskala T sind. Die Anfangsbedingungen für $S(T)$ und $\varphi(T)$ lassen sich folgendermaßen angeben:

$$\begin{aligned} x_1(0, 0) &= 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi(0) = 0 \\ \frac{\partial x_1}{\partial \tau}(0, 0) &= -\frac{dR}{dT}(0) = -\frac{3}{8} \quad \Rightarrow \quad S(0) = -\frac{9}{32} \end{aligned}$$

In der Gleichung der nächsten Ordnung wird wiederum versucht Resonanzen zu vermeiden.

Es kann passieren, dass bei höheren Termen einer Mehrskalentwicklung keine Bedingungen zur Vermeidung von Resonanzen bestimmt werden können.

Das deutet darauf hin, dass weitere Zeitskalen berücksichtigt werden müssen, d.h. man erweitert die Asymptotik um eine Skala $\tilde{T} = \varepsilon^2 t$.

Im Allgemeinen kann eine Mehrskalentwicklung daher von der Form

$$x(t; \varepsilon) = X(T_0, T_1, \dots, T_k; \varepsilon), \quad T_k = \varepsilon^k t$$

sein.

Alternativer Ansatz: Wir verwenden die beiden Zeitskalen

$$\xi = \varepsilon t$$

$$\eta = (1 + \varepsilon^2 \omega_2 + \varepsilon^3 \omega_3 + \dots + \varepsilon^m \omega_m) t$$

und suchen eine asymptotische Lösung des van–der–Pol Oszillators in der Form

$$x(t; \varepsilon) = \hat{x}(\xi, \eta; \varepsilon)$$

7.3 Zur Grenzschichttheorie bei Differentialgleichungen

Der Einfachheit halber erklären wir Grenzschichtphänomene an dem folgenden auf $[0, 1]$ definierten, für $\varepsilon \rightarrow 0$ singular-gestörten, linearen und inhomogenen Randwertproblem zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}\varepsilon y''(x) + y'(x) &= h'(x) \\ y(0) &= 0 \\ y(1) &= 1\end{aligned}$$

wobei die rechte Seite $h'(x)$ eine vorgegebene Funktion ist.

Aufgrund der Linearität der Gleichung kann für dieses Problem eine explizite Lösung angegeben werden, sofern die Inhomogenität $h'(x)$ elementar integriert werden kann:

```
> h := exp(-x); eps := 0.01
> dgl := eps * diff(y(x), x, x) + diff(y(x), x) = diff(h, x)
> rb := y(0) = 0, y(1) = 1
> p := dsolve({dgl, rb}, y(x)); plot(rhs(p), x = 0..1)
```

Wie bei Mehrskalalentwicklungen ist die Idee der *Störungstheorie* eine approximative Lösung mit Hilfe asymptotischer Entwicklungen zu berechnen.

Hier besteht nun folgendes Problem: im *formalen* Grenzfall $\varepsilon = 0$ ergibt sich das Randwertproblem

$$y'(x) = h'(x), \quad y(0) = 0, \quad y(1) = 1$$

für das im Allgemeinen keine Lösung existiert, da man für eine Differentialgleichung erster Ordnung eine Lösung sucht, die zwei Bedingungen $y(0) = 0$ und $y(1) = 1$ erfüllen soll.

Fordert man stattdessen nur die Bedingung $y(1) = 1$, so ergibt sich eine eindeutige Lösung in der Form

$$y_0(x) = h(x) - h(1) + 1$$

Allerdings gilt dann in der Regel

$$y_0(0) = h(0) - h(1) + 1 \neq 0$$

Mit Hilfe von MAPLE überzeugt man sich aber leicht, dass dies - bis auf eine *kleine* Grenzschicht in der Nähe von $x = 0$ eine *gute* Näherungslösung ist.

Um nun das Verhalten der Lösung innerhalb der Grenzschicht zu erhalten, verwendet man eine *Skalierung* der freien Variablen x : wir setzen innerhalb der Grenzschicht die neue Variable ξ als

$$\xi = \frac{x}{\varepsilon}$$

Mit dieser Skalierung wird die Grenzschicht auf einen Bereich der Länge $O(1)$ gestreckt und die Randbedingung $y(1) = 1$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ nach $\xi \rightarrow \infty$ verschoben.

Definiert man nun eine neue (Grenzschicht-)Funktion als

$$y(x; \varepsilon) = y(\varepsilon \cdot \xi; \varepsilon) = \bar{y}(\xi; \varepsilon)$$

so ergibt sich nach Anwendung der Kettenregel in der Variablen ξ die neue Differentialgleichung

$$\bar{y}''(\xi) + \bar{y}'(\xi) = \varepsilon \frac{dh}{dx}(\varepsilon \cdot \xi)$$

Setzen wir nun *formal* $\varepsilon = 0$ und verwenden wir nur die Randbedingung $\bar{y}(0) = 0$ so erhalten wir als Lösung (in nullter Näherung)

$$\bar{y}_0(\xi) = A_0(1 - \exp(-\xi))$$

mit einer freien Konstanten $A_0 \in \mathbb{R}$.

Insgesamt erhalten wir also folgende asymptotische Lösungen:

- außerhalb der Grenzschicht haben wir die Lösung

$$y(x) = h(x) - h(1) + 1$$

- innerhalb der Grenzschicht haben wir die Lösung

$$\bar{y}(\xi) = A_0(1 - \exp(\xi))$$

die noch von einem freien Parameter $A_0 \in \mathbb{R}$ abhängt.

Beide approximativen Lösungen lassen sich nun zu einer auf dem ganzen Intervall $[0, 1]$ definierten Lösung zusammensetzen, in dem man die noch frei Konstante A_0 innerhalb der Grenzschichtlösung anpasst. Dies können wir hier nicht explizit ausführen.

Letztendlich ergibt sich folgende zusammengesetzte Lösung, die das tatsächliche Lösungsverhalten für $\varepsilon \ll 1$ sehr gut wiedergibt.

$$y(x) = h(x) - h(1) + 1 - (1 - h(1) - h(0)) \exp(-x/\varepsilon)$$