Mathematische Grundlagen der dynamischen Simulation

Dynamische Systeme sind Systeme, die sich verändern. Es geht dabei um eine zeitliche Entwicklung und wie immer in der Informatik betrachten wir dabei nicht die Entwicklung einer realen Welt, sondern eines Abbildes dieser realen Welt in einem Modell.
Das Modell der realen Welt wird dabei beschrieben durch Größen und ihre Wechselwirkungen. Die Gesamtheit aller Größen beschreibt dann mit ihren Werten einen Zustand des Systems und wenn es dynamisch ist, verändern sich diese Größen zeitlich.

Veränderung von Größen

Prinzipiell gibt es an Veränderungen nur die beiden Möglichkeiten Zunahme und Abnahme[1]. Interessant wird es daher nur bei der Frage, durch welche Wechselwirkung zwischen Größen welche Art von Veränderungen auftreten und eben auch, wie sich diese Veränderungen selbst zeitlich entwickeln.
Sehen wir aber davon zunächst ab, dann gibt es eine Größe und eine Änderungsrate dieser Größe. Dies ist uns mathematisch aus der Analysis bekannt und manche Systeme lassen sich analytisch beschreiben und lösen. Man hat dann

- eine Funktion, welche die Werte der Größe beschreibt
- eine andere Funktion , die Ableitung, welche die Werte der Änderung der Größe beschreibt
- eine weiter Funktion , die zweite Ableitung, welche die Werte der Änderung der Änderung der Größe beschreibt
- usw.

Das System wird dann von einem System von Gleichungen beschrieben, das diese Größen enthält, ein Differentialgleichungssystem, für das es zu einigen Beispielen Lösungen gibt:
Die Gleichung $f'(x)=k\cdot f(x)\ \ mit\ \ f(0)=c$ beispielsweise lässt sich durch eine Funktion mit dem Term $c\cdot e^{k\cdot x}$ lösen.

Numerische Verfahren

Bei unserem Verfahren der dynamischen Simulation geht es nicht um die Fälle; die überlassen wir allein den Mathematikern. Wir betrachten (prinzipiell) Fälle, die sich so nicht lösen lassen, obwohl es manchmal natürlich interessant sein kann die entwickelten Methoden gerade auf die analytisch lösbaren anzuwenden, weil man seine Verfahren daran testen kann.
Wir betrachten Fälle, bei denen wir zu Näherungen einer richtigen Lösung dadurch kommen, dass wir iterativ ausgehend von Startwerten unter Berücksichtigung der Änderungsraten mit diskreten Zeitschritten zu nachfolgenden Werten weiter rechnen.
Ein triviales Beispiel:

Startwert Zeitschritt Änderungsrate

Jemand hat auf seinem Konto 35.000,-€ und zahlt jeden Monat 400,-€ ein.
Hieraus eine Tabelle der Werte zu bestimmen, fällt sicher jedem leicht. Eine Tabellenkalkulation wäre ein passendes Werkzeug.

diskret

Ein besonderes Merkmal des eben betrachteten Beispiels ist, dass es ein diskretes Problem ist. Damit ist nicht unsere Diskretion über den Umfang des Kapitals zu schweigen

1 Wenn wir einmal von solchem Schwachsinn wie „Nullwachstum“ absehen, was ja nichts anderes als „keine Veränderung“ bedeutet.

gemeint, sondern die Tatsache, dass eine Unterteilung des Monates in kleinere Abschnitte nicht sinnvoll ist, da die Änderung zu genau einem Zeitpunkt mit genau einem Wert erfolgt.
Ganz anders sieht es aus, wenn die betrachteten Größen selbst aber kontinuierlich (oder quasikontinuierlich) sind, wie im folgenden Beispiel:
Jemand befindet sich auf der Startlinie einer Laufbahn, startet und läuft bis zur Ziellinie. Auch hier gibt es einen Startwert und eine Änderung, was man sehr leicht daran erkennen kann, dass er ja irgendwann am Ziel ankommt. Seine Position ändert sich aber nicht in kleinen Positionen, da er während der Bewegung an jedem Ort gewesen sein muss. Es gibt daher keine vorgegebenen Zeitschritte und selbst wenn die Bewegung gleichmäßig ist, hängt die Größe der Änderung von der Länge des Zeitschrittes ab. Trotzdem geht man genau so vor wie vorher:
Die Größe ist die Strecke s mit dem Startwert 0, die Änderung der Strecke ist Δs[1], der Zeitschritt Δt. Bei einem Δs von 0,1 zum Simulationszeischritt Δt hat unsere Strecke s dann den Wert 0,1. Bleibt die Änderung konstant, kann man leicht die folgenden Werte direkt errechnen.

Die Änderung ändert sich

Schwieriger wird es, wenn die Änderung z.B. vom aktuellen Wert abhängt. Bei der Abkühlung einer Flüssigkeit beispielsweise hängt die Abkühlung, also die Änderung der Temperatur, vom Unterschied zwischen eben dieser Temperatur und der Umgebungstemperatur ab. Nehmen wir einmal an, die Ausgangstemperatur beträgt 80°C, die Umgebungstemperatur sei 20°C und die Abnahme im betrachteten Zeitintervall sei das 0,05-fache der Temperaturdifferenz. Dann erhalten wir folgende Rechnungen:

$$80-0{,}05\cdot(80-20) = 80-0{,}05\cdot 60 = 80-3 = 77$$
$$77-0{,}05\cdot(77-20)=77-0{,}05\cdot\underline{57}=77-\underline{2{,}85}=74{,}15$$

usw.

Da sich die Größe selbst geändert hat, ändern sich nun auch die Änderungen!

Bedeutung der Schrittweite

An dieser Stelle macht sich nun bemerkbar, dass die Änderung nicht linear ist, bei der o.a. Berechnung aber so getan wird, als wäre sie das zumindest in dem betrachteten Intervall! Die Folge ist, dass die Abnahme – da wir sie jeweils an der vorigen Stelle bestimmen – geringfügig größer ist, als sie tatsächlich ist. Statt einer glatten Kurve arbeiten wir nämlich mit einer Kette von Tangentenstücken, was sich leicht zu größeren Fehlern verstärken kann.
Man kann den Fehler, den man dabei macht, zwar verkleinern, indem man die Schrittweite der Zeitintervalle verkleinert. Das hat aber wiederum zwei Nachteile:

1. die Zahl der durchzuführenden Berechnungen verdoppelt sich, wenn man die Schrittweite halbiert.
2. Bei jeder realen Berechnung[2] wird man Rundungsfehler machen müssen. Je mehr Berechnungen man macht, desto größer wird auch die mögliche Abweichung durch Rundungsfehler

Man wird also irgendeinen Kompromiss finden müssen.

1 Unsere Simulationssoftware verwendet die Bezeichnung ds
2 also dann, wenn die Werte nicht so glatt gewählt wurden wie im Beispiel

Die von Dynasys verwendeten Verfahren

Dynasys bietet zwei Rechenverfahren an:

Euler-Cauchy[1]:

$$B(t+\Delta t) = B(t) + m \cdot \Delta t$$

(B=Bestandgröße, m Änderungsrate)

Vereinfacht gesagt, macht dies Verfahren den Fehler „aus der Kurve zu rutschen“. Man trifft daher nicht den wirklichen Verlauf der Funktion, was dann bei den nachfolgenden Punkten auch die Folge hat, dass die Änderung auf der Basis von nicht ganz richtigen Werten der Bestandgröße berechnet wird.
Warum nimmt man nicht einfach den Wert der Änderung am Ende des Intervalls und berechnet aus dem zum Startwert und diesem den Mittelwert?
Ganz einfach: Man hat den Wert ja nicht! Hätte man ihn, bräuchte man gar nicht zu rechnen!

Runge-Kutta

Dies Verfahren arbeitet mit vier Stützstellen, an denen dann jeweils die Änderungsraten berechnet werden und mit ihrer Hilfe dann erst der Folgewert berechnet wird. Dies Verfahren ist daher in der Lage, sehr viel besser die vorhandene Krümmung einer Kurve zu berechnen.

m_1 ist die Änderungsrate am Startwert des Intervalls

m_2 ist die Änderungsrate, die man bekäme, wenn man mit m_1 bis zur Mitte des Intervalls gehen würde

m_3 ist die Änderungsrate, die man bekäme, wenn man mit m_2 bis zur Mitte des Intervalls gehen würde

m_4 ist die Änderungsrate, die man bekäme, wenn man mit m_3 bis zum Ende des Intervalls gehen würde

Aus diesen vier Werten berechnet man nun durch eine gewichtete Mittelung den tatsächlich verwendeten Wert der Änderungsrate

$$m = (m_1 + 2 \cdot m_2 + 2 \cdot m_3 + m_4) \; / \; 6$$

und rechnet damit nun wie beim Euler-Cauchy – Verfahren.

1 Zu prüfen wäre, ob Dynasys nicht das verbesserte Euler-Cauchy – Verfahren verwendet.