

Abschlussbericht

Identifizierung verketteter Reaktoren mit Methoden der nichtlinearen Dynamik

Prof. Dr. Bernold Fiedler
Dr. Vassilii Gelfreich
Dr. Jörg Härterich
Dr. Stefan Liebscher
Dipl. Math. Juliette Blanca
Dipl. Math. Marc Georgi

31. Juli 2004

Freie Universität Berlin
Institut für Mathematik I
Arnimalle 2-6
14195 Berlin

1 Einleitung

Im Rahmen der durch das BMBF geförderten Verbundprojekt "Identifizierung verketteter Reaktoren mit Methoden der nichtlinearen Dynamik" wurde die Gleichung $\Phi = \varphi^n$ mit unbekannter Abbildung φ untersucht. Man stelle sich bei einem chemischen Prozess einen Gesamtreaktor vor, der aus vielen kleinen Reaktoren besteht. Idealerweise betrachten wir den Gesamtreaktor als Verkettung vieler kleiner, identischer Reaktoren. Der große Reaktor kann nun durch eine „globale“ Input-Output Funktion, $y = \Phi(x)$, modelliert werden. Jeder einzelne der kleinen Reaktoren wird ebenfalls durch eine Input-Output Funktion φ beschrieben. In der Realität ist es aber in den meisten Fällen sehr kompliziert und kostenspielig an jedem der kleinen Reaktoren Messungen vorzunehmen und somit die Funktion φ direkt zu identifizieren. Die natürliche Frage, die sich stellt, ist aber: Kann man eventuell schon anhand der Abbildung Φ Informationen über φ gewinnen? Ist es vielleicht sogar möglich φ direkt zu bestimmen?

Mathematisch gesehen geht es also um folgendes Problem: Finde für gegebenes Φ ein φ , so dass

$$\Phi(x) = \varphi \circ \varphi \circ \dots \circ \varphi(x) \quad (1)$$

gilt, wobei φ auf der rechten Seite n -mal auftritt. Dieses Problem schreiben wir meistens in der Form $\Phi = \varphi^n$. Wir betrachten den Fall $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$, für $N \in \mathbb{N}$ beliebig. Etwas anders ausgedrückt, stellen wir uns also die Frage, ob man aus einer Abbildung Φ eine „ n -te Wurzel“ φ ziehen kann.

Der Frage der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu (1) widmen wir uns im folgenden Abschnitt. Wir werden hier sehen, dass bereits im zweidimensionalen Fall $N = 2$ die Lösung φ zu (1) i.a. nicht mehr eindeutig ist. Die Ergebnisse in diesem Abschnitt kann man den Kategorien *Resultate für skalare identische Reaktoren*, *Fehlerschätzer verrauschter Daten niedriger Dimensionen sowie hochdimensionaler Daten* und *Zweidimensionale Input-Output-Relationen* zuordnen. Zu letzterer Kategorie sei auch auf Abschnitt 3 unseres Berichtes verwiesen, wo die globale Input-Output-Funktion Φ „kompliziertes Verhalten“ nahe des Fixpunktes Null aufweist und wir ein notwendiges Kriterium für die Existenz einer Lösung φ zu (1) angeben.

Im vierten Abschnitt interessieren wir uns speziell für die Dynamik von Φ und untersuchen, was man daraus über die Dynamik und das Langzeitverhalten von φ aussagen kann. In dieser Hinsicht sind *isolierte, invariante Mengen* wichtig. Grob ausgedrückt sind das beschränkte Mengen, die sich unter Anwendung von Φ und Φ^{-1} (bzw. φ und φ^{-1}) nicht verändern.

Für diese Fragestellung ist der *Conley-Index* besonders geeignet. Dies ist ein Werkzeug, das man auch zur effizienten Untersuchung leicht gestörter Systeme oder prozessbedingt leicht unterschiedlicher Reaktoren heranziehen kann.

Die Ergebnisse dieses Abschnittes können *Störungsrechnung fast identischer Reaktoren sowohl niedriger als auch höherer Dimensionen, Hoch-dimensionale Input-*

Output-Relationen, Identifizierung in Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren zugeordnet werden.

In Abschnitt 5 behandeln wir ausführlich ein praxisbezogenes Beispiel, in dem zwei Reaktoren hintereinandergeschaltet sind. Es wird sich zeigen, dass die in diesem Beispiel auftretende Fragestellung zu (1) äquivalent ist. Wir zeigen dann, wie man unter gewissen sinnvollen Strukturannahmen eine eindeutige Lösung zu (1) finden kann. Auch ohne diese Strukturannahmen an die Lösung können wir im Falle leichter Diffusion zumindest lokal die Eindeutigkeit der Lösung mit den im ersten Abschnitt dieses Berichts dargestellten Methoden garantieren.

2 Existenz und Eindeutigkeit der Lösung

2.1 Die Existenz der Lösung

Wir werden im folgenden noch die sinnvollen Annahmen machen, dass $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ und $\Phi(0) = 0$ ist. Dieses ergibt sich aus dem Schluss, dass bei Inputkonzentrationen gleich Null die Outputkonzentrationen auch Null sein müssen. Ausserdem Φ nehmen wir an, dass Φ injektiv (d.h. Φ sollte für verschieden Inputs auch verschiedene Outputs liefern) und stetig (d.h. für eine kleinere Änderung der Inputs erwarten wir nur eine kleine Änderung der Outputs) ist. Wir werden aber meistens annehmen, dass Φ sogar differenzierbar ist. Bezeichne weiterhin mit A die Ableitung von Φ in der Null.

Da die nächsten Existenzsätze alle auf dem Satz von Grobman-Hartman beruhen, dessen Inhalt in folgendem Satz zusammengefasst ist

Satz 2.1.1 *Sei $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine genügend glatte Abbildung mit $f(x_0) = x_0$. Erfüllt $A := Df(x_0)$ eine Nichtausartungsbedingung, so existiert lokal um x_0 eine stetige Abbildung h , die A und f nahe x_0 konjugiert, d.h. es gilt*

$$h \circ f = A \circ h$$

in einer kleinen Umgebung um x_0 .

Dieser Satz gibt uns das entscheidende Werkzeug für die Existenzfrage einer Lösung (zumindest nahe der Null) in die Hand.

Wir bemerken nämlich, dass für eine lineare Input-Output-Funktion $\Phi = A$ eine Lösung von (1) durch $\varphi(x) := \exp(\frac{1}{n} \log(A)x)$ gegeben ist. In diesem Fall kann man eine Lösung also explizit angeben und diese Lösung ist überall erklärt! Ist A sogar von Diagonalgestalt mit positiven Einträgen a_1, \dots, a_n , so ist z.B. diejenige Diagonalmatrix eine Lösung, deren Einträge aus $(a_1)^{1/n}, \dots, (a_n)^{1/n}$ bestehen.

Ist die globale Input-Output-Funktion also *linear*, so lässt sich schnell eine Lösung finden und diese kann man sogar explizit angeben!

Der Satz von Grobman-Hartman schlägt nun eine wichtige Brücke von den nichtlinearen Funktionen f zu ihren Linearisierungen $Df(x) = A$ mittels einer stetigen Abbildung h . Nun ist es klar, wie man zumindest nahe Null eine Lösung von (1) konstruiert: Der Satz von Grobman-Hartmann erlaubt einem zunächst den Übergang zu einer linearen Abbildung $Df(0)$. Aus dieser kann man dann, wie oben angedeutet, eine „ n -te Wurzel ziehen“ (also eine Lösung für das lineare Problem finden). Danach geht man mittels der Konjugation h wieder zu der nichtlinearen Abbildung f über. Eine Lösung sieht also wie folgt aus:

$$\varphi(x) := h \circ \exp\left(\frac{1}{n} \log(A)\right) \circ h^{-1}(x). \quad (2)$$

Dieses wichtige Konzept werden wir gleich noch etwas präzisieren.

Vorher wollen wir noch einige Bemerkungen über die Konstruktion der Lösung mittels dieses Satzes machen: Zunächst einmal sind die Voraussetzungen des Satzes von Grobman-Hartman relativ leicht zu überprüfen: Man benötigt lediglich, dass die Abbildung f stetig differenzierbar ist und die Ableitung nahe Null keinen Eigenwert vom Betrag Eins besitzt. Weiterhin gilt der Satz für Räume beliebiger Dimension. Man hat also keine Einschränkung an die Dimension des umliegenden Raumes, so lange diese endlich ist. Wir stellen allerdings auch einige Nachteile fest: Die im Satz von Grobman-Hartman auftauchende Konjugation h , die auch in der konstruierten Lösung φ auftritt, ist im allgemeinen nicht explizit bekannt! Dies liegt an der Tatsache, dass die Abbildung h abstrakt gewonnen wird. Ein weiteres Problem ist, dass h die Abbildungen f und A aus dem Satz von Grobman-Hartman nur *lokal* in einer kleinen Umgebung um die Null (falls $f(0) = 0$, wovon wir stets ausgehen) konjugiert. Wir wissen allerdings a priori nicht, wie gross diese Umgebung ist! Damit ist ebenfalls unsere Lösung φ , mit $\varphi(x) = h \circ \exp(\frac{1}{n}\log(A)) \circ h^{-1}(x)$, zunächst nur in einer kleinen Umgebung um die Null definiert, von der wir nicht wissen, wie gross sie ist.

Es gilt nun folgender Satz:

Satz 2.1.2 *Es gelten die obigen Voraussetzungen an Φ . In einer Umgebung des Fixpunktes 0 von Φ existiert dann eine Lösung φ des Problems (1). Diese ist durch (2) gegeben.*

Die so konstruierte Lösung bezeichnen wir im weiteren stets mit φ . Wir gehen im nachfolgenden Abschnitt 2.1.1 noch kurz auf die Frage ein, ob man den Definitionsbereich unserer konstruierten Lösung φ aus Satz (2.1.2) noch erweitern kann.

2.1.1 Erweiterung des Definitionsbereiches

Unsere konstruierte Lösung φ aus Satz (2.1.2) ist zunächst nur auf einer kleinen Umgebung um die Null definiert. Wir können allerdings den Definitionsbereich unserer Lösung φ noch erweitern. Sind die Voraussetzungen des Satzes von Grobman-Hartman nämlich für unsere globale Input-Output-Funktion Φ erfüllt (also insbesondere die Voraussetzungen an das Spektrum von $A := D\Phi(0)$), so wissen wir, dass Teilmengen $W^s(0)$ bzw. $W^u(0)$ des \mathbb{R}^n existieren, auf denen die Lösungen des Systems $x_{n+1} = \Phi(x_n)$ und $x_0 \in \mathbb{R}^n$ für $n \rightarrow \infty$ bzw. $n \rightarrow -\infty$ gegen den Fixpunkt Null konvergieren. $W^s(0)$ heisst die *stabile* Mannigfaltigkeit von Φ , $W^u(0)$ ist die *instabile* Mannigfaltigkeit von Φ . Man kann nun zeigen, dass es möglich ist, die Abbildungen h und h^{-1} entlang „endlichen Abschnitten“ von $W^s(0)$ bzw. $W^u(0)$ fortzusetzen und damit auch die Lösung φ von (1), die weiterhin durch $\varphi(x) := h \circ \exp(\frac{1}{n}\log(A)) \circ h^{-1}(x)$ gegeben ist. Weiterhin wollen wir zur Vereinfachung annehmen, dass die stabile Mannigfaltigkeit der Null die instabile Mannigfaltigkeit nicht schneidet. Dann gilt für die in Satz (2.1.2) konstruierte Lösung φ :

Satz 2.1.3 *Man kann die in Satz (2.1.2) konstruierte Lösung φ auf Abschnitte endlicher Länge der stabilen und instabilen Mannigfaltigkeit bezgl. Φ fortsetzen.*

Da aber die Konstruktion dieser Fortsetzung des Definitionsbereiches von φ stark von der uns unbekanntem Umgebung (aus Satz (2.1.2)) abhängt, können wir auch nach diesem Satz noch nicht explizit die Menge bestimmen, auf der φ definiert ist.

2.2 Eindeutigkeit der Lösung

Wir werden uns nun in diesem Kapitel mit der Frage der Eindeutigkeit der allgemeinen Lösung von (1) beschäftigen. Diese Frage ist insbesondere deswegen wichtig, da wir in einigen Fällen zusätzliche Eigenschaften über unsere in Abschnitt 2.1 konstruierte Lösung φ nachweisen können. Wüssten wir bereits, dass eine Lösung von (1) eindeutig ist, und somit mit unserer konstruierten Lösung φ zumindest auf dem Definitionsbereich von φ übereinstimmt, so hätten wir analoge Eigenschaften auch für unsere allgemeine Lösung von (1) nachgewiesen. Leider wird sich herausstellen, dass es bereits im \mathbb{R}^2 i.a. mehr als eine Lösung von (1) gibt.

Wir betrachten nun zunächst den eindimensionalen Fall, also

$$\Phi : I \rightarrow I$$

für ein Intervall um die Null. Die Abbildung Φ besitze Null als eindeutigen Fixpunkt in dem Intervall I . Dieser Fixpunkt ist etwa die Null, also $\Phi(0) = 0$. In diesem Fall ist dann die Lösung von $\Phi = \varphi^n$ i.a. eindeutig und wir können den folgenden Satz zeigen:

Satz 2.2.1 *Sei $\Phi : I \rightarrow I$ wie oben beschrieben und zusätzlich differenzierbar und monoton wachsend. Gilt ausserdem $\Phi'(0) \neq 1$ so existiert eine eindeutige Lösung φ von (1) mit den Eigenschaften : $\varphi(0) = 0$ und $\varphi'(0) > 0$.*

Den Beweis hiervon kann man Gelfreich [4] entnehmen. Wir bemerken noch, dass dieser Satz keine Lösungen φ von (1) ausschliesst, die etwa $\varphi(0) \neq 0$ erfüllen. Wissen wir aber bereits a priori, dass die Lösung unseres Problems $\varphi(0) = 0$ und $\varphi'(0) > 0$ erfüllt, so ist die Lösung nach obigen Satz eindeutig.

Die Situation ändert sich bereits, wenn $\Phi : I \rightarrow I$ genau *zwei* Fixpunkte besitzt, diese seien etwa 0 und x_0 (wir nehmen an, dass $x_0 > 0$ ist), also gilt $\Phi(0) = 0$ und $\Phi(x_0) = x_0$. Man stelle sich etwa vor, dass $I = (a, b)$ und $0, x_0 \in (a, b)$. Dann besitzt Φ auf dem Intervall $I_0 = (a, x_0)$ genau einen Fixpunkt (nämlich die Null) und auf dem Intervall $I_1 = (0, b)$ ebenfalls genau einen Fixpunkt (nämlich x_0). Also existieren nach dem obigen Satz Lösungen auf I_0 und I_1 . Aber diese müssen auf dem Intervall $I_0 \cap I_1$ nicht übereinstimmen! Es gilt sogar der folgende Satz:

Satz 2.2.2 Erfülle $\Phi : I \rightarrow I$ die Voraussetzungen des vorigen Satzes, ausser der Tatsache, dass es nun genau zwei Fixpunkte 0 und x_0 gibt. Falls dann eine Lösung von (1) existiert, so ist sie eindeutig. Für allgemeine Input-Output-Funktionen Φ existiert aber keine Lösung von (1).

Für ein genaueres Kriterium, wann für ein gegebenes Φ eine eindeutige Lösung existiert, sei auf Gelfreich [4] verwiesen.

Wir betrachten nun den zweidimensionalen Fall, also $N = 2$. In diesem Fall gibt es für eine allgemeine Input-Output-Funktion Φ keine eindeutige Lösung von (1). Eine positive Aussage können wir aber treffen, wenn Φ eine *Kontraktion* nahe der Null ist. Dies bedeutet das folgende: Wählt man als Input einen Wert nahe Null so erhält man als Output unter Φ einen Wert, der näher an Null dran ist als der Input (man bedenke: $\Phi(0) = 0$). Wiederholt man diesen Vorgang (indem man also den Output als neuen Input des Gesamtreaktors wählt), so bedeutet dies, dass sich die neu erzielten Outputs immer mehr dem Wert Null nähern.

Sei nun Φ eine Kontraktion, $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, k -mal differenzierbar und $\Phi(0) = 0$. Wir haben dann folgendes Resultat:

Satz 2.2.3 Sei $I_2 \subset \mathbb{R}^2$ ein offenes Gebiet um die 0 und Φ eine Kontraktion. Erfüllt dann $D\Phi(0)$ eine bestimmte Nichtresonanzbedingung, so existiert eine eindeutige Lösung der Gleichung $\Phi = \varphi^n$ mit den folgenden Eigenschaften: Es ist $\varphi(0) = 0$ und auch $D\varphi(0)$ erfüllt eine gewisse Bedingung an die Eigenwerte.

Die Existenz einer Lösung zu $\Phi = \varphi^2$ ist bereits durch den Satz (2.1.2) aus dem vorigen Abschnitt gesichert. Allein die Eindeutigkeit ist der zentrale Aspekt des Satzes.

Ist die Input-Output-Funktion (I-O-Funktion) Φ keine Kontraktion mehr, ändert sich die Situation. Erstaunlicherweise kann man in diesem Fall schon für *lineare* Input-Output-Funktionen Φ zeigen, dass eine Lösung zu (1) nicht mehr eindeutig ist. Sei also Φ z.B. eine Diagonalmatrix $\text{diag}(\lambda, \mu)$ mit $0 < \mu < 1 < \lambda$, so können wir zeigen, dass Φ bereits unendlich viele Wurzeln besitzt, d.h. es existieren unendlich viele verschiedene Lösungen φ zu

$$\text{diag}(\lambda, \mu) = \varphi^n. \quad (3)$$

Eine Lösung ist sicherlich $M = \text{diag}(\lambda^{1/n}, \mu^{1/n})$. Man kann aber zeigen, dass es noch weitere *nichtlineare* Lösungen gibt. Wir halten fest:

Satz 2.2.4 Erfüllt Φ die obigen Voraussetzung (ist also insbesondere keine Kontraktion), so ist eine Lösung von (1) i.a. nicht eindeutig. Bereits in dem Fall, bei dem Φ linear ist, existieren bereits unendlich viele verschiedene Lösungen zu (1).

Für einen konstruktiven Beweis dieses Satzes sei auf Gelfreich [4] verwiesen.

2.3 Stabilität der Lösung

Wir kommen nun auf eine weitere, besonders für die Praxis wichtige Frage zu sprechen: Die Frage der *Stabilität*. Man stelle sich etwa einen großen Reaktor vor, der aus der Hintereinanderausführung vieler kleiner (idealisiert identischer) Reaktoren besteht. Der grosse Reaktor wird nun durch eine globale Input-Output-Funktion Φ modelliert. Nun sind aber alle Messwerte, die man entnehmen kann, nur bis auf eine kleine Fehlertoleranz genau. Die Frage, die sich einem aufdrängt, ist natürlich: Inwieweit ist aber unsere Lösung (die hier den In- und Output eines kleinen Reaktors modelliert) robust gegenüber kleinen Störungen von Φ ?

Die Frage, ob eine Lösung auch für kleine Störungen von der globalen Input-Output-Funktion Φ weiterhin existiert, ist hierbei (jedenfalls in praktischer Hinsicht) nicht sonderlich interessant, da ja der Reaktor selbst stets ein Lösung liefert.

Um das Problem „Robustheit der Lösung gegenüber kleinen Störungen“ mathematisch präziser zu fassen, stelle man sich etwa vor, dass die globale Input-Output-Funktion Φ glatt von einem Parameter ε abhängt, damit meinen wir, dass $\varepsilon \rightarrow \Phi(\varepsilon)$ stetig differenzierbar ist. Die *Störung* wird hier also durch den Parameter ε modelliert.

Für $\varepsilon = 0$ existiere eine Lösung φ_0 von $\Phi(x, 0) = \varphi_0^n(x)$. Existiert dann eine Lösung zu

$$\Phi(x, \varepsilon) = \varphi_\varepsilon^n(x), \quad (4)$$

so dass $\varphi_\varepsilon|_{\varepsilon=0} = \varphi_0$ und $\varepsilon \rightarrow \varphi_\varepsilon$ zumindest stetig ist? Die Beantwortung dieser Frage ist besonders deswegen wichtig, da die globale Input-Output Funktion Φ aufgrund von Störungen nicht exakt bekannt ist.

Es gilt nun folgender Satz:

Satz 2.3.1 *Sei $\varepsilon \rightarrow \Phi(\cdot, \varepsilon)$ eine differenzierbare Abbildung. Desweiteren gelte $\Phi(0, \varepsilon) = 0$ für alle ε und $\Phi(\cdot, 0)$ erfülle die Voraussetzungen von Satz (2.1.2) aus dem ersten Kapitel. Dann existiert ein Familie von Lösungen φ_ε zu (4) und diese Familie hängt stetig von dem Parameter ε ab. Alle φ_ε sind auf einer gemeinsamen, kleinen Umgebung um die Null definiert.*

Wir wollen betonen, dass diejenige Umgebung U , auf der alle φ_ε zunächst erklärt sind, i.a. nicht explizit bestimmbar ist. Weiterhin kann man für jedes feste ε den Definitionsbereich von der Lösung φ_ε von (4), wie im Abschnitt 2.1.1 beschrieben, fortsetzen. Da aber die Konstruktion dieser Fortsetzung stark von der uns nicht expliziten bekannten Umgebung U abhängt, ist auch nach der Erweiterung der neue Definitionsbereich i.a. nicht explizit bekannt.

Man kann die Lösungen φ_ε noch ein wenig konkreter angeben: Bezeichne dazu mit h_ε die nach dem Satz von Grobman-Hartman existierende Abbildung für die

$$A_\varepsilon \circ h_\varepsilon = h_\varepsilon \circ \Phi(\cdot, \varepsilon)$$

gilt, wobei $A_\varepsilon = D\Phi(0, \varepsilon)$. Dann ist φ_ε durch

$$\varphi_\varepsilon = h_\varepsilon \circ \exp\left(\frac{1}{n}\log(A_\varepsilon)\right) \circ h_\varepsilon^{-1}(x) \quad (5)$$

gegeben. Das ist also für $\varepsilon = 0$ unsere bereits im ersten Kapitel konstruierte Lösung φ zu $\Phi(\cdot, 0) = \varphi^n$.

2.4 Die Glattheit der Lösung φ_ε

Wir wollen nun die Regularität der Abbildung $x \rightarrow \varphi_\varepsilon(x)$ untersuchen. Hierbei bezeichnet φ_ε stets die in Satz (2.3.1) konstruierte Lösung zu (4).

Wir erinnern uns, dass diese Lösung φ durch

$$\varphi(x) := h \circ \exp\left(\frac{1}{n}\log(A)\right) \circ h^{-1}(x) \quad (6)$$

gegeben ist. Dies haben wir im ersten Kapitel festgestellt. A bezeichnet hierbei die Ableitung der Input-Output-Funktion Φ in der Null. Die Abbildung h (die die Bedingung $\Phi \circ h = h \circ A$ nahe Null erfüllt) ist durch den Satz von Grobman-Hartman gegeben. Wir wissen, dass diese Funktion stetig ist. Es stellt sich aber heraus, dass sie im i.a. sogar k -mal differenzierbar ist. Damit dies der Fall ist, sollte aber die Abbildung Φ folgende Form haben (siehe den Satz von Beletskii [1]):

$$\Phi(x) = Ax + g(x) \quad (7)$$

und für den Restterm $g(x)$ sollte nahe Null die Abschätzung $|g(x)|/|x|^K \rightarrow 0$ für $|x| \rightarrow 0$ erfüllen, für irgendein $K \in \mathbb{N}$, das grösser als Null ist. Für $K = 1$ ist das z.B. genau dann der Fall, wenn Φ in Null differenzierbar ist. Der Fall $K > 1$ bedeutet, dass sämtliche Ableitungen von Φ an der Stelle Null bis zur Ordnung K verschwinden müssen. Wir sehen hier schon, dass diese Bedingung (gerade für grosses K) für eine „gewöhnliche“ differenzierbare Abbildung i.a. nicht erfüllt ist. Wir können aber unter gewissen Umständen die Koordinaten so ändern, dass Φ in den neuen Koordinaten nahe Null die verlangte Form annimmt. Dazu muss allein $D\Phi(0)$ eine gewisse Nichtresonanzbedingung erfüllen. Es stellt sich sogar heraus, dass dies für die meisten differenzierbaren Input-Output-Funktionen Φ der Fall ist. Wir haben folgenden Satz:

Satz 2.4.1 (C^k -Regularität) *Sei $\Phi_\varepsilon(x)$ genügend oft differenzierbar in beiden Komponenten und gelte für $\Phi := \Phi_0$ eine Nichtresonanzbedingung. Dann existiert eine Familie φ_ε von Lösungen zu (4), die in ε stetig ist und jedes $\varphi_\varepsilon(\cdot)$ ist differenzierbar.*

Der Vollständigkeit halber diskutieren wir noch kurz den Fall, ob und wann unsere konstruierte Lösung φ , die durch (6) gegeben ist, beliebig oft differenzierbar ist. In diesem Fall gilt folgendes Resultat:

Satz 2.4.2 Sei Φ nicht linear und erfülle $A = D\Phi(0)$ eine gewisse Bedingung an die Eigenwerte, die z.B. erfüllt ist, wenn Φ nicht alle Punkte kontrahiert. Dann ist die durch (6) definierte Lösung φ i.a. nicht beliebig oft differenzierbar.

2.5 Die allgemeine Lösung

In den vorigen Abschnitten haben wir im wesentlichen eine spezielle Lösung zu (1) konstruiert und uns gefragt, wann diese Lösung etwa k -mal differenzierbar ist. Ein sehr positiver Aspekt dieser Lösung ist, dass sie „robust“ gegenüber kleinen Störungen der globalen Input-Output-Funktion Φ ist. Diese Störung haben wir durch eine Familie Φ_ε modelliert, wobei $\Phi_0 = \Phi$ und $\varepsilon \rightarrow \Phi_\varepsilon$ einmal stetig differenzierbar ist.

Leider haben wir aber schon im \mathbb{R}^2 i.a. keine Eindeutigkeit der Lösung mehr (siehe dazu den Abschnitt über die Eindeutigkeit). Wir können also nicht stillschweigend davon ausgehen, dass sämtliche Eigenschaften, die für unsere spezielle Lösung¹ φ_ε gelten auch für jede andere Lösung von $\Phi_\varepsilon = \varphi_\varepsilon^n$ erfüllt sind.

Sei nun also φ zunächst irgendeine Lösung zu $\varphi^n = \Phi_0$, wobei Φ_ε glatt von ε abhängt. Wir nehmen weiterhin an, dass $\varphi(0) = 0$ ist und stellen uns nun folgende Frage: Ist diese Lösung stabil, d.h. existiert eine Familie von Lösungen φ_ε mit

$$\varphi_\varepsilon^n = \Phi_\varepsilon, \quad (8)$$

für die $\varphi_0 = \varphi$ ist und die stetig von ε abhängt ?

Für unsere in Satz 2 konstruierte Lösung war das klar. Wir machen zunächst folgende Beobachtung: Wenn wir mit A , wie auch in den Abschnitten davor, die Linearisierung von $\Phi := \Phi_0$ in der Null bezeichnen, gilt

$$D\varphi(0)^n = A. \quad (9)$$

Also gilt mit $M := D\varphi(0)$, dass eine stetige Abbildung h existiert mit

$$\varphi = h \circ M \circ h^{-1}. \quad (10)$$

Man kann nun die auftretenden Funktionen h und M in eine Familie $h_\varepsilon, A_\varepsilon$ „einbetten“ und φ_ε durch

$$\varphi_\varepsilon := h_\varepsilon \circ M_\varepsilon \circ h_\varepsilon^{-1} \quad (11)$$

definieren.

Iterieren von φ_ε ergibt dann:

$$\varphi_\varepsilon^n = h_\varepsilon \circ M_\varepsilon^n \circ h_\varepsilon^{-1} \quad (12)$$

und damit

$$\varphi_\varepsilon^n = h_\varepsilon \circ A_\varepsilon \circ h_\varepsilon^{-1} = \Phi_\varepsilon, \quad (13)$$

¹für die Notation siehe den ersten Abschnitt

da die h_ε so festgesetzt sind, dass sie das letzte Gleichheitszeichen erfüllen. Also ist die so definierte Abbildung φ_ε tatsächlich eine Lösung von $\Phi_\varepsilon = \varphi_\varepsilon^n$, die stetig von ε abhängt. Wir halten dies in einem Satz fest:

Satz 2.5.1 *Sei φ eine beliebige differenzierbare Lösung zu $\varphi^n = \Phi_0$ mit $\varphi(0) = 0$. Hänge die Familie Φ_ε differenzierbar von ε ab und sei ebenfalls $\Phi_\varepsilon(0) = 0$. Dann existiert eine Familie von Lösungen φ_ε , die in ε stetig ist und $\varphi_0 = \varphi$ in einer kleinen Umgebung um die Null. Erfüllt Φ_0 eine Nichtresonanzbedingung, so ist $\varphi_\varepsilon(\cdot)$ sogar differenzierbar.*

3 Homokline Punkte

Da die Bestimmung der Input-Output-Relation φ der Einzelreaktoren i.a. ein schwieriges Problem darstellt, werden zunächst notwendige Bedingungen gesucht, die Φ erfüllen muss, um von der Form $\Phi = \varphi^k$ zu sein.

Wir befassen uns in diesem Abschnitt mit Reaktionen zweier Messgrößen, d.h. $n = 2$. Verallgemeinerungen auf Systeme höherer Dimension sind möglich, siehe dazu [6].

Dabei sollen die folgenden Annahmen an die Input-Output-Relation Φ gelten:

- (H1) $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ ist eine differenzierbare, bijektive Abbildung .
- (H2) $\Phi(0) = 0$ und $D\Phi(0)$ hat nur Eigenwerte, die nicht auf dem Einheitskreis liegen, mindestens eine der Eigenwerten ist vom Betrag kleiner als eins, mindestens eine ist vom Betrag größer als eins.
- (H3) Es existiert ein *homokliner Orbit* an $x = 0$, d.h. ein Ast der stabilen Mannigfaltigkeit W^s schneidet die instabile Mannigfaltigkeit von $x = 0$ in einem Punkt p (der homokliner Punkt heißt) , während der andere Ast von W^s die instabile Mannigfaltigkeit W^u nicht schneidet (siehe zur Definition von stabiler bzw. instabiler Mannigfaltigkeit 2.1.1.)

Die Annahme in (H2) impliziert, dass die Eigenwerte der Linearisierung $Dg(0)$ in $x = 0$ nicht auf dem Einheitskreis liegen. Aus diesem Grund existiert eine eindeutige stabile Mannigfaltigkeit W^s , die aus allen Punkten besteht, deren Iterierte gegen 0 konvergieren. Analog existiert eine instabile Mannigfaltigkeit aus Punkten, deren Rückwärts-Iterierte gegen 0 konvergieren. Beide invariante Mannigfaltigkeiten sind eingebettete Kurven. Darüber hinaus kann man zeigen, dass die invarianten Mannigfaltigkeiten W^s und W^u für die Abbildungen Φ und φ übereinstimmen, falls $\Phi = \varphi^k$ und $\Phi(0) = \varphi(0) = 0$ ist. Eine weitere Konsequenz von (H3) besteht darin, dass die Eigenwerte λ, μ der Linearisierung $D\Phi(0)$ in $x = 0$ beide positiv sein müssen.

Voraussetzung (H3) ist motiviert durch unser Resultat aus Abschnitt 2.2 , wo wir zeigen konnten, dass selbst für lineares Φ , die Gleichung $\varphi \circ \varphi = \Phi$ i.a. unendlich viele Lösungen φ besitzt, falls $D\Phi$ keine reine Kontraktion ist, also etwa eine "stauchende" Richtung und eine "streckende" besitzt.

Es ist bekannt, dass aus der Existenz eines einzigen Schnittpunkts von W^u und W^s sofort unendlich viele weitere Schnittpunkte auftreten. Diese Schnittpunkte entsprechen weiteren homoklinen Punkten.

Definition 3.0.2 *Ein homokliner Punkt $q \in W^s \cap W^u$ heißt primärer homokliner Punkt, falls $W^u[0, q] \cap W^s[0, q] = \{0, q\}$. Der entsprechende Orbit heißt primärer homokliner Orbit. Dabei sind $W^u[0, q]$ und $W^s[0, q]$ die Abschnitte der invarianten Mannigfaltigkeiten zwischen 0 und q .*

Numerische Algorithmen zur Berechnung invarianter Mannigfaltigkeiten liefern oft gerade solche Abschnitte $W^{s/u}[0, q]$. Die Entscheidung, ob ein homokliner Punkt primär ist, lässt sich mit Hilfe dieser Information treffen.

- (H4) Es gibt nur endlich viele primäre homokline Orbits und alle sind transversale homokline Orbits, d.h. W^u und W^s sind im Schnittpunkt nicht tangential zueinander.

Man kann nun das folgende Kriterium beweisen, dass eine notwendige Bedingung an Φ liefert, um von der Form $\Phi = \varphi^k$ zu sein.

Theorem 3.0.3 *Falls die Input-Output-Relationen Φ und φ die Voraussetzungen (H1)–(H4) erfüllen und $\Phi = \varphi^k$, dann gibt es ein $m \in \mathbb{N}$, so dass Φ genau $2mk$ verschieden primäre homokline Orbits besitzt. Insbesondere besitzt Φ mindestens $2k$ verschiedene primäre homokline Orbits.*

4 Conley–Index Methoden

4.1 Einleitung zum Conley–Index

Zuerst möchten wir die Konstruktion des Conley–Indexes kurz skizzieren. Sei $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetige Bijektion. Wir interessieren uns für φ als diskretes dynamisches System, also für Trajektorien von φ . Dabei versteht man unter einer Trajektorie mit Anfangswert $x \in \mathbb{R}^n$ die Folge $(\varphi^k(x))_{k \in \mathbb{Z}}$.

Der Conley–Index ist ein topologisches Werkzeug, mit dem man die isolierten invarianten Mengen von φ untersuchen kann. Invariante Mengen sind deswegen wichtig, weil sie insbesondere eng mit dem Langzeitverhalten von dynamischen Systemen in Verbindung stehen. Dabei heisst eine Menge $S \subseteq \mathbb{R}^n$ invariant unter φ , falls für jeden Punkt $x \in S$ seine volle Trajektorie $(\varphi^k(x))_{k \in \mathbb{Z}}$ auch in S liegt. Somit besteht eine invariante Menge ausschliesslich aus der Vereinigung von Trajektorien. Beispiele für invariante Mengen sind Equilibria, periodische Trajektorien, Homokline Punkte, . . .

Eine invariante Menge S ist isoliert invariant bezüglich φ , falls man ein Kompaktum (d.h. in \mathbb{R}^n eine beschränkt und abgeschlossene Menge) N finden kann, so dass S die grösste unter φ invariante Menge ist, die in N enthalten ist und S den Rand von N nicht schneidet. Diese Menge N heisst isolierende Umgebung von S bezüglich φ .

Zu jeder isolierten invarianten Menge gehört eine isolierende Umgebung. Diese hat gegenüber der dazugehörigen isolierten invarianten Menge den Vorteil, dass sie robust bezüglich kleiner Störungen des Systems ist (siehe Satz 4.3.1). Isolierende Umgebungen bilden der Grundstein der Konstruktion des Conley–Indexes. Diese wollen wir hier nicht näher beschreiben, siehe dazu [2]. Isolierende Umgebungen und der Conley–Index können aus einer Datenbasis numerisch bestimmt werden. Dazu wurden bereits Algorithmen entwickelt, siehe [9], [16]. Aufgrund dieser Tatsache ist der Conley–Index ein besonders nützliches Werkzeug für die Analyse der globalen Input–Output Relation. Die topologische Natur des Conley–Indexes macht ihn stabil bezüglich kleiner Messfehler, macht Regularitätsannahmen unnötig, und erlaubt uns auch im Falle prozessbedingt *unterschiedlicher* Reaktoren unsere Ergebnisse, die wir im Fall *identischer* Reaktoren erzielt haben, anzuwenden. Das gilt, solange die Reaktoren nicht zu unterschiedlich sind. Ausserdem wollen wir hier noch einmal betonen, dass der Conley–Index in jeder beliebig hohen Dimension angewendet werden kann. Aus diesen Gründen gehören die Ergebnisse dieses Kapitels zu den Arbeitsblöcken *Hoch–Dimensionale Input–Output–Relationen* und *Identifizierung in Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren*.

Hingegen müssen die Informationen, die uns der Conley–Index liefert, bei jedem System neu interpretiert werden, da er nur eine Invariante der isolierten invarianten Mengen ist. Mit Hilfe des Conley–Indexes kann man aber zum Beispiel Fixpunkte, heterokline Orbits, periodische Orbits und Chaos aufspüren.

Den Conley–Index einer isolierten invarianten Menge S bezüglich einer Abbildung φ bezeichnen wir mit $h(S, \varphi)$.

4.2 Ergebnisse bei identischen verketteten Reaktoren

Wir kommen nun zu den Ergebnissen, die wir erreicht haben: Wir betrachten eine Kette von n identischen Reaktoren mit globaler Input–Output–Relation $\Phi = \varphi^n$, wobei φ die I–O–Relation jedes einzelnen Reaktors ist. Wir stellen uns vor, dass diese Abbildungen auf \mathbb{R}^n oder \mathbb{R}_+^n definiert sind, da die Variablen in unserem Fall Konzentrationen sind und damit nicht negativ. Unter der Voraussetzung, dass Φ (und damit auch φ) bijektiv und stetig ist, wurden folgende Sätze bewiesen, dabei befassen sich die drei ersten damit, einen Zusammenhang zwischen den bezüglich Φ isolierten invarianten Mengen und denen bezüglich φ herzustellen.

Satz 4.2.1 *Sei $S \subseteq X$ eine kompakte Menge. Falls S bezüglich φ isoliert invariant ist, dann ist S auch bezüglich Φ isoliert, invariant.*

Dieser Satz besagt insbesondere, dass die bezüglich φ isolierten invarianten Mengen – also genau die Mengen, die uns interessieren – sich unter den isolierten invarianten Mengen von Φ befinden und das sind genau die, die aus den Daten bestimmt werden können. Die folgenden Sätze helfen uns dabei, diejenigen isolierten invarianten Mengen von Φ zu bestimmen, die ebenfalls bezüglich φ isoliert, invariant sind.

Satz 4.2.2 *Sei S eine isolierte invariante Menge bezüglich Φ . Dann ist auch $\varphi(S)$ isoliert invariant bezüglich Φ .*

Dass eine Menge S unter $\Phi = \varphi^n$ invariant ist, bedeutet insbesondere, dass $\varphi^n(S) = S$ gilt. Der Satz besagt dann, dass die “Zwischenschritte” $\varphi^j(S)$, $j = 1, \dots, n - 1$, weitere isolierte invariante Mengen bezüglich Φ sind.

Satz 4.2.3 *Sei S eine isolierte invariante Menge bezüglich $\Phi = \varphi^n$. Dann ist die Vereinigung $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$ eine isolierte invariante Menge bezüglich φ .*

Die Idee ist nun, diesen Satz zu benutzen, um aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich Φ , die isolierten invarianten Mengen bezüglich φ zu rekonstruieren. Wenn man alle isolierten invarianten Mengen und ihre Conley–Indizes bezüglich Φ kennt, möchte man diese auch bezüglich φ kennen. Die Sätze 4.2.1 und 4.2.3 machen dies möglich und zwar im folgenden Sinne: Sei S eine bezüglich der globalen Input–Output Relation Φ isolierte invariante Menge. Entweder ist dann S schon unter φ isoliert invariant, oder nicht; in letzterem Fall ist dann $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$ bezüglich φ isoliert invariant. So können wir aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich Φ alle isolierten invarianten Mengen bezüglich φ herleiten. Nach dem

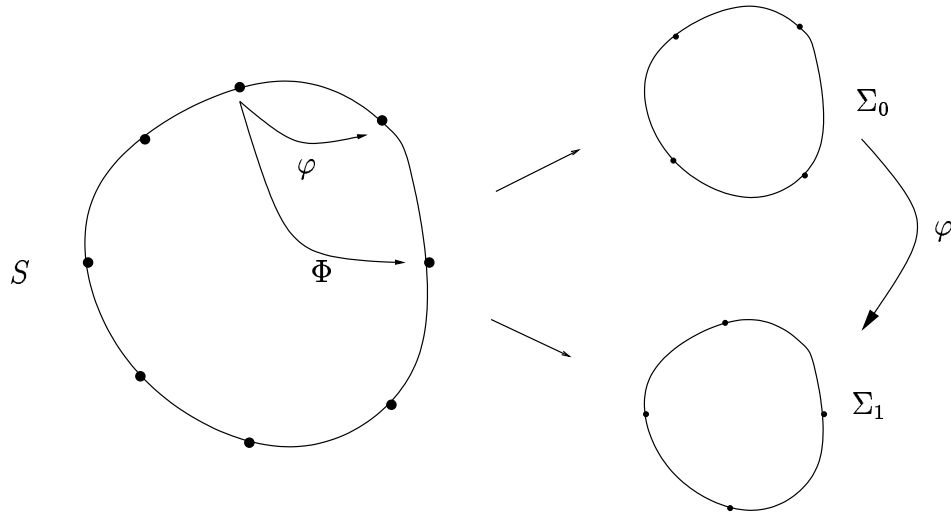


Abbildung 1: φ hat eine Orbit der Periode 8, $\Phi = \varphi^2$ hat 2 Orbits der Periode 4.

Satz 4.2.1 ist die Menge $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$ auch für Φ isoliert invariant, was uns eine für Φ und φ gemeinsame isolierte invariante Menge liefert. Was dies genau bedeutet, sieht man am besten in dem Fall, in dem φ einen periodischen Orbit besitzt – siehe dazu Abbildung 1. Der periodische Orbit S von φ zerfällt unter Anwendung von Φ in mehrere periodische Orbits $\Sigma_0, \dots, \Sigma_k$ von Φ mit $\Sigma_i = \varphi^i(\Sigma_0)$ für alle $i \in \{1, \dots, k\}$. Ausserdem ergibt die Vereinigung dieser Orbits den ursprünglichen Orbit wieder, d.h. $S = \bigcup_{i=0}^k \Sigma_i$.

Wir wissen dann, dass φ und Φ gemeinsame isolierte invariante Mengen besitzen. Bei diesen können wir nun die Conley–Indizes vergleichen, was der Inhalt des folgenden Theorems ist.

Theorem 4.2.4 *Sei X ein metrischer, lokal kompakter Raum (z.B. \mathbb{R}^n) und $\varphi : X \rightarrow X$ eine stetige Bijektion auf X und $\Phi = \varphi^n$. Sei S eine Menge, die sowohl bezüglich φ als auch bezüglich Φ isoliert, invariant ist. Dann ist $h(S, \Phi)$, der Conley–Index von S bezüglich Φ , gleich der n -ten Potenz von $h(S, \varphi)$, dem Conley–Index von S bezüglich φ . Oder kurz:*

$$h(S, \varphi^n) = (h(S, \varphi))^n$$

Ausführliche Beweise für 4.2.1, 4.2.3, und 4.2.4 stehen in [2].

Sei S eine isolierte invariante Menge bezüglich Φ . Der Satz 4.2.3 wirft dann folgende Frage auf: Wie kann man die isolierten invarianten Mengen $\varphi^l(S)$, $l = 1, \dots, n-1$ identifizieren, die wir ja zur Konstruktion von $\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S)$ brauchen? Dazu folgender Satz:

Satz 4.2.5 Sei S eine isolierte invariante Menge bezüglich $\Phi = \varphi^n$. Dann gilt $h(S, \Phi) = h(\varphi^l(S), \Phi)$ für alle $l = 1, \dots, n-1$.

Dieser Satz hilft uns bei der Identifizierung der $\varphi^l(S)$ weiter, weil er eine notwendige Bedingung dafür liefert, dass Mengen von dieser Form sind: alle $\varphi^l(S)$, $l = 1, \dots, n-1$, müssen gleiche Conley-Indizes haben. Wir sehen in den folgenden Beispielen, wie man dies ausnutzen kann.

Beispiel 4.2.6 1. Falls für eine Abbildung $\Phi : X \rightarrow X$ die Conley-Indizes der nicht trivialen, isolierten invarianten Mengen paarweise verschieden sind, kann aus den Sätzen 4.2.1, 4.2.3 und 4.2.5 gefolgert werden, dass dieselben isolierten invarianten Mengen auch für φ isoliert invariant sind. Mit dem Satz 4.2.4 kann man schliesslich die Conley-Indizes ausrechnen.

2. Auch wenn mehrere isolierte invariante Mengen identischen Conley-Index haben, kann man noch Aussagen treffen: Wir nehmen z.B. an, dass n gerade ist, und dass genau zwei bezüglich Φ isolierte invariante Mengen identischen Conley-Index haben. Wir bezeichnen diese mit $S_{1,2}$. Dazu betrachten wir den Fall, bei dem dieser Conley-Index keine n -te Wurzel besitzt (z.B. könnte der Conley-Index eine Matrix mit negativer Determinante enthalten). Dann folgt nach Theorem 4.2.4 und Satz 4.2.1, dass keine dieser Mengen bezüglich φ isoliert invariant ist. Es muss also $\varphi(S_1) = S_2$ und $\varphi(S_2) = S_1$ gelten. Ausserdem gilt nach Satz 4.2.4 $[h(S_1 \cup S_2, \varphi)]^n = h(S_1 \cup S_2, \Phi)$.

Nun wollen wir die Methode etwas systematischer darstellen. Sei S eine bezüglich Φ isolierte invariante Menge. Wir bezeichnen mit p die kleinste Zahl mit $\varphi^p(S) = S$, d.h. $p := \min\{j \geq 1 : \varphi^j(S) = S\}$. Die Zahl p muss ein Teiler von n sein. Da $\varphi^p(S) = S$, gilt für die erwartete isolierte invariante Menge bezüglich φ :

$$\bigcup_{l=0}^{n-1} \varphi^l(S) = \bigcup_{l=0}^{p-1} \varphi^l(S),$$

weil die Iteration von S bezüglich φ , $S, \varphi(S), \dots$, sich nach dem p -ten Mal wiederholen. Alle p "Stücke" $\varphi^l(S)$ haben identischen Conley-Index unter Φ .

Wie oben nehmen wir an, dass wir über alle isolierten invarianten Mengen und ihre Conley-Indizes bezüglich Φ verfügen. Es sei hier bemerkt, dass die Vereinigungen von isolierten invarianten Mengen wieder isoliert, invariant sind.

Wir wollen nun aus den isolierten invarianten Mengen bezüglich Φ die von φ bestimmen. Dazu folgende Schritte:

Erst einmal werden die isolierten invarianten Mengen sortiert, deren Conley-Index nur einmal vorkommt: das sind Mengen, die schon bezüglich φ isoliert invariant waren.

Dann durchläuft man jeden Teiler p von n in wachsende Reihenfolge (diese Operation dauert um so effektiver, je weniger Teiler n hat, also ist es ein Vorteil,

wenn n Primzahl oder mit wenig und grossen Teiler ist) und prüft nach, ob es mindestens p isolierte invariante Mengen gibt, die gleichen Conley-Index haben. Wenn dies der Fall ist, besteht die Möglichkeit, dass sie von der Form $\varphi^l(S)$ sind. Dafür gibt es notwendige Bedingungen, die wir gleich erläutern. Seien dazu S_0, \dots, S_{p-1} Mengen mit identischen Conley-Index. Wenn $S_l = \varphi^l(S_0)$ (bis auf Umnumerierung), dann ist $h(\bigcup_{l=0}^{p-1} S_l, \Phi)$ eine n -te Potenz, $h(S_l, \Phi)$ ist identisch für alle $l \in \{0, \dots, p-1\}$ und eine $\frac{n}{p}$ -te Potenz.

Wenn eine dieser notwendigen Bedingungen verletzt ist, oder weniger als p Mengen mit identischem Conley-Index existieren, dann sind diese Mengen bereits bezüglich φ isoliert invariant.

Wenn beide notwendige Bedingungen erfüllt sind, hat man gute Kandidaten für Mengen der Form $\varphi^l(S)$, $l \in \{0, \dots, p-1\}$. Sicherheit besteht aber nicht!

Nachdem die isolierten, invariante Mengen wie beschrieben sortiert wurden, kann man die Conley-Indizes ausrechnen. Diese Aufgabe besteht im wesentlichen darin, Wurzeln von Matrizen auszurechnen.

4.3 Ketten prozessbedingt unterschiedlicher Reaktoren

Wir befinden uns nun in dem Fall, bei dem $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$ ist und die Abbildungen φ_i , $i = 1, \dots, n$ nicht unbedingt gleich sein müssen. Wir wollen mit Hilfe des folgenden Satzes aus [5] noch Informationen aus der globalen Input-Output-Relation über die einzelnen Reaktoren gewinnen, wenn diese nahezu identisch sind.

Satz 4.3.1 *Sei $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ eine stetige Abbildung. Für jede isolierte invariante Menge S gibt es ein $\delta > 0$ mit der Eigenschaft, dass für alle g , die δ -nah an f sind, gilt*

$$h(S, f) = h(S', g).$$

Dabei bezeichnen wir mit S' die bezüglich g isolierte invariante Menge, die die gleiche isolierende Umgebung hat wie S .

Für zwei Abbildungen, die genügend nahe beieinander sind, ändert sich der Conley-Index also nicht (wohl bemerkt: die isolierte invariante Menge selbst könnte sich ändern: $S = S'$ muss nicht gelten!). Es stellt sich nun folgende Frage: Wie nah müssen die φ_i 's beieinander sein, damit auch $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$ nah bei einer Abbildung $\tilde{\Phi}$ ist, die eine n -te Potenz (das heisst von der Form φ_0^n), ist.

Satz 4.3.2 *Seien $\varphi_i : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ stetige Abbildungen, $i = 1, \dots, n$, $\Phi = \varphi_n \circ \dots \circ \varphi_1$, und S eine unter Φ isolierte invariante Menge mit isolierender Umgebung N .*

Wenn alle φ_j , $j \in \{1, \dots, n\}$, nah genug beieinander sind, dann gibt es eine stetige Abbildung φ_0 , die nah an allen φ_j ist und es gelten folgende Aussagen:

1. N ist eine isolierende Umgebung bezüglich $\tilde{\Phi} := (\varphi_0)^n$,
2. $h(S, \Phi) = h(\tilde{S}, \tilde{\Phi})$, wobei wir mit \tilde{S} die grösste bezüglich g isolierte invariante Menge bezeichnen, die in N enthalten ist.

Wir suchen ε , so dass Φ und $\tilde{\Phi}$ δ -nah aneinander sind, für ein aus Satz 4.3.1 stammendes δ , so bald die φ_j 's ε -nah beieinander sind. Dabei wird ε aus Ungleichungen hergeleitet. Als Hinweis dafür, was "nah beieinander" hier bedeuten soll, geben wir eine obere Schranke für ε an, wenn φ_0 Lipschitz-stetig mit Konstante C ist. In diesem Fall kann man $\varepsilon \leq \delta \frac{1-C}{2(1-C^n)}$ wählen, für $C \neq 1$ (was o.B.d.A. gilt).

Korollar 4.3.3 Seien φ_i , $i = 1, \dots, n$, $\varepsilon > 0$, wie im Satz 4.3.2 und N eine unter einem φ_i isolierte invariante Menge. Wir bezeichnen mit S_i die grösste bezüglich φ_i isolierte invariante Menge, die in N enthalten ist. Es gilt für alle $i \in \{1, \dots, n\}$

$$(h(S_i, \varphi_i))^n = h(S', \Phi).$$

Dabei ist S' die grösste bezüglich Φ isolierte invariante Menge, die in einer bezüglich $\tilde{\Phi}$ isolierenden Umgebung M von S_0 liegt.

Die Sätze aus diesem Paragraph erlauben uns die Conley-Index Methode, wie sie im vorigen Paragraph beschrieben wurde, auch in dem Fall anzuwenden, bei dem die Reaktoren nicht genau gleich sind. Sind nämlich die Reaktoren leicht unterschiedlich, gilt trotzdem die Regel *n-te Wurzel des Conley-Indexes der Input-Output Reaktion = Conley-Index der einzelnen Reaktoren*, falls eine gemeinsame isolierende Umgebung für alle Reaktoren φ_i , $i = 1, \dots, n$, existiert.

Ausserdem warnen uns die Sätze 4.3.2 und 4.3.3 per Kontraposition, falls die Reaktoren zu "weit" auseinander geraten: Wenn nämlich die Input-Output Relation Φ keine isolierte invariante Menge besitzt, deren Conley-Index eine n -te Potenz ist, bedeutet dies, dass die φ_i 's der einzelnen Reaktoren nicht nah genug beieinander sind. Dies ist allerdings nur eine hinreichende Bedingung!

4.4 Spezialfall: Stroboskopabbildungen

Wenn die *gesamte* Kette von Reaktoren von genügend glatten gewöhnlichen Differentialgleichungen bestimmt wird, kann man die globale Input-Output Relation als Stroboskopabbildung auffassen.

Es wird in regelmässigen Zeitabständen mit Zeitintervall T gemessen. Die globale Input-Output Relation Φ ist also die Zeit- T -Abbildung der Lösung der Differentialgleichung. In diesem Fall ist die Input-Output-Relation diejenige Abbildung, die einem Punkt x die Lösung der Differentialgleichung bei der Zeit T zuordnet. Die Stroboskopabbildungen bilden nun eine Klasse von Abbildungen, die immer eine n -te Wurzel besitzen: Wenn φ die Zeit- $\frac{T}{n}$ -Abbildung ist, gilt $\Phi = \varphi^n$ und φ

ist auch eine Stroboskopabbildung.

Es wurde bewiesen, dass der Conley-Index der Stroboskopabbildung nicht mehr und nicht weniger Informationen liefert, als der Conley-Index der Lösung. Es geht also durch die Zeitdiskretisierung keine Information verloren.

5 Ein Beispiel

5.1 Einführung

Wir betrachten zwei seriell verschaltete Reaktoren, in denen folgende Reaktionen stattfinden:



Die Reaktion (14) ist die Hauptreaktion, bei der der gewünschte Stoff P produziert wird, (15) und (16) sind Nebenreaktionen, bei denen ungewünschte Nebenprodukte D_1 und D_2 produziert werden. Alle auftretenden Reaktionen laufen in beide Richtungen ab.

Wir bezeichnen mit R_i die Reaktionsrate der Reaktion i .

Nun noch einiges zur Notation:

- X_0 sei der input-Vektor aus \mathbb{R}^5 , dessen Komponenten die Konzentrationen x_0^1 von E_1 , x_0^2 von E_2 , x_0^3 von P , x_0^4 von D_1 , x_0^5 von D_2 sind. Kurz

$$X_0 = \begin{pmatrix} x_0^1 \\ x_0^2 \\ x_0^3 \\ x_0^4 \\ x_0^5 \end{pmatrix}$$

- X_1 sei der Vektor der Konzentrationen am Output des **ersten** Reaktors.
- Schliesslich bezeichnen wir mit X_2 den Vektor der Konzentrationen des Gesamtoutputs, das heisst den des Outputs des zweiten Reaktors.
- Der obere Index bezeichnet wie oben die verschiedenen chemische Stoffe:

$$X_1 = \begin{pmatrix} x_1^1 \\ x_1^2 \\ x_1^3 \\ x_1^4 \\ x_1^5 \end{pmatrix}, X_2 = \begin{pmatrix} x_2^1 \\ x_2^2 \\ x_2^3 \\ x_2^4 \\ x_2^5 \end{pmatrix}$$

Die Konzentrationen in jedem einzelnen Reaktor erfüllen folgende Differentialgleichungen:

$$\dot{X}_1 = \lambda X_0 - R(X_1) - \lambda X_1 \quad (17)$$

$$\dot{X}_2 = \lambda X_1 - R(X_2) - \lambda X_2, \quad (18)$$

wobei λ positiv ist. Durch Umskalieren der Zeit können wir $\lambda = 1$ annehmen.

Die Abbildung $R : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^5$ ist wie folgt aus den Reaktionsraten R_j , $j = 1, 2, 3$, zusammengesetzt ist: Sei S die 5×6 stoechiometrische Matrix, deren Koeffizienten die stoechiometrische Koeffizienten der Gleichungen 14, 15, 16 sind. In dieser Matrix gibt etwa der j -te Eintrag in der ersten Zeile an, wieviel „Einheiten“ von $E1$ in der j -ten Reaktion verbraucht wird. Ist der Eintrag negativ, so wird der entsprechende Stoff verbraucht. Ist er positiv, so wird er produziert. $j = 1, 2, 3$ bezeichnet hierbei die Hinreaktionen von (14), (15), (16) und $j = 4, 5, 6$ die entsprechenden Rückreaktionen. Bei unserem Beispiel gilt

$$S = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 & 2 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Nun ist $R = S \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \end{pmatrix}$.

Das Ziel ist es, die Abbildung R zu identifizieren.

Es ist bekannt, dass die chemische Reaktionen, die durch die Differentialgleichungen (17) und (18) beschrieben werden, typischerweise ein Gleichgewicht erreichen: die Konzentrationen ändern sich nicht mehr. Wir betrachten das System in dem Gleichgewicht, also in $t \rightarrow \infty$. Die Abbildungen X_i , $i = 1, 2$, sind dann konstant und die zeitliche Ableitungen \dot{X}_i , $i = 1, 2$, Null. Die Input-Output Relation ist die Abbildung, die in $t \rightarrow \infty$ dem Input X_0 das entsprechende Output X_2 zuordnet. Aus den Gleichungen (17) und (18) erhalten wir für $t \rightarrow \infty$:

$$0 = X_0 - R(X_1) - \lambda X_1 \tag{19}$$

$$0 = X_1 - R(X_2) - \lambda X_2. \tag{20}$$

Von jetzt an, sind mit X_i , $i = 1, 2$, die Gleichgewichte gemeint, die in den Gleichungen (19) und (20) auftreten, und nicht mehr die zeitabhängigen Abbildungen in den Gleichungen (17) und (18) – falls nicht ausdrücklich darauf hingewiesen wird.

5.2 Stoechiometrische Unterräume

Die besondere Struktur unserer Gleichung (19) erlaubt uns eine weitere interessante Beobachtung. Betrachten wir noch einmal die Stoechiometrische Matrix

S :

$$S = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 & 2 & 2 & 1 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Wir stellen fest, dass S zwei Linkskernvektoren $\vec{l}_1 = (1, 1, 3, 2, 4)$ und $\vec{l}_2 = (1, -2, 0, 2, 1)$ besitzt. Multipliziert man S von *links* mit diesen Vektoren, so erhält man den Nullvektor.

Aufgrund der Definition von R gilt

$$\vec{l}_i R(X) = 0$$

für alle $X \in \mathbb{R}^5$ und $i = 1, 2$. Deswegen gilt

$$0 = \vec{l}_i(X_0 - X_1) \quad \text{und} \quad 0 = \vec{l}_i(X_1 - X_2) \quad (21)$$

für $i = 1, 2$, was unmittelbar aus (19) und (20) folgt. Also liegen die Vektoren $X_0 - X_1$ und $X_1 - X_2$ in einem dreidimensionalen Unterraum des \mathbb{R}^5 . Diesen Unterraum, der durch die Stoechiometrische Matrix S bestimmt ist, nennen wir *Stoechiometrischen Unterraum*. Er ist deswegen wichtig, da er eine Dimensionsreduktion erlaubt.

5.3 Annahmen an die Abbildung R

Wir wollen nun eine Methode zur Identifizierung von R beschreiben, die eine Modellierung der Reaktionsraten benutzt. Wir können dann im Nachhinein testen, ob die Annahme unseres Modells korrekt war (also insbesondere die Annahme an die spezielle Form der R_i 's).

Der Einfachheit halber werden wir im folgenden unsere Reaktionen (14), (15) und (16) *ohne* Rückreaktion betrachten! Die nachstehenden Resultate behalten aber auch im Fall mit Rückreaktion ihre Gültigkeit. Die Stoechiometrische Matrix S reduziert sich damit auf:

$$S = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Wir betrachten weiterhin die Gleichungen

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - R(X_1) - X_1 \\ 0 &= X_1 - R(X_2) - X_2, \end{aligned} \quad (22)$$

und es ist $R = S \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{pmatrix}$.

Die Reaktionsraten R_1, R_2, R_3 hängen von verschiedenen Parametern ab: Temperatur, Konzentrationen der Katalysatoren (Notation X_{Kat}), ... Laut der Modellierung können wir folgende Abhängigkeit annehmen:

$$\begin{aligned} R_1(x_i^1, x_i^2) &= K_1(T, X_{Kat})r_1(x_i^1, x_i^2) \\ R_2(x_i^1) &= K_2(T, X_{Kat})r_2(x_i^1) \\ R_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) &= K_3(T, X_{Kat})r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) \end{aligned}$$

Wir nehmen an, dass diese Parameter zeitlich konstant und in beiden Reaktoren identisch sind. Die K_j 's, $j = 1, 2, 3$, sind für uns die zu bestimmenden konstanten Koeffizienten. Für die r_j 's hingegen, $j = 1, 2, \dots, 6$ liegt ebenfalls ein Modell vor, das wir etwas später besprechen wollen. Setzen wir zunächst diese Funktionen als bekannt voraus.

Sei $\rho(X_i) := \begin{pmatrix} r_1(x_i^1, x_i^2) \\ r_2(x_i^1) \\ r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) \end{pmatrix}$. Dann erhalten wir aus (19) und (20)

$$0 = X_0 - S \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix} \rho(X_1) - X_1 \quad (23)$$

$$0 = X_1 - S \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix} \rho(X_2) - X_2 \quad (24)$$

Wir wollen nun im weiteren Verlauf für $\rho = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$ folgende Form annehmen:

$$\begin{aligned} r_1(x_i^1, x_i^2) &= (x_i^1)^2 x_i^2 \\ r_2(x_i^1) &= (x_i^1)^2 \\ r_3(x_i^1, x_i^2, x_i^4) &= x_i^1 x_i^2 x_i^4 \end{aligned} \quad (25)$$

6 Identifikation und Eindeutigkeit von K_1, K_2 und K_3

In diesem Abschnitt betrachten wir das System (22), also

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - R(X_1, T, Kat) - X_1 \\ 0 &= X_1 - R(X_2, T, Kat) - X_2, \end{aligned}$$

wobei wir im folgenden die Parameter T , Kat unterdrücken werden und nehmen aufgrund der Einleitung an, dass R folgende Form hat:

$$R(x^1, \dots, x^5) = S \begin{pmatrix} K_1(x^1)^2 x^2 \\ K_2(x^1)^2 \\ K_3 x^1 x^2 x^4 \end{pmatrix}.$$

Dabei sei die 5×3 Matrix \mathbf{S} wie oben gegeben. Ziel wird es sein, die unbekanntenen Konstanten K_1, K_2 und K_3 zu bestimmen. Wir gehen davon aus, dass die Datenbasis, auf der wir die globale Input-Output-Funktion $X_2 = X_2(X_0)$ kennen, dreidimensional ist.

Wie wir an der speziellen Form von R sehen, hängt R nicht von x^3 und x^5 ab. Deswegen liegt es nahe, zu neuen Koordinaten überzugehen. Wir schreiben von nun an $x = (\xi, \eta)$ für jedes Element $x \in \mathbb{R}^5$ mit $\xi = (x^1, x^2, x^4) \in \mathbb{R}^3$ und $\eta = (x^3, x^5) \in \mathbb{R}^2$. Weiterhin nehmen wir an, dass die dreidimensionale Datenbasis \mathcal{D} im Input-Raum über $\xi_{in} \in \mathbb{R}^3$ parametrisiert ist. D.h. in \mathcal{D} ist stets $\eta_{in} = (x^3, x^5)$ eine Funktion von $\xi_{in} = (x^1, x^2, x^4)$. Im weiteren Verlauf werden wir meistens die Komponenten x^3, x^5 von Elementen der Datenbasis unterdrücken.

In diesen Koordinaten koennen wir nun leicht zeigen, dass eine 2×3 Matrix Q existiert, so dass sich R schreiben lässt als

$$R(x^1, \dots, x^5) = (\rho(x^1, x^2, x^4), Q\rho(x^1, x^2, x^4)).$$

Hierbei ist ρ gegeben durch

$$\rho(y^1, y^2, y^3) = \mathbf{S}_{1,2,4} \begin{pmatrix} K_1(x^1)^2 x^2 \\ K_2(x^1)^2 \\ K_3 x^1 x^2 x^4 \end{pmatrix}$$

und die 3×3 Matrix $\mathbf{S}_{1,2,4}$ besteht aus den Reihen 1, 2 und 4 von \mathbf{S} , also

$$\mathbf{S}_{1,2,4} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Mittels dieser Koordinaten lässt sich (22) reduzieren auf:

$$\begin{aligned} 0 &= \xi_{in} - \rho(\xi_1) - \xi_1 \\ 0 &= \xi_1 - \rho(\xi_2) - \xi_2, \end{aligned}$$

wobei wir $X_i = (\xi_i, \eta_i)$ für $i \in \{1, 2\}$ gesetzt haben. Wir bemerken noch, dass wir aus den η -Gleichungen keine zusätzlichen Informationen gewinnen können, weshalb wir sie im weiteren auch nicht mehr betrachten. Da ja $\xi_1 = \xi_1(\xi_{in})$ unbekannt ist (man beachte $X_1 \circ X_1 = X_2$, und X_2 ist die globale Input-Output-Funktion) empfiehlt es sich, ξ_1 zu eliminieren:

$$0 = \xi_{in} - \rho(\rho(\xi_2) + \xi_2) - \rho(\xi_2) - \xi_2. \quad (26)$$

Wir wollen nun noch explizit festhalten, dass (26) von den gesuchten Konstanten K_1, K_2 und K_3 abhängt und schreiben deshalb ρ in der Form $\rho(\xi) = \mathbf{K} \cdot f(\xi)$ und hier bezeichnet \mathbf{K} die Diagonalmatrix, mit Diagonaleinträgen : K_1, K_2 und K_3 .

Dann lässt sich (26) wie folgt schreiben:

$$0 = \xi_{in} - \mathbf{K}f(\mathbf{K}f(\xi_2) + \xi_2) - \mathbf{K}f(\xi_2) - \xi_2. \quad (27)$$

Wir werden nun zeigen, dass sich diese Gleichung als Bestimmungsgleichung für K_1, K_2 und K_3 benutzen lässt. Eine kurzer Blick auf (27) zeigt, dass diese Gleichung nicht linear in dem Vektor (K_1, K_2, K_3) ist. Allerdings ist (27) affin linear in $\vec{K} = (K_1, K_2, K_3, K_1^2 K_2, \dots, K_1^4)$ und in \vec{K} stehen alle $K_1^{i_1} K_2^{i_2} K_3^{i_3}$ mit $i_1 + i_2 + i_3 \leq 4$ die in (27) auftauchen! Z.B. treten die unbekanntenen Konstanten K_1, K_2 und K_3 selbst in der Gleichung auf wegen des letzten Terms $\mathbf{K}f(\xi_2) - \xi_2$, der nicht im Argument von f steht. (27) hat also folgende Form

$$0 = \xi_{in} + A(\xi_2(\xi_{in}), \vec{K}) - \xi_2(\xi_{in}) \quad (28)$$

und die bekannte Abbildung A ist linear in \vec{K} . Diese wichtige Erkenntnis ist der Schlüssel für die Existenz und Eindeutigkeit von K_1, K_2, K_3 .

Die Existenz eines Vektors \vec{K}_* , dass (28) für alle ξ_{in} aus der Datenbasis löst, ist bereits vom Reaktor selbst gegeben. Damit sind ebenfalls die Konstanten K_1, K_2 und K_3 gegeben, falls wir davon ausgehen, dass unser Modell stimmt und R bzw. ρ wirklich in der obigen Form geschrieben werden kann.

Sei nun \vec{K}_* gegeben, so dass (28) für alle zulässigen ξ_{in} gelöst ist. Wir können dann zunächst die gesuchten Konstanten K_1, K_2 und K_3 direkt ablesen, da ja \vec{K}_* die Form $\vec{K}_* = (K_1, K_2, K_3, K_1^2 K_2, \dots, K_1^4)$ haben sollte. Danach können wir überprüfen, ob die Einträge von \vec{K}_* wirklich die Form $K_1^{i_1} K_2^{i_2} K_3^{i_3}$ mit $i_1 + i_2 + i_3 \leq 4$ haben, was zusätzliche Rückschlüsse über die Korrektheit des Systems erlaubt.

Wir kümmern uns nun um die Eindeutigkeit von \vec{K}_* . Diesen Abschnitt werden wir in der beigefügten MATHEMATICA-Datei „Eindeutigkeit“ bearbeiten. Wir ziehen dort eine etwas andere, aber leichter zu implementierende, Bestimmungsgleichung für den Vektor \vec{K}_* heran, die aber ebenfalls die Form (28) hat und in der die Konstanten K_1, K_2 und K_3 ebenfalls explizit auftreten.

Wir zeigen in eben genannter Datei, dass der einzige Vektor \vec{K} , der im Kern von allen linearen Abbildungen $A(\xi_2, \cdot)$ liegt, mit ξ_2 aus der Datenbasis, der Nullvektor ist. Dies zeigt dann die Eindeutigkeit.

6.1 Bestimmung von \vec{K}_* unter Störung der Datenbasis

Da es in der Realität unwahrscheinlich ist, dass wir die Output-Daten exakt messen können, haben wir in der beigefügten MATHEMATICA-Datei „Bestimmung von \mathbf{K} gest.“ zunächst Konstanten K_1, K_2 und K_3 vorgegeben ($K_1 = 2$, $K_2 = 4$ und $K_3 = 3$), mit diesen eine Datenbasis konstruiert und die Daten dann ein wenig gestört (so dass der relative Fehler pro Eintrag ca. 0,1 Prozent beträgt).

Wir haben mithilfe dieser gestörten Datenbasis dann den Vektor \vec{K}_{*gest} in diesem Fall bestimmt.

Es sei noch bemerkt, dass die dort gemachten Berechnungen auch mit anfänglich anderen K_1, K_2 und K_3 gemacht werden können.

6.2 Eindeutigkeit der Lösung ohne Strukturannahmen

Wir beschäftigen uns in diesem Kapitel mit der Frage, ob man Aussagen über die Eindeutigkeit der Funktion R machen kann, die

$$\begin{aligned} 0 &= X_0 - R(X_1) - X_1 \\ 0 &= X_1 - R(X_2) - X_2. \end{aligned} \tag{29}$$

erfüllt, ohne dabei spezielle Strukturvoraussetzungen, wie z.B. (25) zu machen. Es wird sich herausstellen, dass dies zumindest unter gewissen Annahmen an $DR(0)$ möglich ist, wenn Null als Fixpunkt von R angenommen wird. Viele praxisbezogene Modelle für R (ebenso unser obiges Modell für R mittels (25)) implizieren aufgrund des Massenwirkungsgesetzes $DR(0) = 0$, was in unseren Annahmen ausgeschlossen wird. Die folgenden Resultate bleiben aber weiterhin (auch auf die Praxis bezogen) interessant, wenn man berücksichtigt, dass durch Diffusion nicht zwingend $DR(0) = 0$ ist.

Das Problem, dem wir uns nun widmen werden, lautet wie folgt: Ist es möglich, die Funktion $R(X) = R(X, T, Kat)$ eindeutig aus den Daten $\{X_0, X_2(X_0)\}$ zu identifizieren ohne dabei die Strukturannahme (25) zu machen?

Wir drücken dies noch einmal anders aus: Wir wissen, dass Funktionen R und X_i 's, mit $i = 1, 2$, existieren, so dass (29) erfüllt ist und $X_1 \circ X_1 = X_2$ gilt. Dabei sind X_1 und X_2 beide als Funktionen von X_0 aufzufassen. Die Funktionen R und X_1 sind uns aber nicht bekannt. Die einzigen Daten, die wir messen können, sind die von $X_2 = X_2(X_0)$. Ebenfalls X_0 ist bekannt. Wir interessieren uns nun für folgende Frage: Ist das Tupel (R, X_1) , dass (29) löst und $X_1 \circ X_1 = X_2$ gilt unter bestimmten Annahmen eindeutig?

Wir betrachten nun X_1, X_2 und R die (29) erfüllen, mit $X_0 \in \mathbb{R}^5$. Wir nehmen weiterhin an, dass $X_1(0) = 0$ und $DR(0)$ eine Diagonalmatrix ist. Erfüllen nun X_1, X_2 und R (29), so gilt automatisch $X_1 \circ X_1 = X_2$, wie man leicht sehen kann und wir können folgende Beziehung aus (29) zwischen X_1 und R herleiten: Aus der ersten Gleichung von (29) ergibt sich direkt

$$X_0 = ((R + 1) \circ X_1)(X_0).$$

Wir wenden $(R + 1)^{-1}$ auf beide Seiten an und erhalten dadurch:

$$(R + 1)^{-1}(X_0) = X_1(X_0). \tag{30}$$

Wir sehen also, dass zwischen den Funktionen X_1 und R eine enge Verbindung herrscht.

Ist nun die Lösung X_1 von $X_1 \circ X_1 = X_2$ nahe Null *eindeutig*, so ist R eindeutig durch (30) gegeben. In diesem Fall gibt es also ein eindeutiges Paar (X_1, R) für das (29) gilt, da ein anderes R ebenfalls durch (30) eine Lösung X_1 von $X_1 \circ X_1 = X_2$ definiert, diese aber eindeutig ist.

An der Identität (30) sehen wir auch, dass der Fall $DR(0) = 0$ zu Problemen führt: Aus $DR(0) = 0$ ergibt sich nämlich aus (30) $DX_1(0) = id$ und damit auch $(DX_1(0))^2 = DX_2(0) = id$ und es ist i.a. nicht möglich, eine „n-te Wurzel“ aus so einer Abbildung X_2 zu ziehen.

Wir können nun den folgenden Satz beweisen:

Satz 6.2.1 *Erfülle $DX_2(0)$ eine gewisse Nichtresonanzbedingung. Dann existiert nahe Null ein eindeutiges Paar (X_1, R) , das (29) löst. Es ist X_1 nahe Null definiert, mit $X_1 \circ X_1 = X_2$ und R hängt durch (30) mit X_1 zusammen.*

Haben wir so eine Lösung $X_1 = X_1(X_0)$ gefunden, so ist R mittels (30) durch

$$R = X_1^{-1} - 1$$

nahe Null durch X_1 definiert.

Literatur

- [1] G. Beletskii *Equivalence of Normal forms of germs of smooth mappings*, Russian Math. Surveys 33:1 (1978), 107-177
- [2] J. Blanca *Der Conley-Index und das n -te Wurzelproblem*, Diplomarbeit an der Freien Universität Berlin (2004).
- [3] R. W. Easton, *Trellises formed by stable and instabile Mannigfaltigkeiten in the plane*, Trans. Amer. Soc. **294** (1986), 719–732.
- [4] B. Fiedler; V. Gelfreich, *Roots of a Diffeomorphism and an identification problem for a chain of chemical reactors*, Preprint (2003).
- [5] J. Franks; D. Richeson *Shift Equivalence and the Conley Index*, Transactions of the American Mathematical Society (2000), Vol 352 ,Nr 7, S. 3305-3322.
- [6] J. Härterich *Homokline Punkte und Wurzeln von Diffeomorphismen*, Technical Report.
- [7] D. M. Grobman, *Homeomorphism of systems of differential equations*, Dokl. Akad. Nauk SSSR **128** (1959), 880–881.
- [8] P. Hartman, *On local homeomorphisms of Euclidean spaces*, Bol. Soc. Mat. Mex. II. Ser. **5** (1960), 220–241.
- [9] M. Mrozek *An algorithmic approach to the Conley Index theorie*, J. Dyn. Differ. Equations 11, No.4, (1999) S. 711-734.
- [10] J. Palis, *On Morse-Smale dynamical systems*, Topology **8** (1969), 385–405.
- [11] J. Palis and W. de Melo, *Geometric theory of dynamical systems*, Springer (1982).
- [12] J. Palis and F. Takens *Hyperbolicity and sensitive chaotic dynamics at homoclinic bifurcations. Fractal dimensions and infinitely many attractors*, Cambridge Studies in Adv. Math. **35** (1993).
- [13] V. Rom-Kedar, *Homoclinic tangles-classification and applications*, Nonlinearity **7** (1994), 441–473.
- [14] D. G. Sterling, H. R. Dullin, and J. D. Meiss, *Homoclinic bifurcations for the Hénon Abbildung*, Physica D **134** (1999), 153–184.
- [15] S. Sternberg *On the structure of local homeomorphisms of Euclidean n -Space, II*
- [16] A. Szymczak *A combinatorial procedure for finding isolating neighborhoods and index pairs*, Proc. R. Soc. Edinb., Sect. A 127, No.5, (1997) S. 1075-1088.