HSGYM, 29.1.2015

Gewöhnliche Differentialgleichungen
Anschauliche Numerik

Ralf Hiptmair

(Seminar für Angewandte Mathematik, ETH Zürich)

I. Einleitung: Chemische Reaktionskinetik

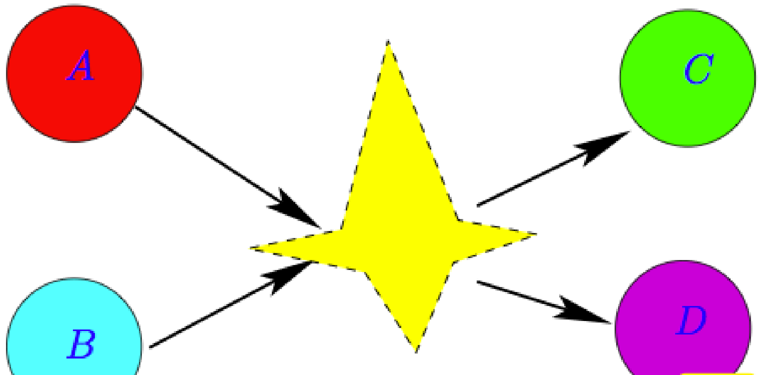


Fig. 5

Bimolekulare chemische Reaktion

$$(A) + (B) \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} (C) + (D)$$

$k_i \mathrel{\hat{=}}$ Reaktionskonstanten

$c_X(t) \mathrel{\hat{=}}$ Zeitabhängige Konzentration des Reaktanden X

Reaktionsgeschwindigkeit ~ Produkt der Konzentrationen der Reaktionspartner

▷ Reaktionsgleichung:

$$\boxed{\dot{c}_A = \dot{c}_B = -\dot{c}_C = -\dot{c}_D = -k_1 c_A c_B + k_2 c_C c_D}$$

Hinreaktion Rückreaktion

= Gewöhnliche Differentialgleichung $\dot{y}(t) = f(y(t))$

mit
$$y(t) = \begin{bmatrix} c_A(t) \\ c_B(t) \\ c_C(t) \\ c_D(t) \end{bmatrix},$$

$$f(y) = (-k_1 y_1 y_2 + k_2 y_3 y_4) \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Invariante: → Erhaltung der Teilchenzahl

$$c_A(t) + c_B(t) + c_C(t) + c_D(t) = \text{const.}$$

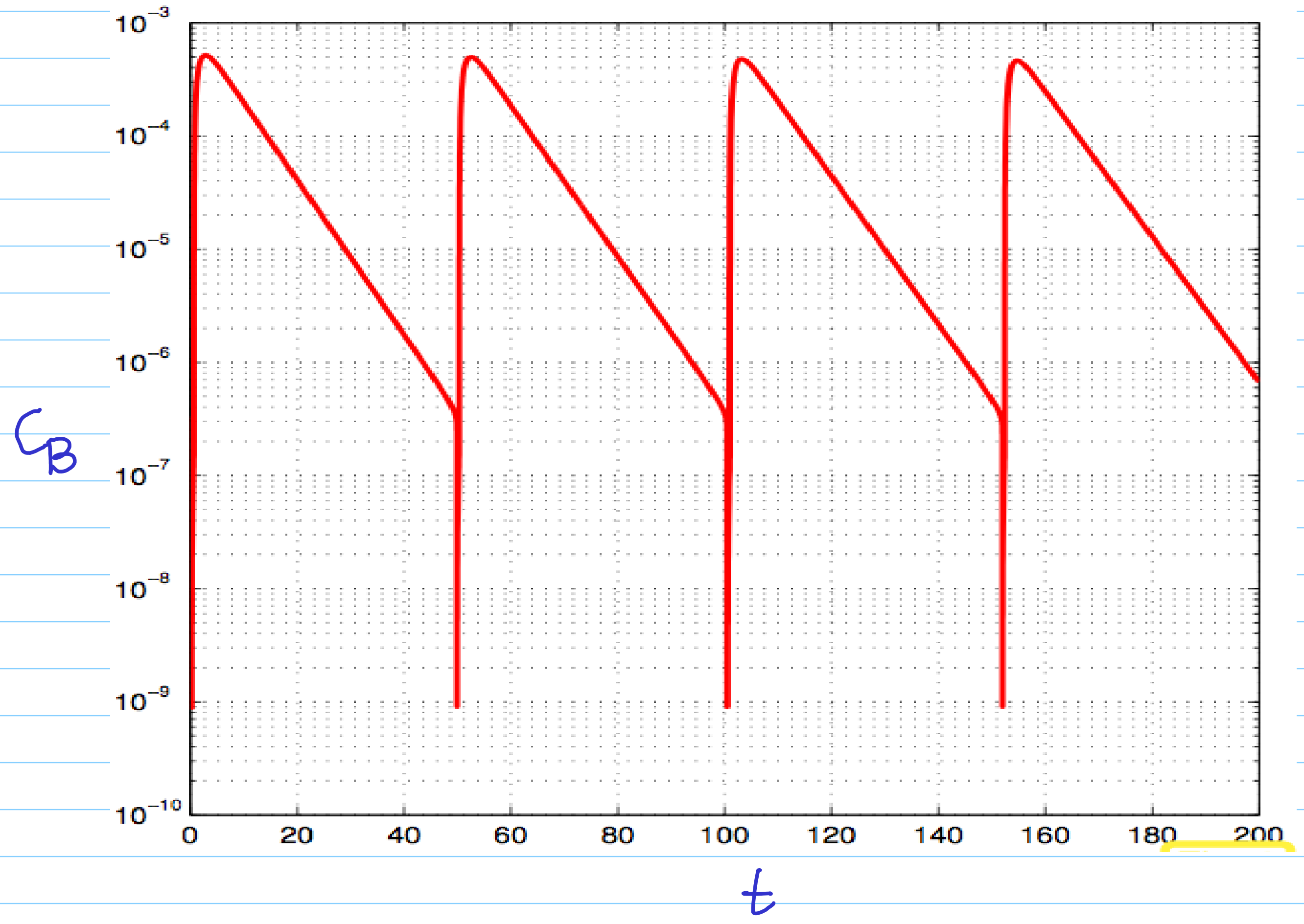
Komplexes Beispiel : Oregonator-Reaktion

$$A + B \xrightleftharpoons{k_1} C$$
$$C + B \xrightleftharpoons{k_2} D$$
$$A + C \xrightleftharpoons{k_3} C + C + E$$
$$C + C \xrightleftharpoons{k_4} D$$
$$E \xrightleftharpoons{k_5} B$$

[Rückreaktionen unbedeutend]

$$\dot{y}_A = -k_1 y_A y_B - k_3 y_A y_C$$
$$\dot{y}_B = -k_1 y_A y_B - k_2 y_B y_C$$
$$\dot{y}_C = k_1 y_A y_B - k_2 y_2 y_3 - k_3 y_A y_C - 2 k_4 y_C^2$$
$$\dot{y}_D = k_2 y_B y_C + k_4 y_C^2$$
$$\dot{y}_E = k_3 y_1 y_3 - k_5 y_5$$

Numerische Simulation (MATLAB) :




```
% Simulation: Oregonator-Reaktion,
% siehe Deuflhard/Bornemann: Numerische Mathematik II, S11

% Reaktionskonstanten k1 ... k5
k = [1.34; 1.6e9; 8e3; 4e7; 1.0];
% Rechte Seite der Reaktions-ODE
f = @(t,y) f_oreg(y,k);
% Anfangskonzentrationen c1, ... c5
c = [.6e-1; .33e-6; .501e-10; .3e-1; .24e-7];
% Zeitintervall [t0 ... tn]
tspan = [0,200];
% Numerische Integration mit steifem Integrator
opts = odeset('AbsTol',1e-14);
[T,Y] = ode15s(f,tspan,c,opts);
```

II. Einleitendes Beispiel: Populationsdynamik

Räuber-Beute-Modell (Lotka-Volterra-Dgl.)

$$\dot{u} = (2-v)\,u, \qquad \dot{v} = (u-1)\,v, \qquad y = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad f(y) = \begin{bmatrix} (2-v)u \\ (u-1)v \end{bmatrix}$$

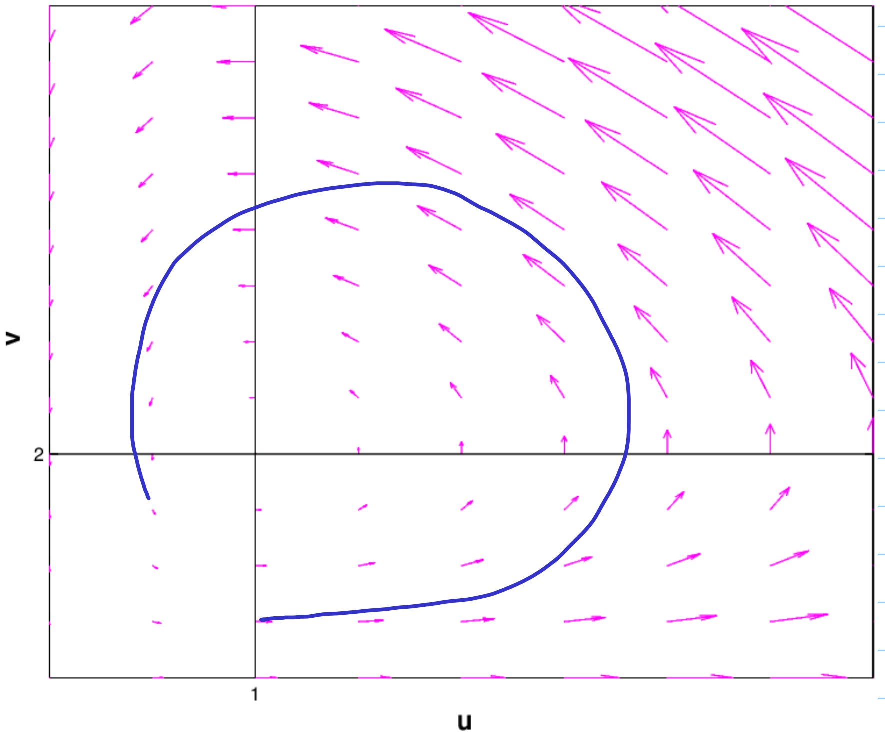
$u \mathrel{\hat{=}}$ Populationsdichte Beute

$v \mathrel{\hat{=}}$ Populationsdichte Räuber

Lotka-Volterra-Dgl.:

Vektorfeld

$y \to f(y)$



Eine Invariante:

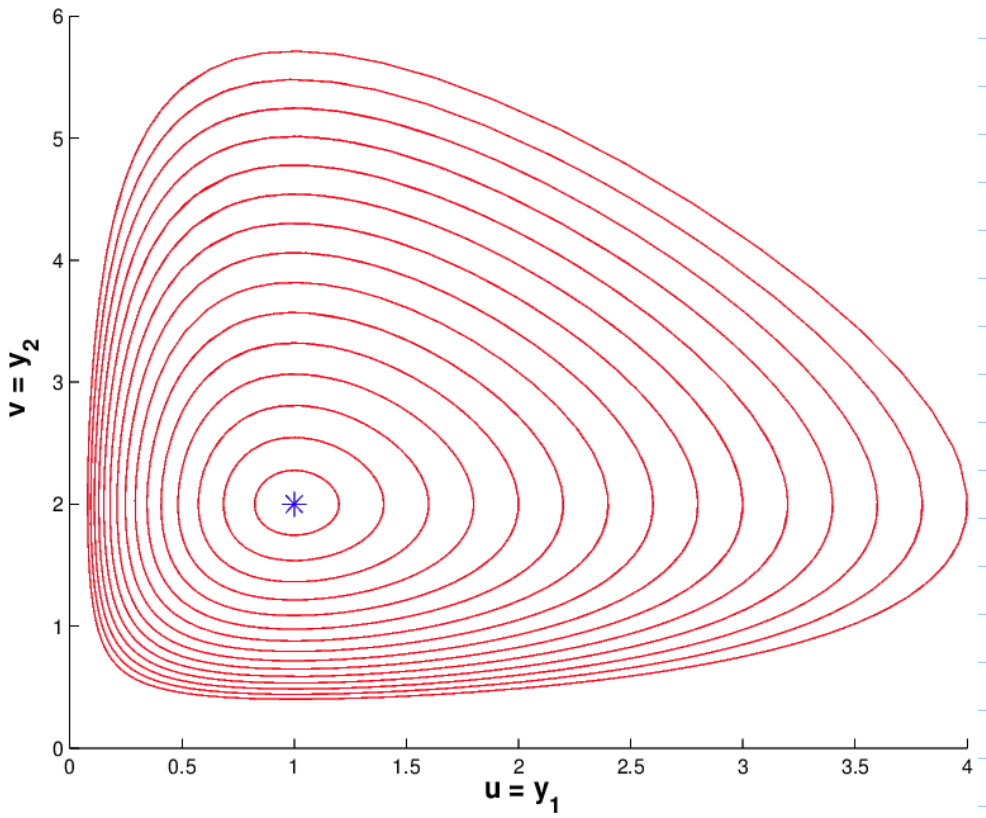
$$I(u,v) = u - \log u - 2\log v + v$$

$\frac{d}{dt} I(u(t), v(t)) = 0$ [Kettenregel]

I Invariante von $\dot{y} = f(y) \iff \nabla I(y) \cdot f(y) = 0 \;\; \forall y$

Niveaulinien von $I(u,v)$ sind immer geschlossene Kurven

$\Rightarrow$ Alle Lösungen periodisch!



III. Explizite Einschrittverfahren

Anfangswertproblem: $\dot{y} = f(y)$, $y(0) = y_0$

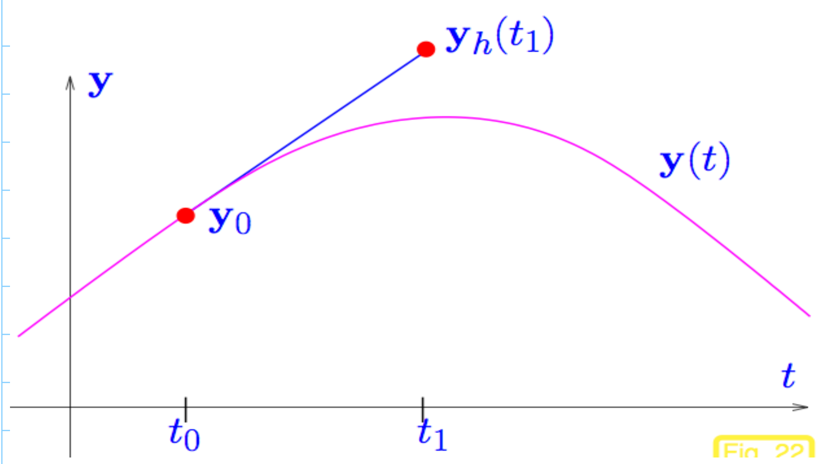


Fig. 22

Zeitgitterpunkte

Explizites Eulerverfahren

(Euler 1768)

$$\boxed{y_h(t_1) = y_0 + h\,f(y_0)}$$

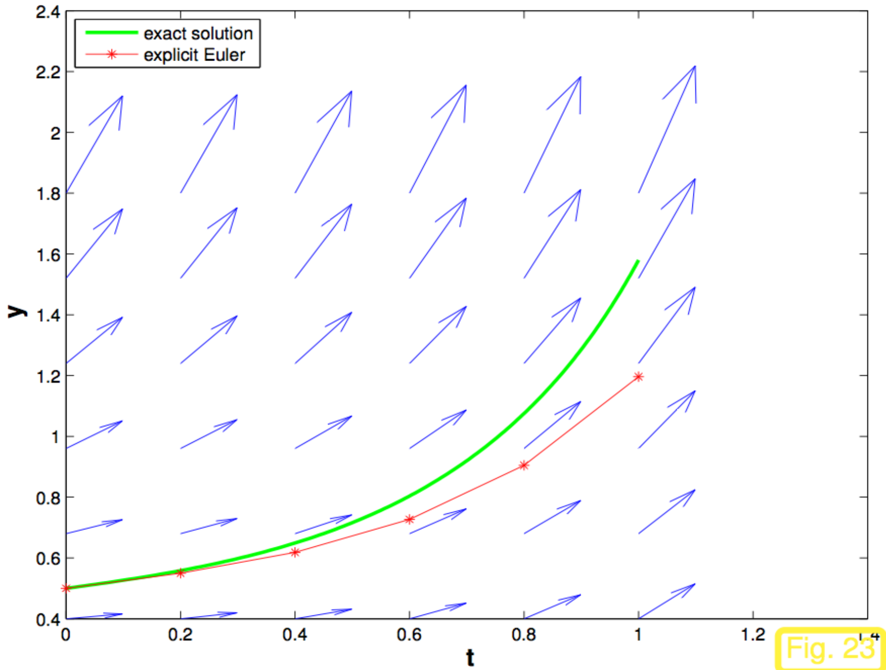
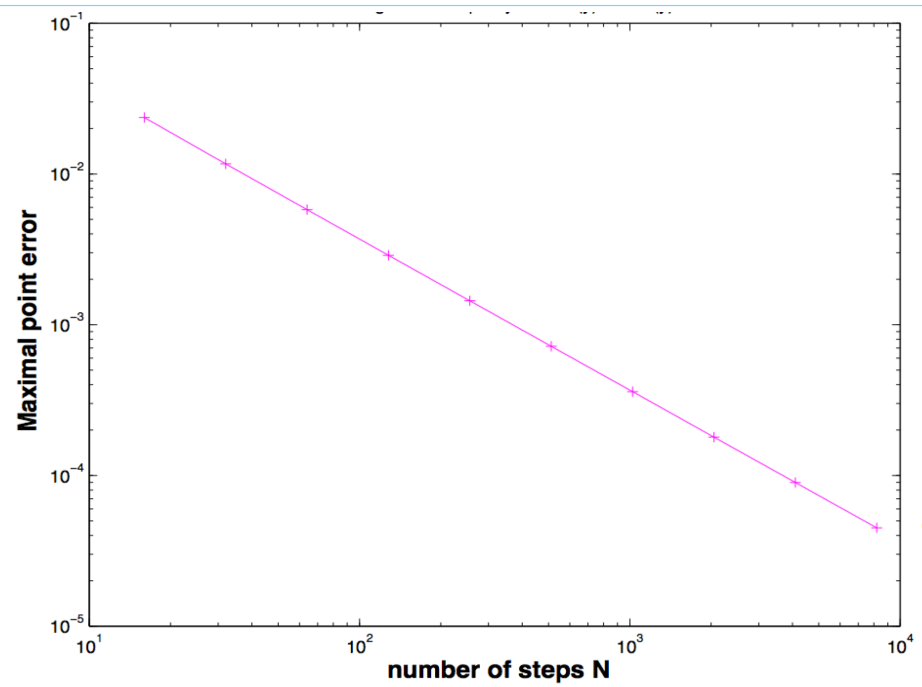


Fig. 23

"Polygonzugverfahren"

$\dot{y} = y^2 + t^2$

Konvergenz:



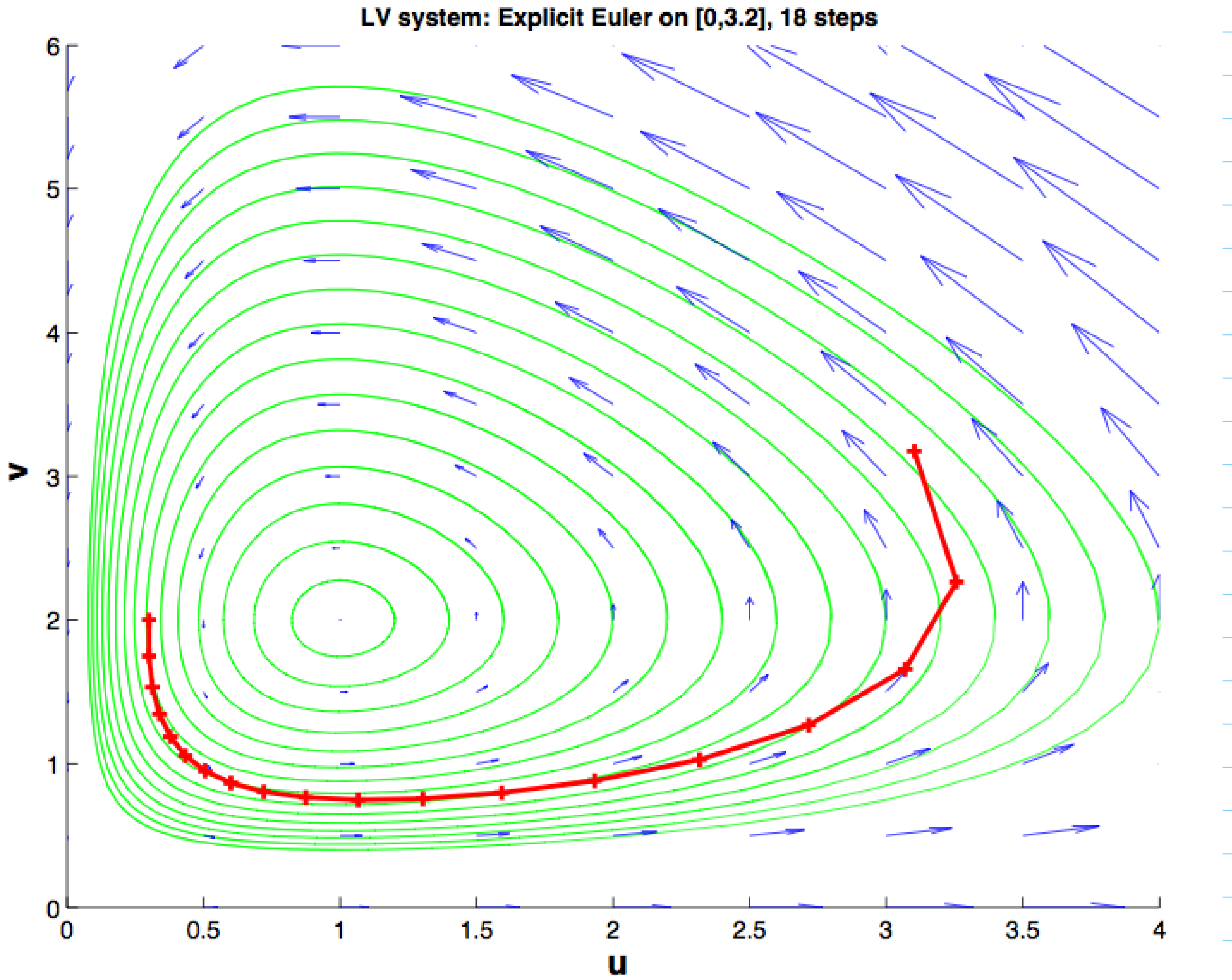
$$\left.\begin{aligned} \dot{y} &= \cos^2 y \\ y(0) &= 0 \end{aligned}\right\}$$

$\Rightarrow y(t) = \arctan(t)$ auf $[0,2]$

$\boxed{\text{Fehler} \sim h}$

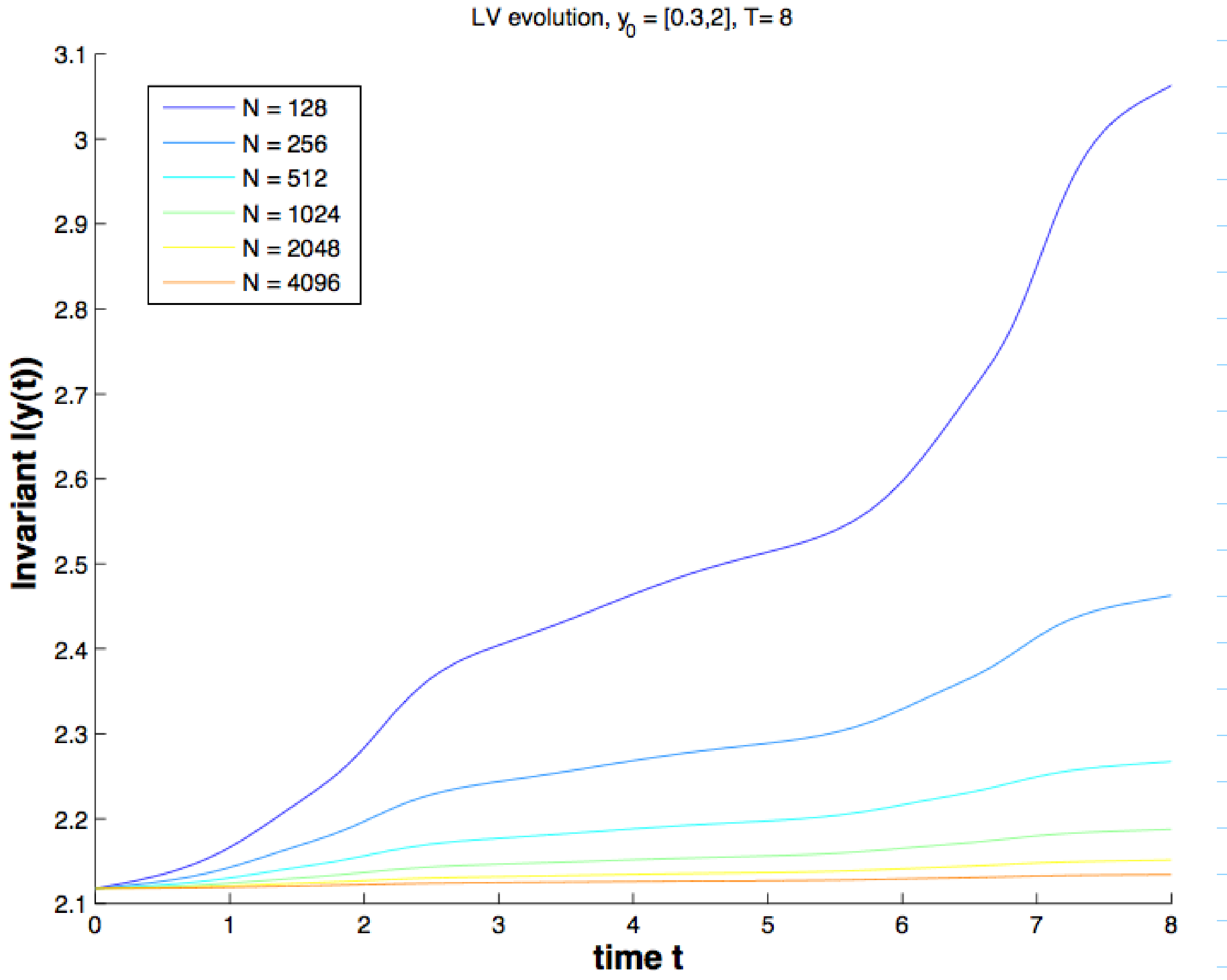
(äquidistante Schritte)

Explizites Eulerverfahren für Lotka-Volterra-AWP:



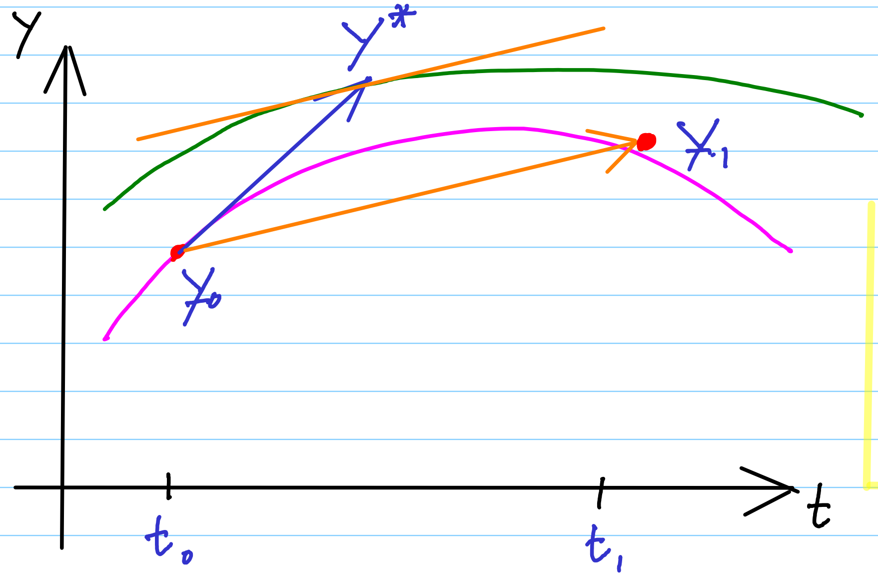
- ▷ Lösung → ∞ für "lange Zeiten"
- ▷ Keine periodischen Lösungen

Explizites Eulerverfahren für LV-AWP
"Erhaltung" der Invarianten



- ▷ Drift von $I(y_h(t)) \sim h$

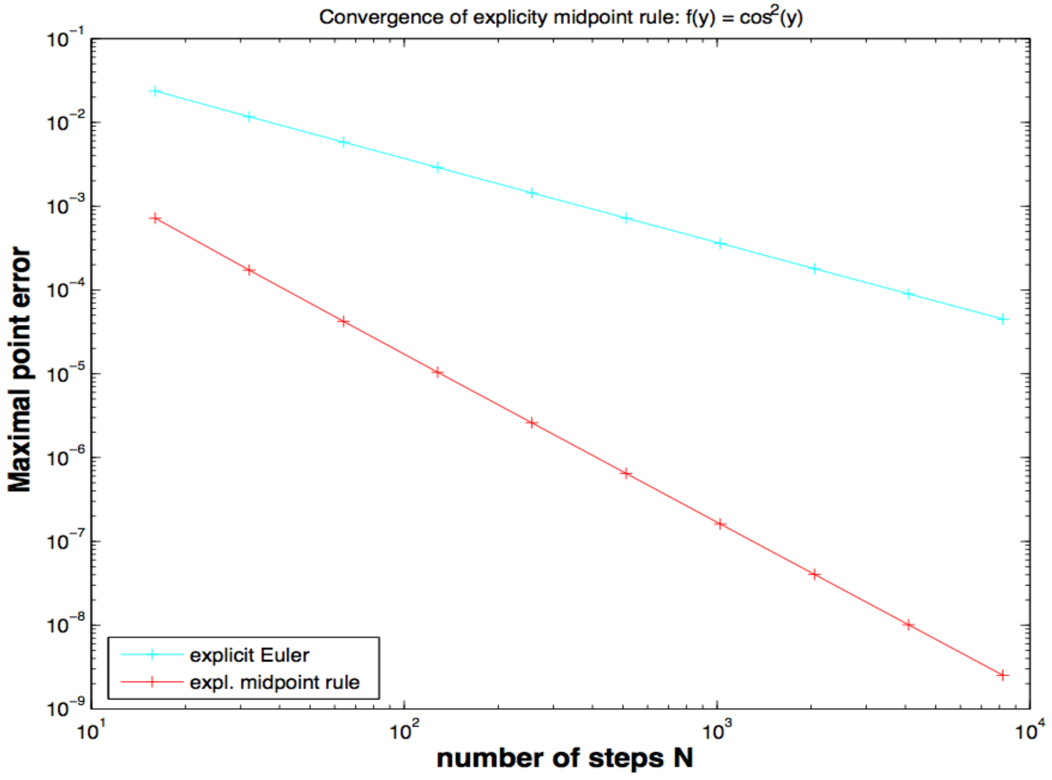
Ein genaueres explizites Einschrittverfahren:



Explizite Mittelpunktsregel

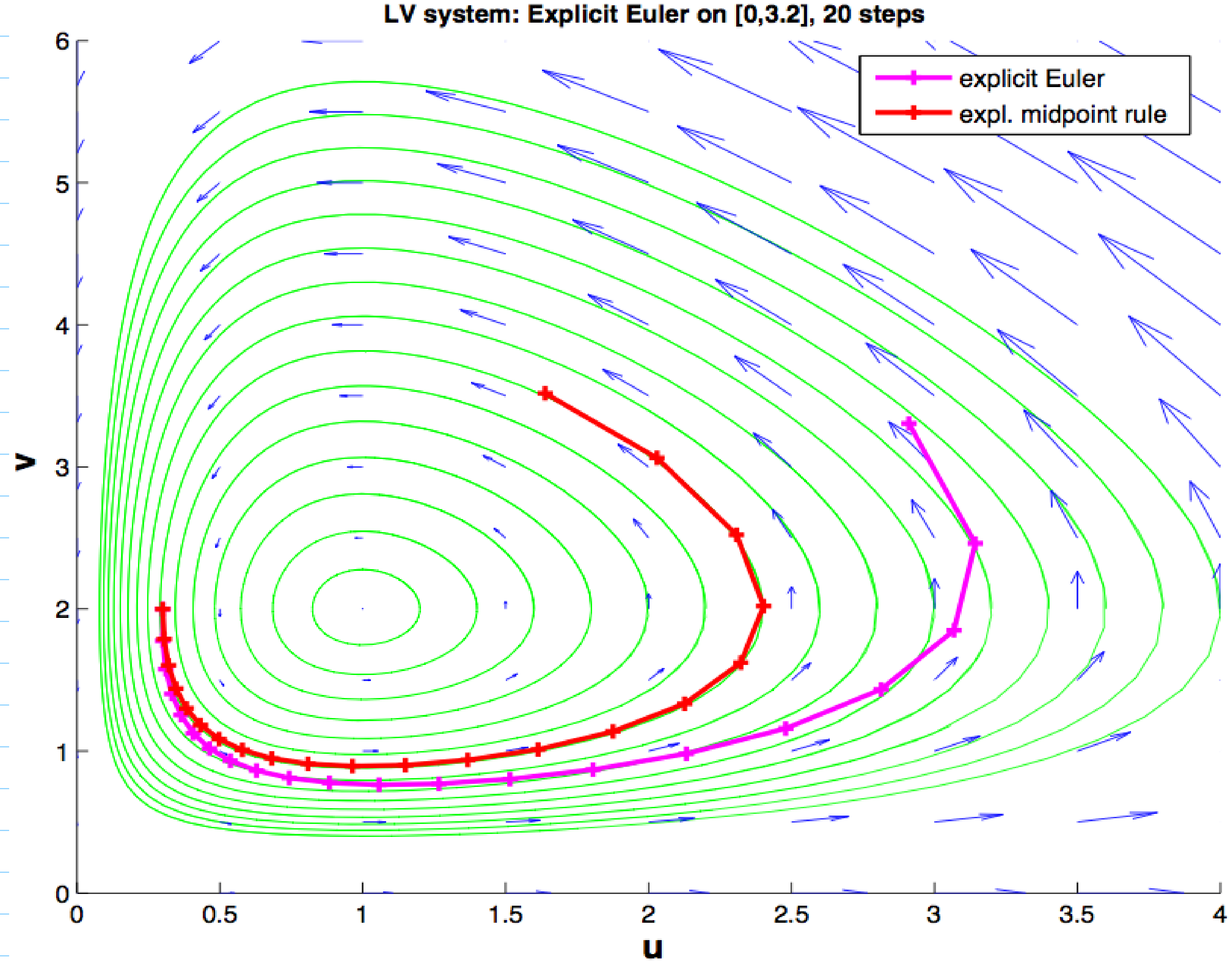
$$\boxed{\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h f(y^*) \\ y^* &= y_0 + \tfrac{1}{2} h f(y_0) \end{aligned}}$$

Konvergenz:



Punktfehler $\sim h^2$

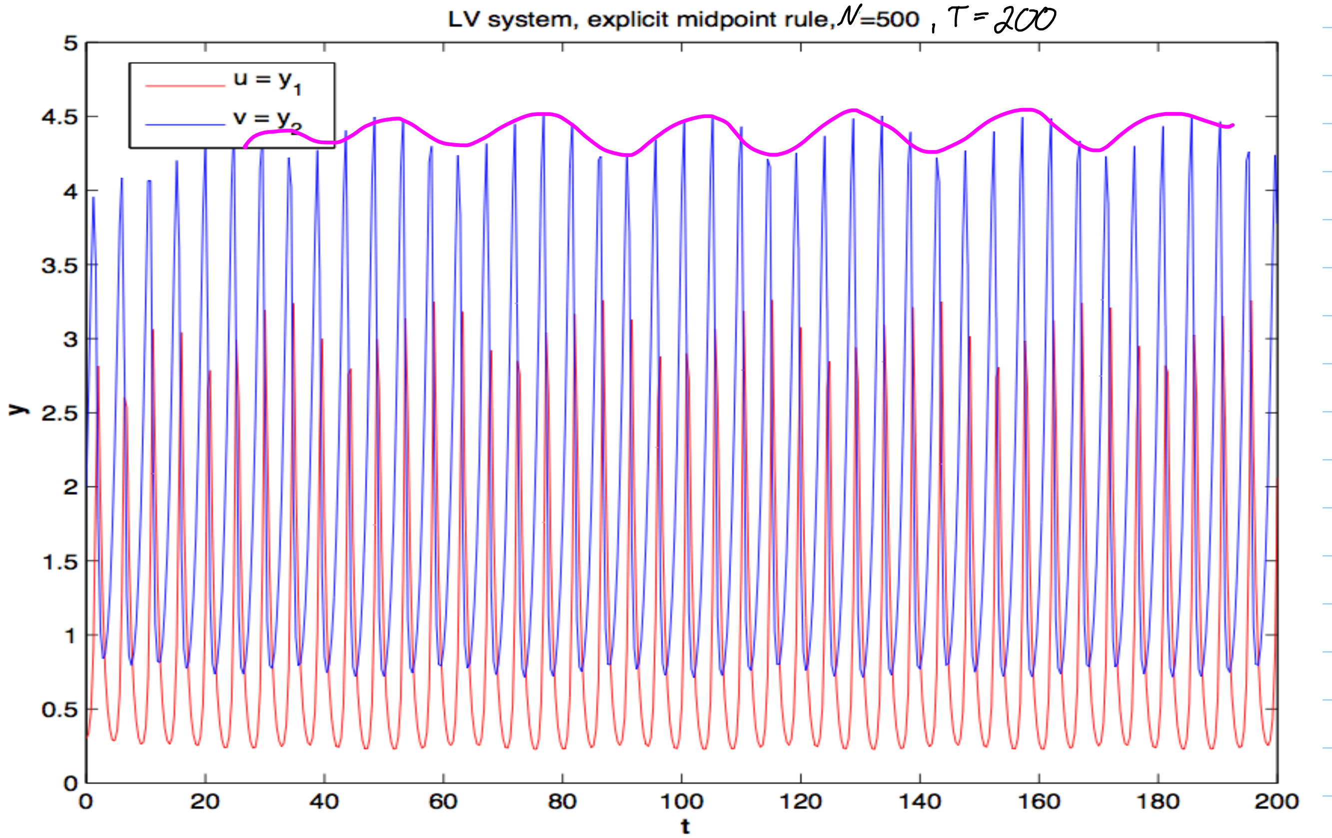
Explizite Mittelpunktregel für LV-AWP:



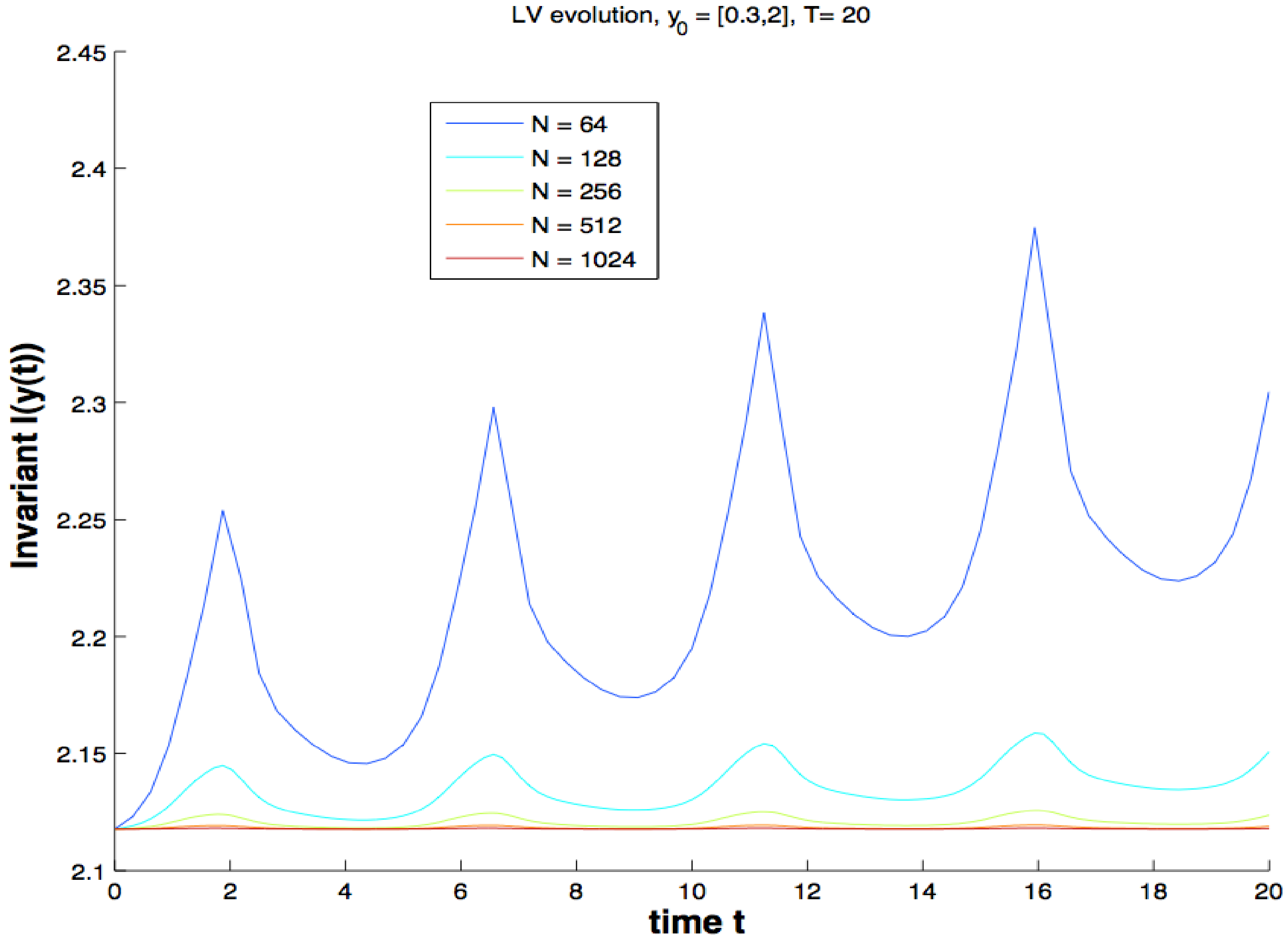
Explizite Mittelpunktsregel in MATLAB:

```
% Langzeitintegration des LV systems mit der
% expliziten Mittelpunktsregel

% Rechte Seite der Lotka-Volterra Dgl.
fn = @(x) [x(1)*(x(2)-2);x(2)*(1-x(1))];
% Definition des Anfangswertproblems
y = [0.3;2]; T = 200;
% Parameter fuer explizite Mittelpunktregel
N = 500; h = T/N; % Anzahl der Zeitschritte/Schrittweite
for k=1:N
   yc = y(:,end);  y = [y, yc + h*fn(yc+0.5*h*fn(yc))];
end
% Graphische Ausgabe
figure('name','lvemp');
plot((0:N)*T/N,y(1,:),'r-',(0:N)*T/N,y(2,:),'b-');
xlabel('{\bf t}'); ylabel('{\bf y}');
legend('u = y_1','v = y_2','location','best');
title('LV system, explicit midpoint rule, T=500');
```



Explizite Mittelpunktsregel für LV-AWP: Erhaltung der Invarianten



▷ Drift $I(y_h(t_i)) \longrightarrow \infty$ für $t_i \longrightarrow \infty$

IV. Quadratische Invarianten

Bsp: Dgl. einer Drehbewegung in der Ebene

$$\begin{aligned}\dot{y}_1 &= -y_2\\ \dot{y}_2 &= y_1\end{aligned} \quad \triangleright \quad \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1(0) \\ y_2(0) \end{bmatrix}$$

Längenerhaltung: $\|y(t)\|^2 = \text{const}$

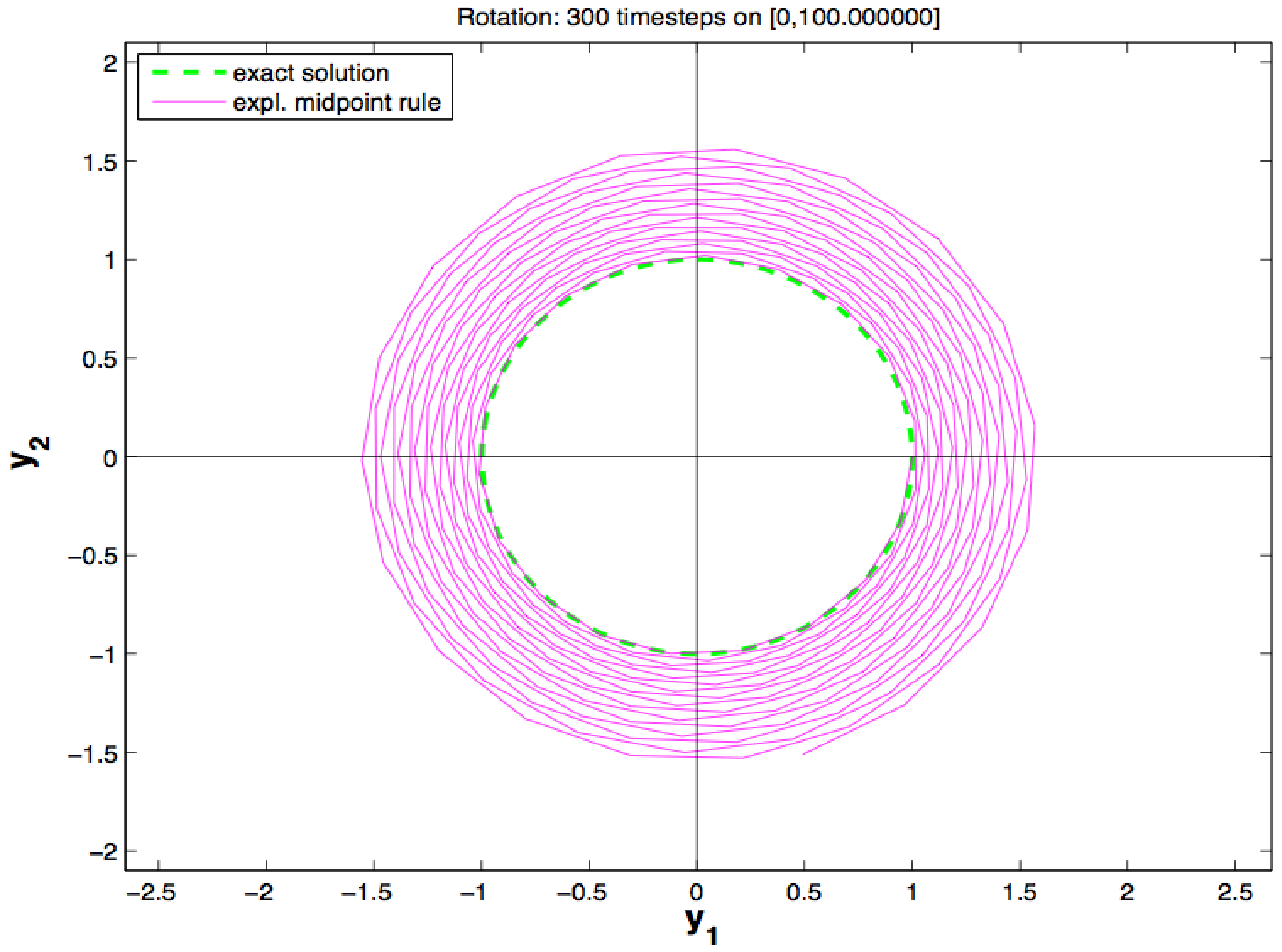
Allgemein für Dgl. $\dot{y} = f(y)$, $f: D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

Quadratische Invariante: $I(y) = \frac{1}{2} y^T A y$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

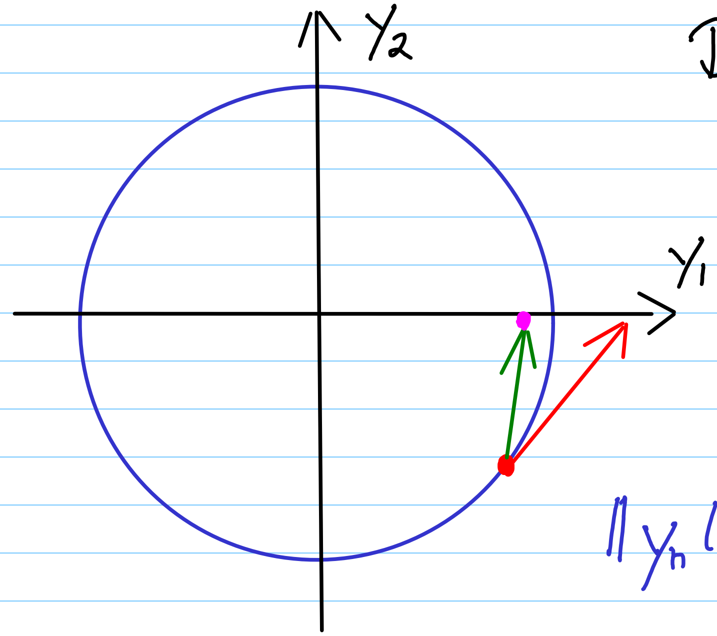
Satz: Dgl. $\dot{y} = f(y)$ hat quadratische Invariante I genau dann wenn

$$f(y) \cdot Ay = 0 \quad \text{für alle } y \in D$$

Drehbewegung: Zeitintegration mit expliziter Mittelpunktsregel



Drift: $\|y_h(t_i)\| \to \infty$ für $t_i := ih \to \infty$



Drehbewegung:
"zentrifugale Tangenten"

Jedes konsistente explizite Einschrittverfahren erleidet

$\|y_h(t_i)\| \longrightarrow \infty$ für $t_i := ih \rightarrow \infty$

Idee: Benutze Tangente am Endpunkt

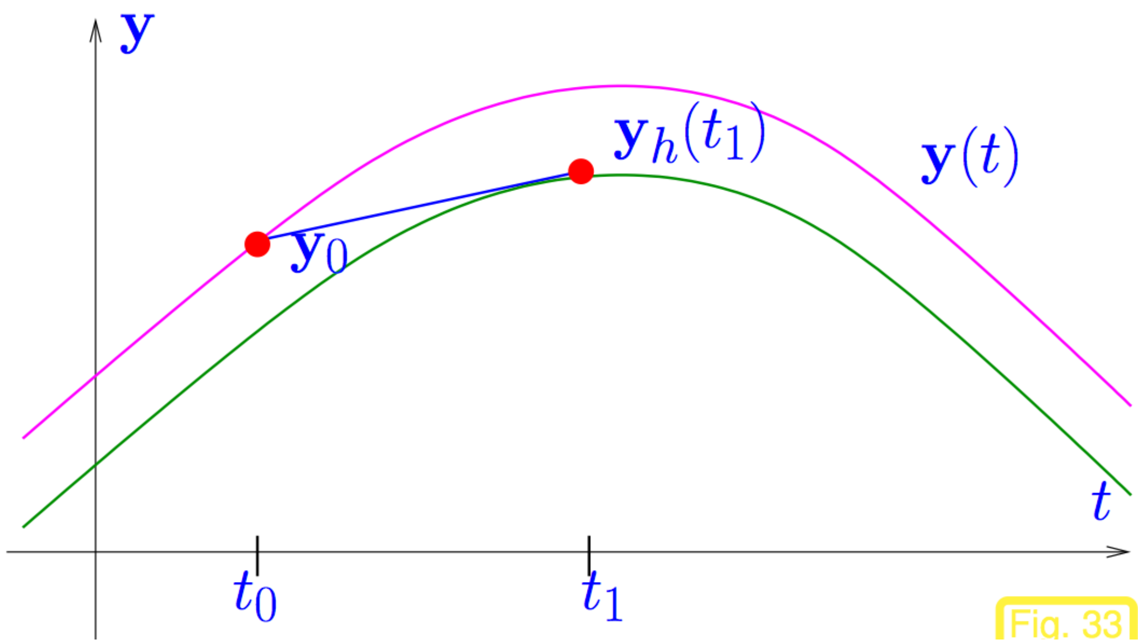
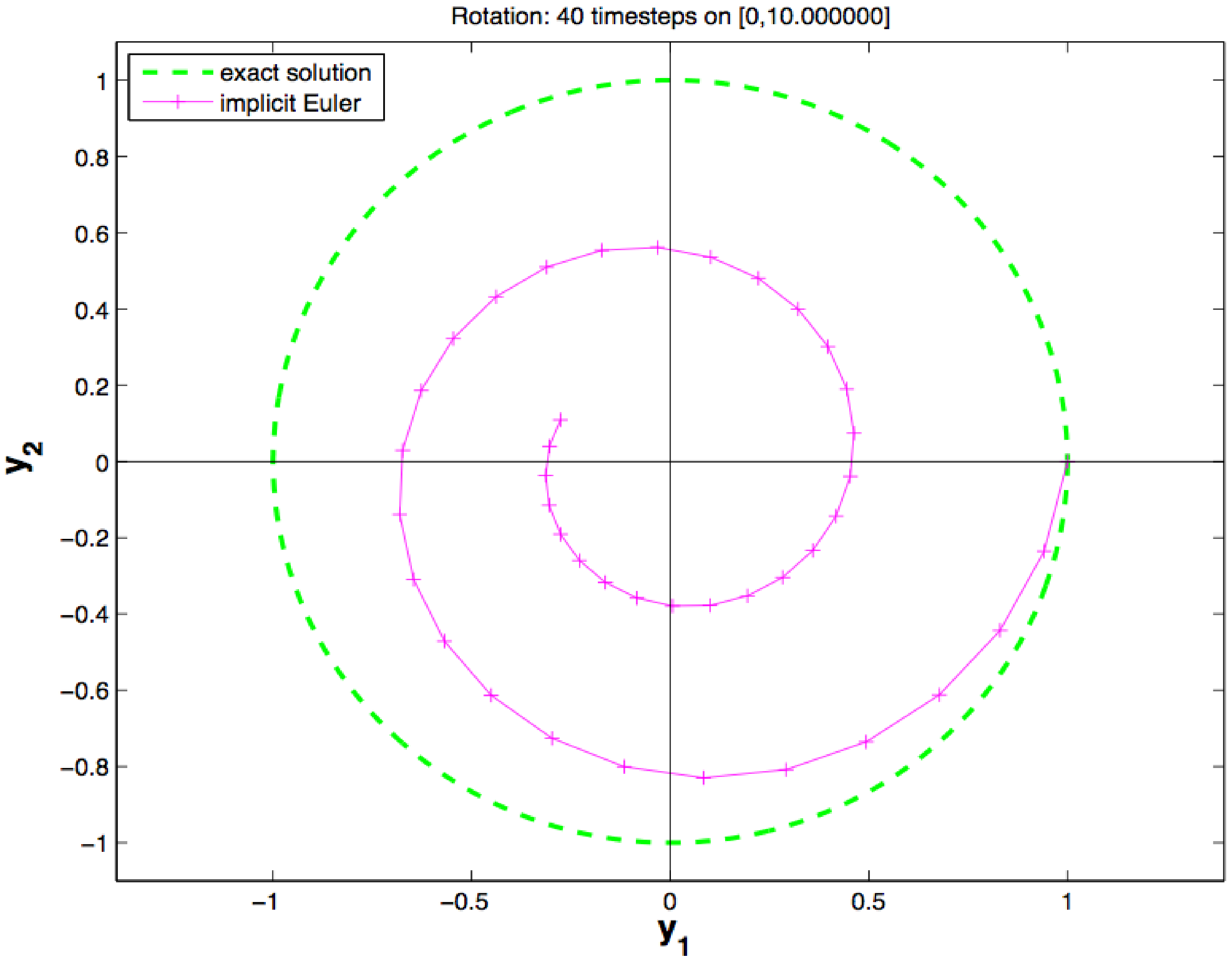


Fig. 33

Implizites Eulerverfahren

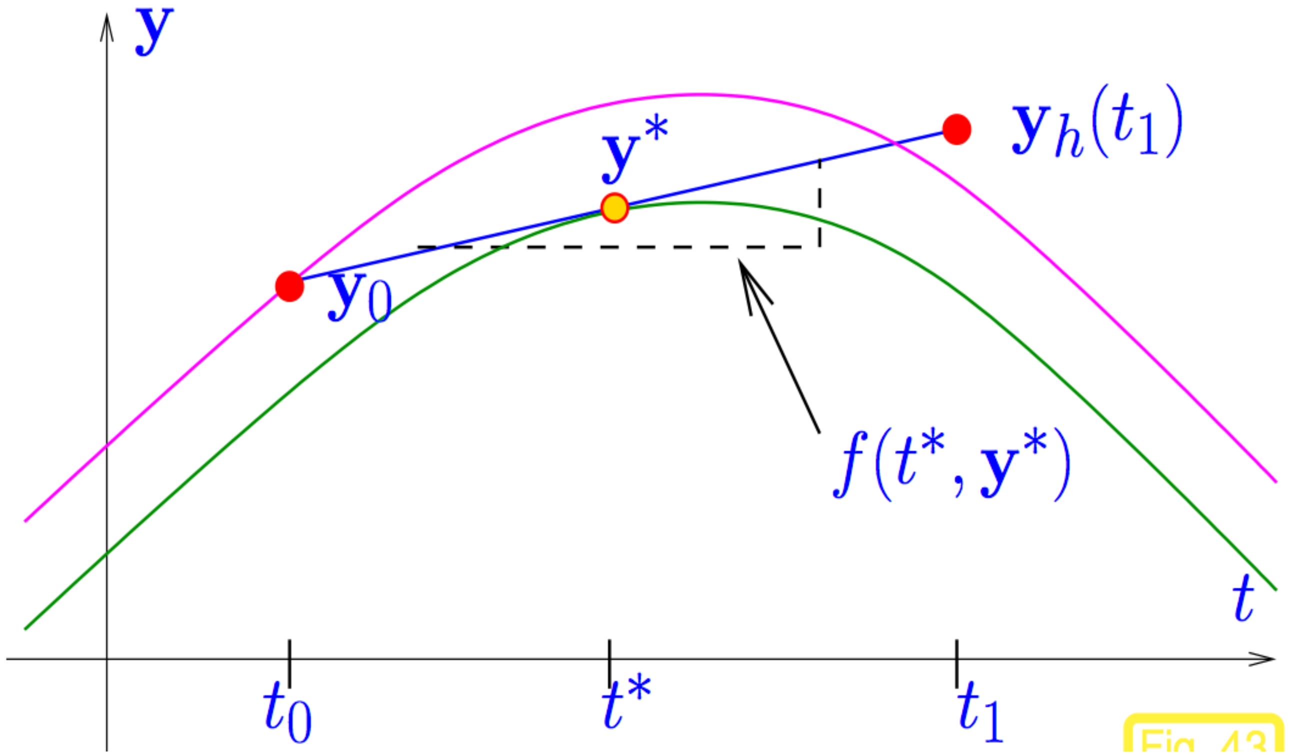
$$\boxed{y_1 = y_0 + hf(y_1)}$$

Zeitintegration Drehbewegung mit implizitem Eulerverfahren:



Drift: $y_h(t_i) \longrightarrow 0$ für $t_i := ih \longrightarrow \infty$

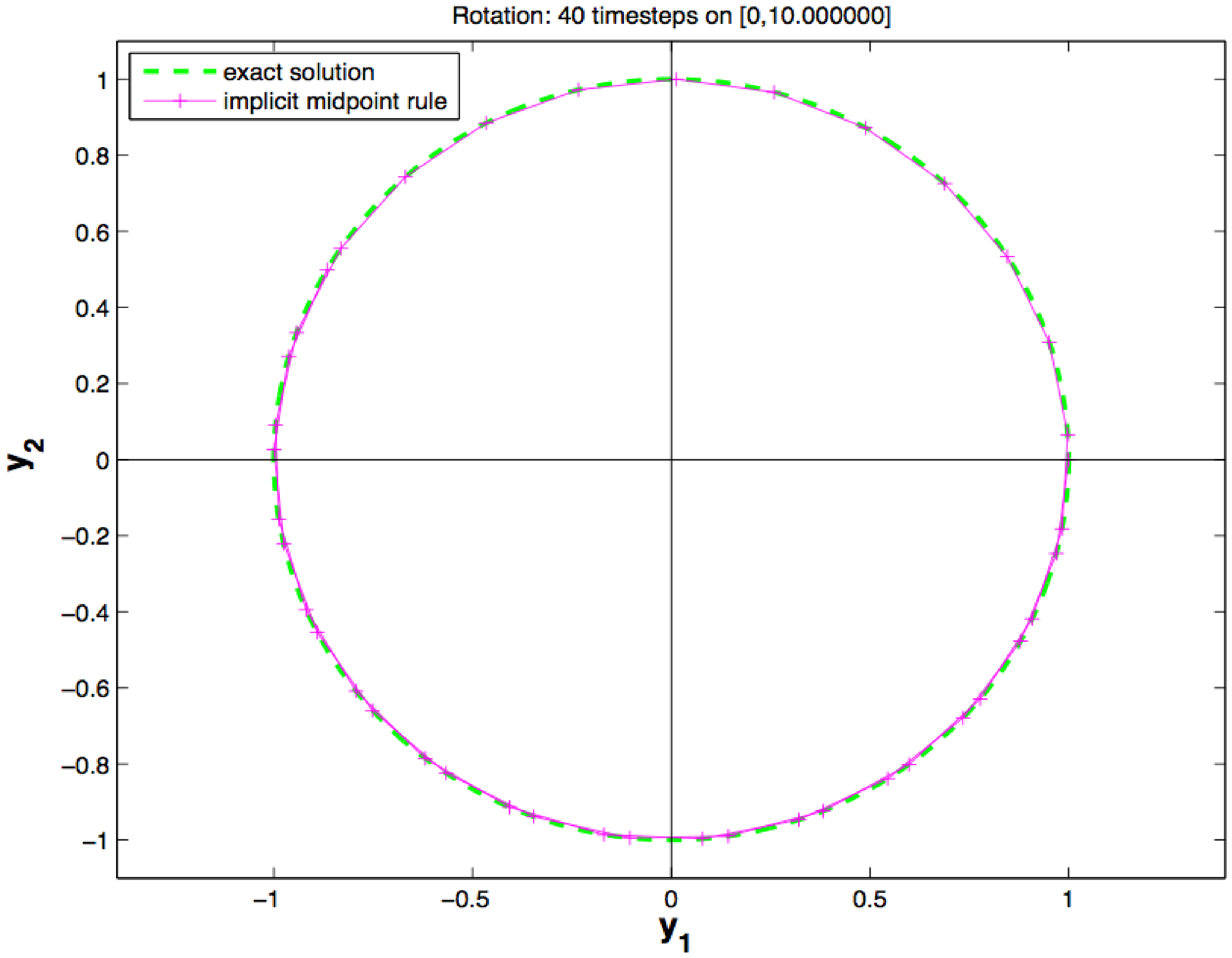
Idee: Kombiniere implizites Eulerverfahren und explizite Mittelpunktsregel



Implizite Mittelpunktsregel:

$$\boxed{y_1 = y_0 + h\, f\left(\frac{y_0 + y_1}{2}\right)}$$

Zeitintegration Drehbewegung mit impliziter Mittelpunktsregel



$\| y_h(t_i) \| = \| y_0 \|$ für alle i

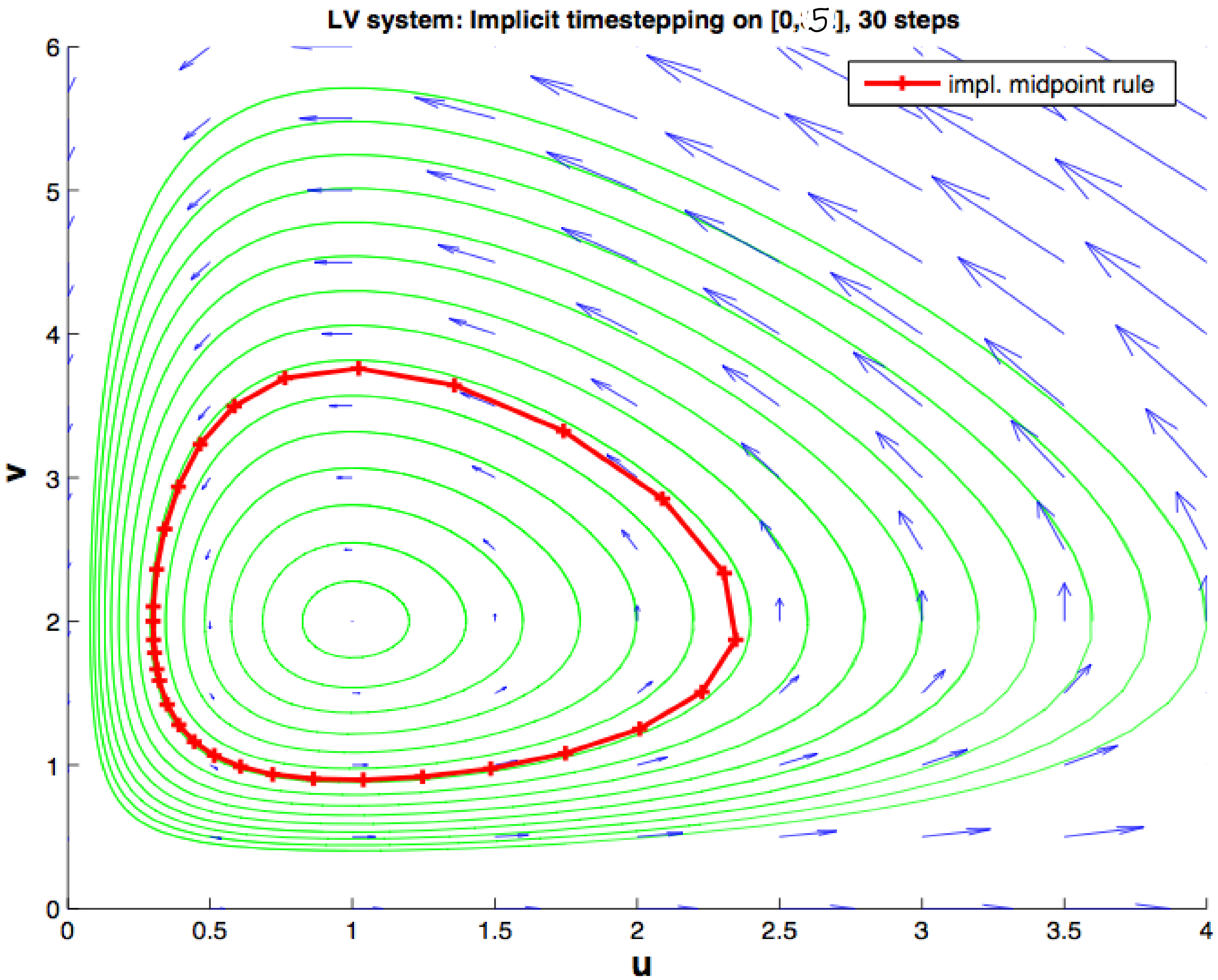
Satz: Die implizite Mittelpunktsregel erhält quadratische Invarianten

Q.I. $\Rightarrow$ $f(y)\cdot Ay = 0 \quad \forall y \qquad (*)$

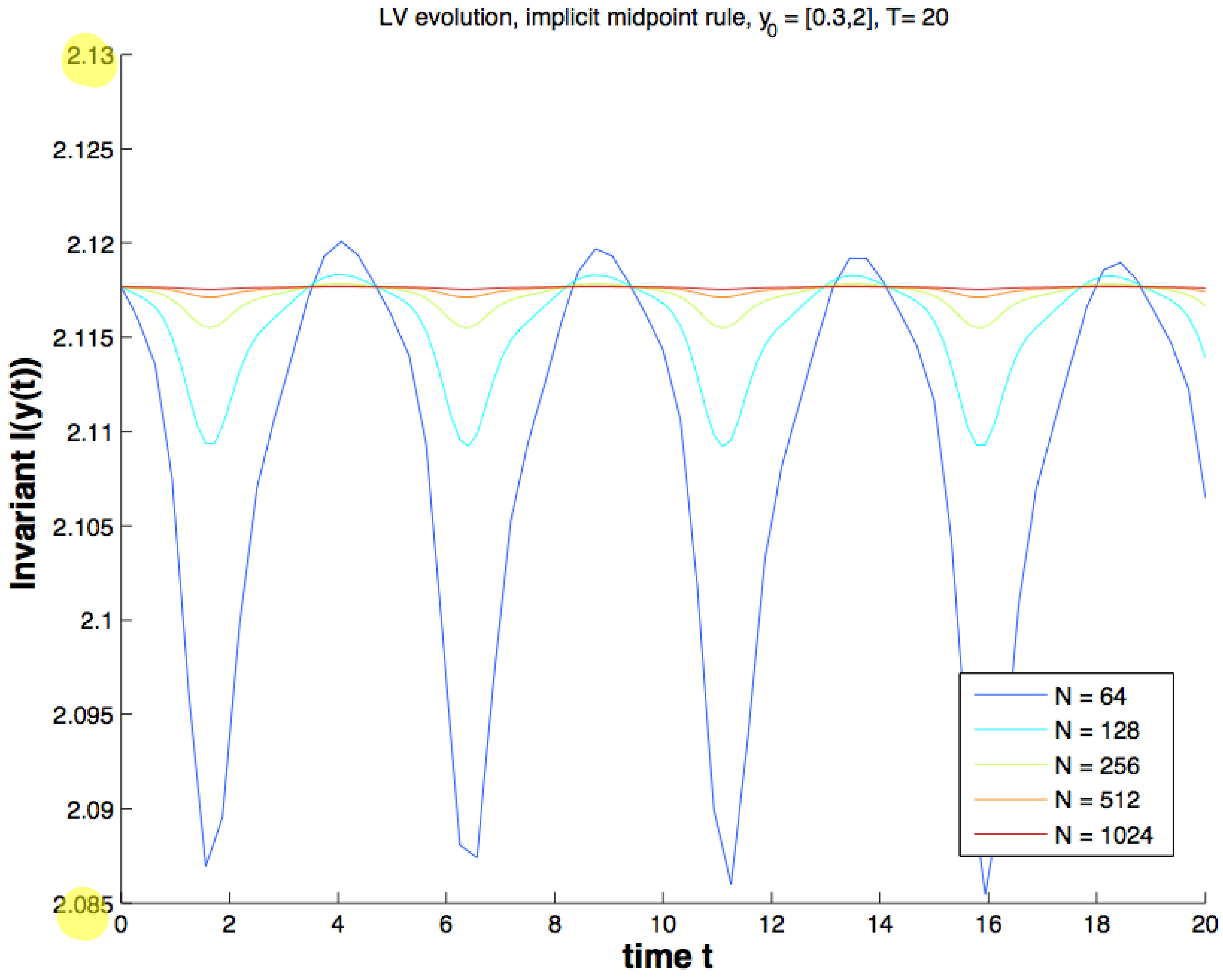
$$y_1 - y_0 = h\, f(\tfrac{1}{2}(y_1+y_0)) \qquad \Big|\cdot A(y_1+y_0)$$

$$y_1 \cdot Ay_1 - y_0 \cdot Ay_0 = \underbrace{2h\, f(y^*)\cdot Ay^*}_{\overset{(*)}{=}0}, \quad y^* := \tfrac{1}{2}(y_1+y_0)$$

Implizite Mittelpunktregel für LV-AWP:



Erhaltung der Invarianten:



Keine Drift

▷ $I(y_h(t_i))$ schwankt, aber Keine Drift

Implizite Mittelpunktregel für LV-AWP in MATLAB:

```
% Implizite Mittelpunksregel fuer Lotka-Volterra system

% Rechte Seite fuer LV Dgl.
f = @(x) [x(1)*(x(2)-2);x(2)*(1-x(1))];
% Anfangswertproblem
y = [0.3;2]; T = 20;
% Implizite Mittelpunksregel
N = 128; h = T/N;
for k=1:N
  % Loesen einer nichtlinearen Gleichung
  F = @(x) (x - h*f(y+0.5*x));
  [dy,Fval] = fsolve(F,h*f(y));
  y = y+dy;
end
```

V. Nichtexpansivität

$n=1$: $\dot y = f(y)$, $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ fallend

Zwei Lösungen : $t \to y(t)$, $t \to \tilde y(t)$

$$\frac{d}{dt}\tfrac12|y(t)-\tilde y(t)|^2 = (\dot y(t)-\dot{\tilde y}(t))(y(t)-\tilde y(t))$$
$$= (f(y(t))-f(\tilde y(t)))(y(t)-\tilde y(t))$$
$$\le 0$$

" Beliebige zwei Lösungen können nicht auseinanderlaufen "

Allgemein : $\dot y = f(y)$, $f: D\subset\mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$

mit $(f(\tilde y)-f(y))\cdot(\tilde y - y)\le 0 \quad \forall y,\tilde y\in D \qquad (*)$

Satz: Unter der Voraussetzung $(*)$ gilt für beliebige zwei Lösungen $y,\tilde y$ von $\dot y = f(y)$ auf $[0,T]$:

[nichtexpansiv] $\|y(t)-\tilde y(t)\| \le \|y(0)-\tilde y(0)\| \quad \forall t\in[0,T]$

Beispiel : " Kriechvorgänge "

Potential $V:\mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$ (glatt)

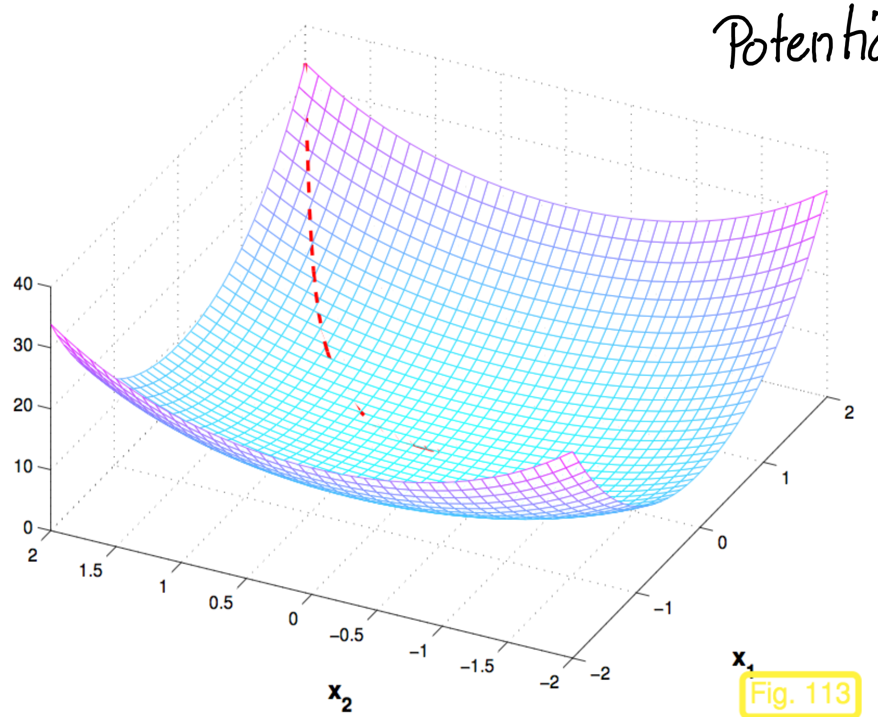


Fig. 113

Gradientenfluss-AWP:

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = -\,\mathbf{grad}\,V(\mathbf{y}(t)),\quad \mathbf{y}(0)=\mathbf{y}_0\in\mathbb{R}^n.$$

nichtexpansiv, wenn V konvex

Satz: Falls $(*)$, so gilt $\|y_1-\tilde y_1\| \le \|y_0-\tilde y_0\|$ für das implizite Eulerverfahren und die implizite Mittelpunktregel.

IEul.: $y_1 = y_0 + hf(y_1)$, $\tilde y_1 = \tilde y_0 + hf(\tilde y_1)$

$$\|\tilde y_0 - y_0\|^2 - \|\tilde y_1 - y_1\|^2 = (\tilde y_0 - y_0 + \tilde y_1 - y_1)\cdot(\tilde y_0 - y_0 - \tilde y_1 + y_1)$$
$$= (\tilde y_1 - hf(\tilde y_1) + y_1 + hf(y_1) + \tilde y_1 - y_1)(\cancel{\tilde y_1} - hf(\tilde y_1) - \cancel{y_1} + hf(y_1) - \cancel{\tilde y_1} + \cancel{y_1})$$
$$= \underbrace{2(\tilde y_1 - y_1)(-h(f(\tilde y_1) - f(y_1))}_{\ge 0 \ (*)} + h^2\|f(\tilde y_1) - f(y_1)\|^2 \ge 0$$

VI. Hamiltonsche Systeme

Bsp.: Mathematisches Pendel

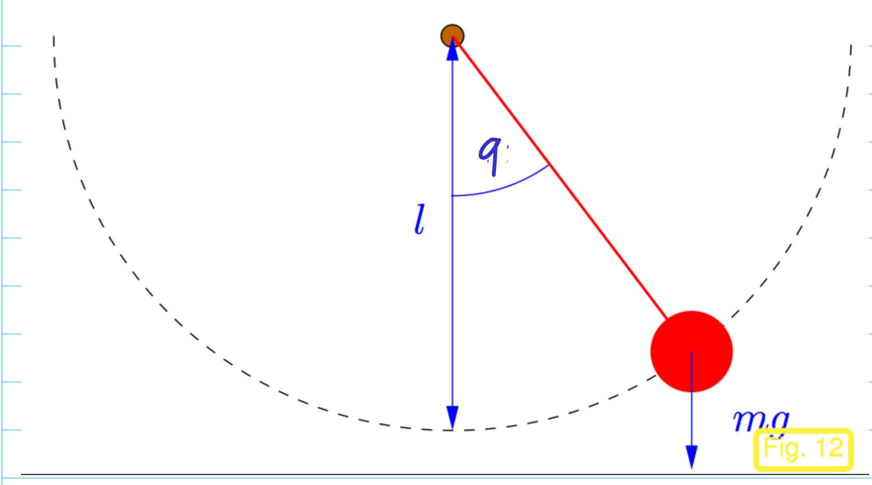


Fig. 12

Newtonsche Bewegungsgleichung:

$$\ddot{q}(t) = -\tfrac{g}{l}\sin q(t)$$

$$\Updownarrow \quad [p = \dot{q}]$$

$$\begin{cases} \dot{p}(t) = -\tfrac{g}{l}\sin q(t) \\ \dot{q}(t) = p(t) \end{cases}$$

Def: Autonomes Hamiltonsches System

$$\dot{p}(t) = -\nabla_q H(p(t), q(t))$$
$$\dot{q}(t) = \nabla_p H(p(t), q(t))$$

mit Hamilton-Funktion $H : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}$

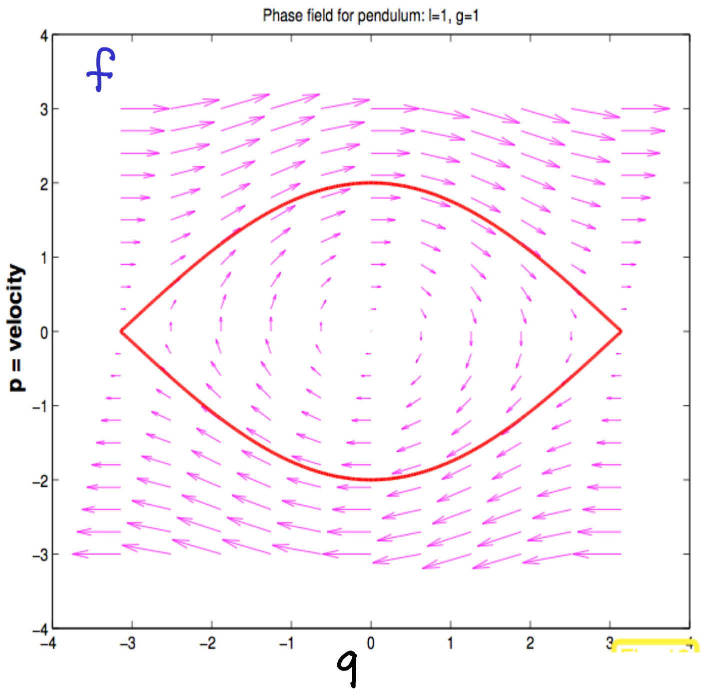
Pendel: $H(p,q) = \tfrac{1}{2}p^2 - \tfrac{g}{l}\cos q$

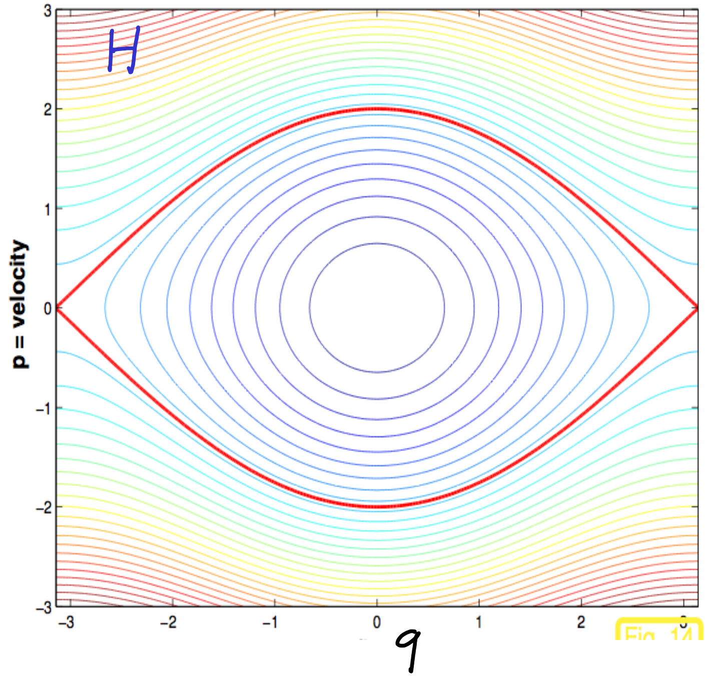
[Gesamtenergie]

Satz: $H(p,q)$ ist Invariante des Hamiltonschen Systems

Einschrittverfahren für Pendelgleichung

$$y = \begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} : \quad \dot{y} = \begin{bmatrix} -g/\ell \sin y_2 \\ y_1 \end{bmatrix} =: f(y)$$





Euler:

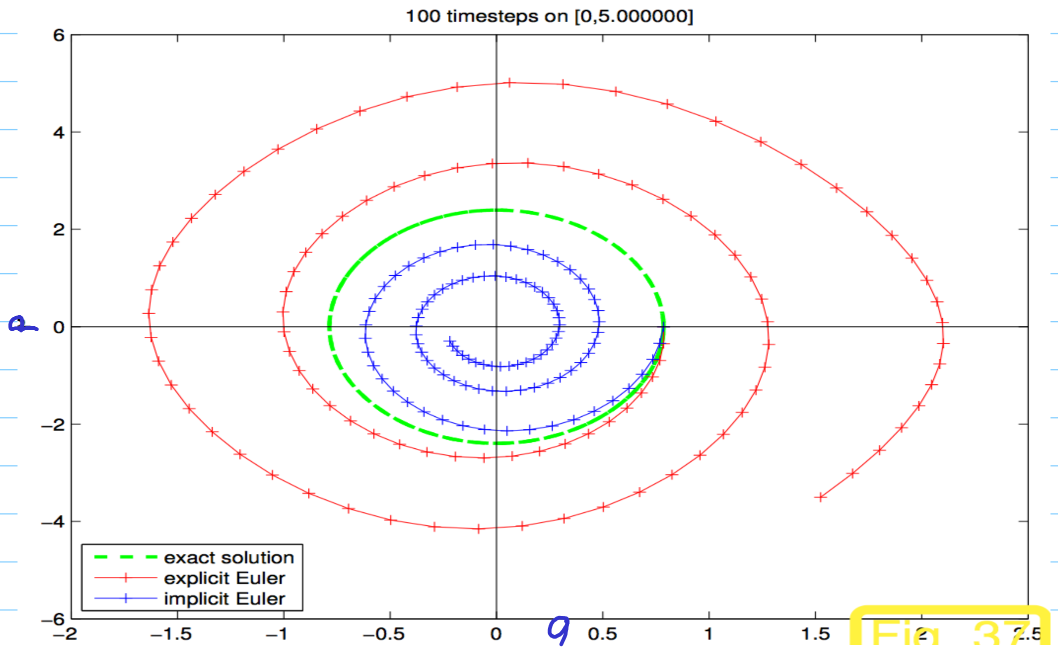
explizit :

" $\longrightarrow \infty$ "

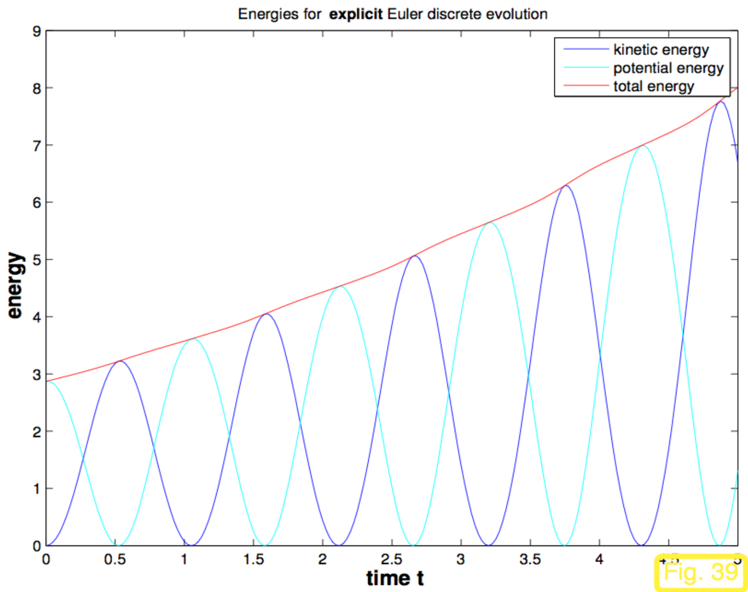
implizit :

" $\longrightarrow 0$ "

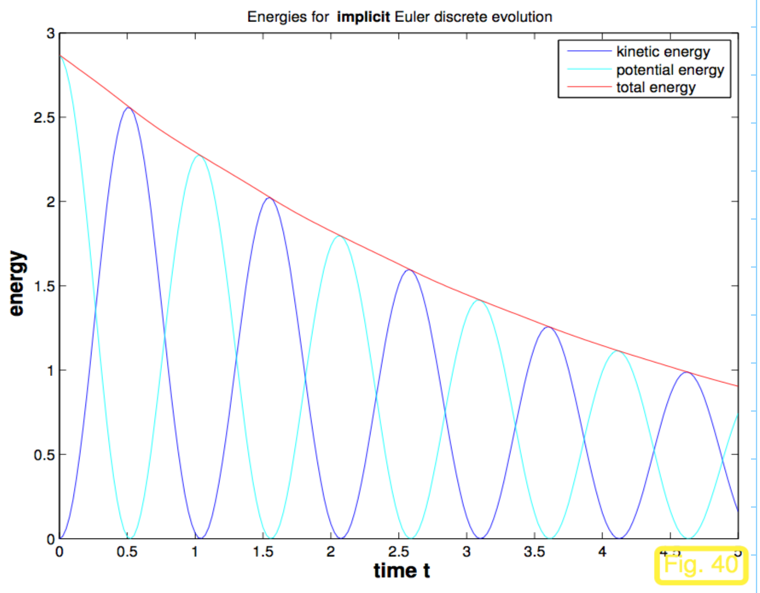
Energiedrift !



explizit



implizit



Implizite Mittelpunktregel:

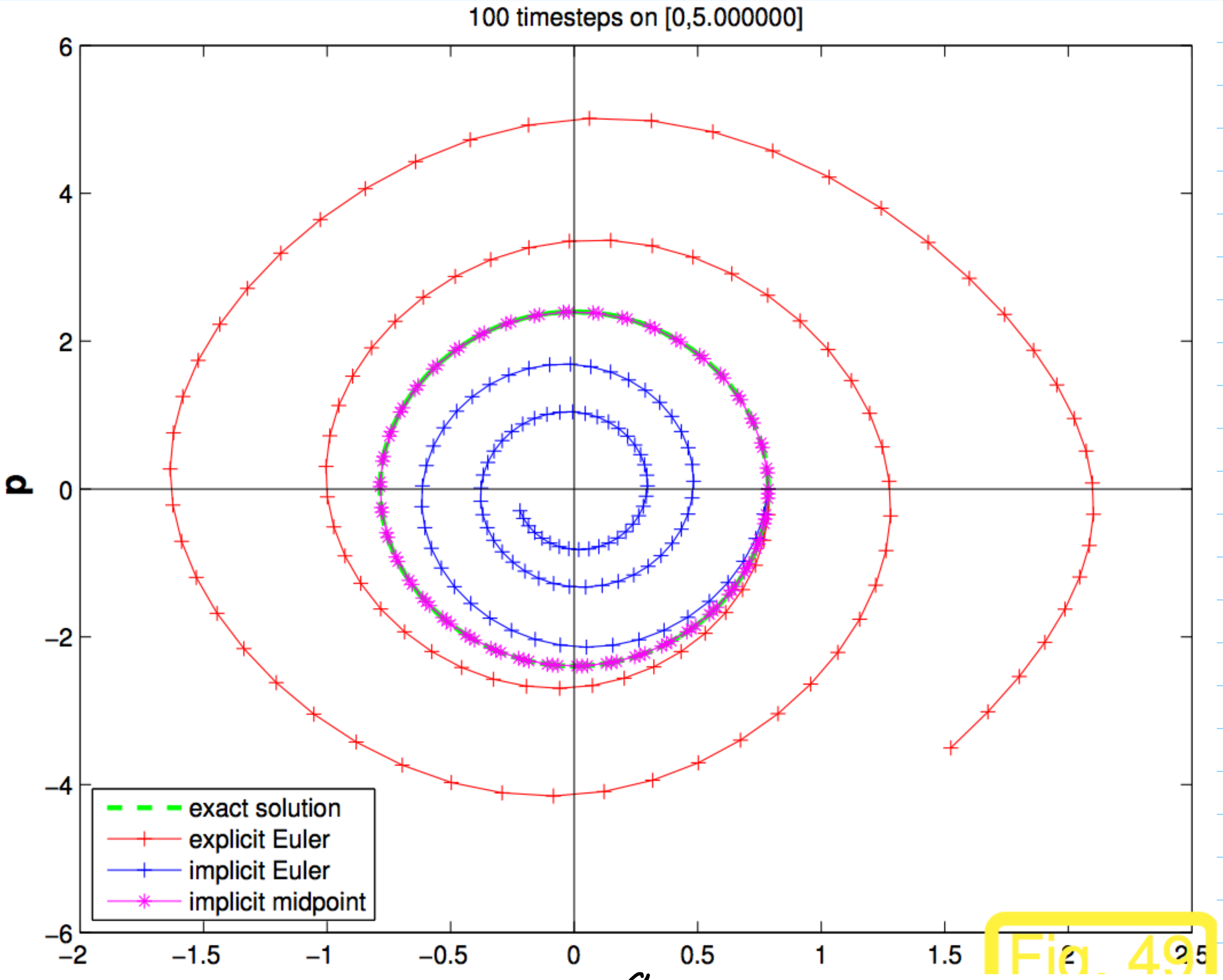


Fig. 49

→ Keine Energiedrift

Implizite Mittelpunktregel für Pendelgleichung:

Langzeitquasienergieerhaltung

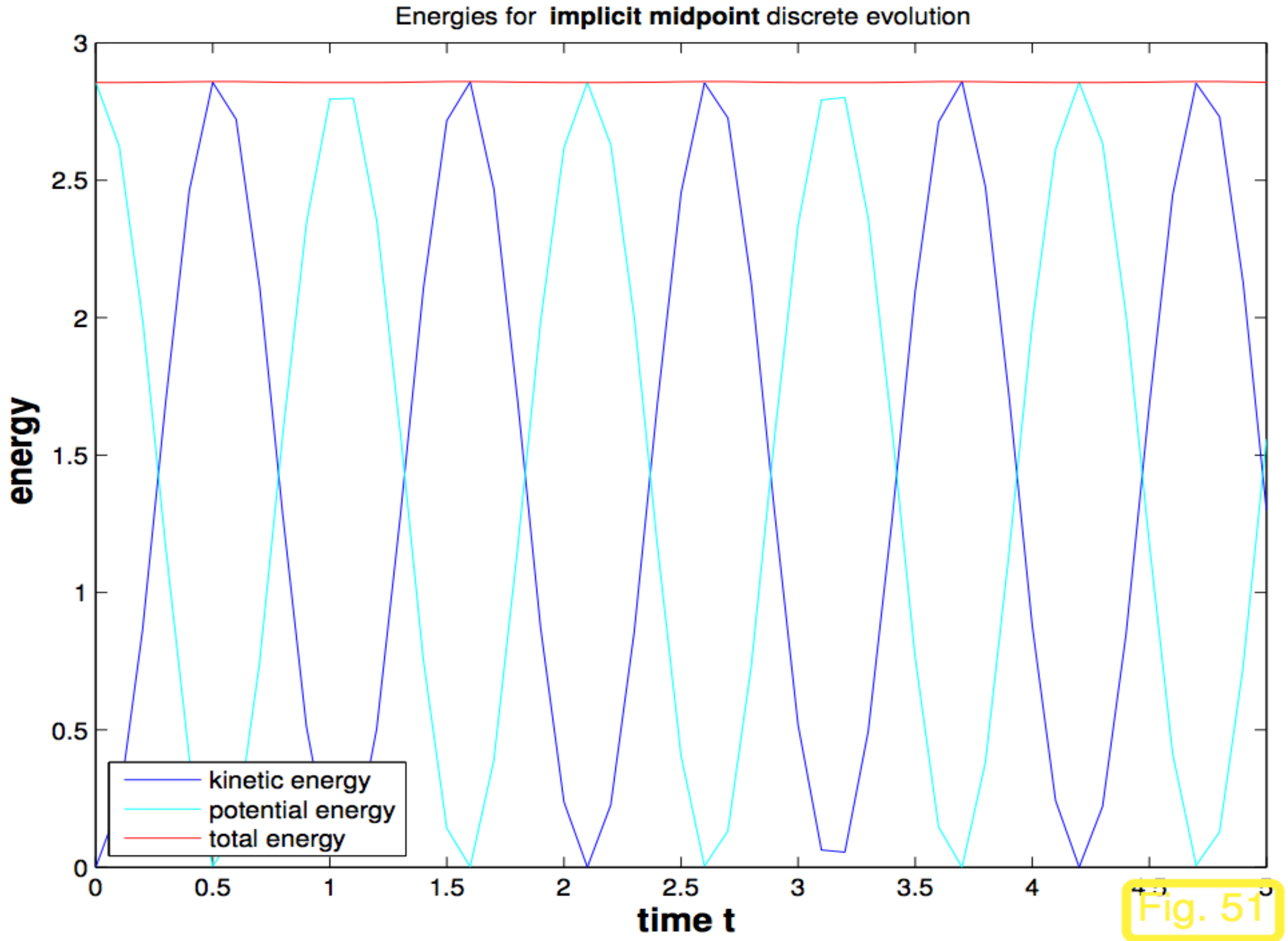


Fig. 51

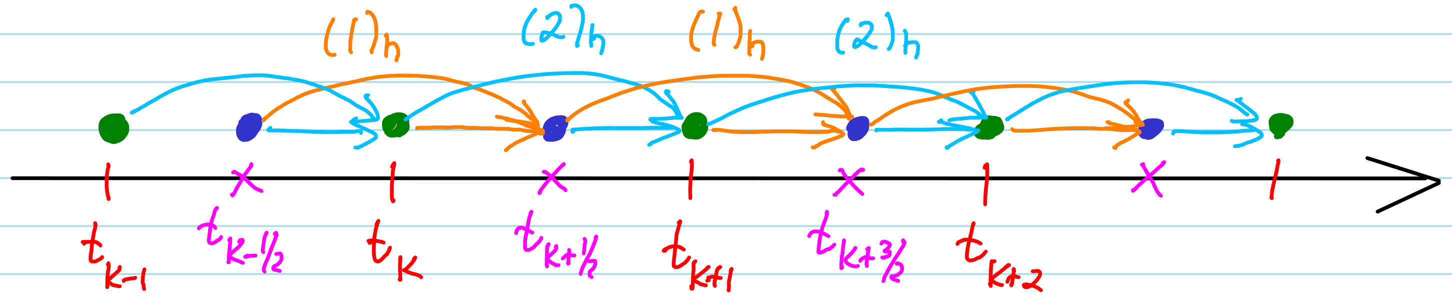
Störmer - Verlet - Verfahren

Pendelgleichung :

$$\dot{p} = -\tfrac{g}{l}\,\sin q \qquad (1)$$
$$\dot{q} = p \qquad (2)$$

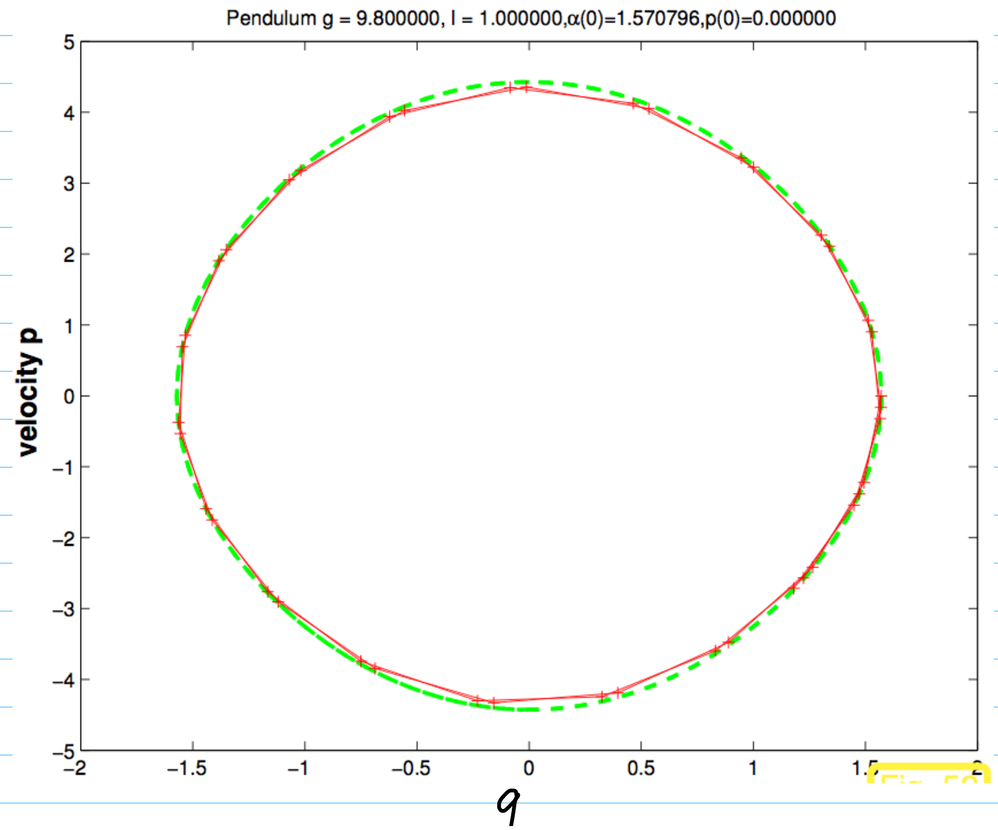
Idee : Zeitversetzte explizite Eulerschritte für (1) und (2) : "leapfrog"

$$p_{k+1/2} = p_{k-1/2} - h\,\tfrac{g}{l}\,\sin q_k \qquad (1)_h$$
$$q_{k+1} = q_k + h\,p_{k+1/2} \qquad (2)_h$$



explizit !

Störmer - Verlet - Zeitintegration für Pendelgleichung :



(fast) periodische Lösung (auch für lange Zeiten)

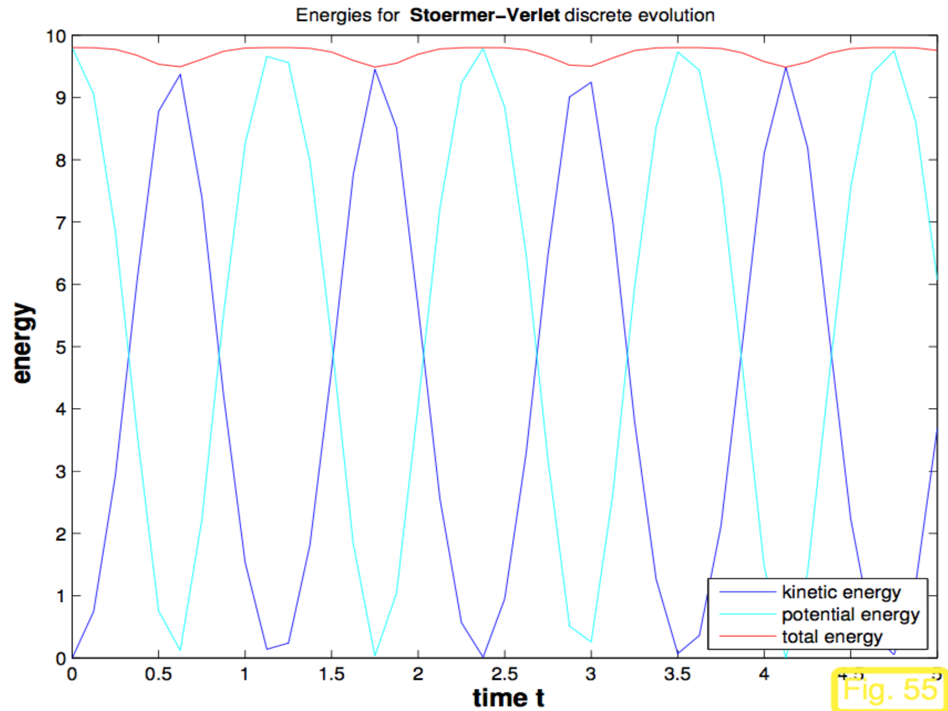


Fig. 55

Keine Energiedrift !

Störmer-Verlet & Implizite Mittelpunktsregel

= symplektische Integratoren

Theorie: Rückwärtsanalyse

Symplektische Integratoren für Hamiltonsche AWP liefern genaue Lösungen für Hamiltonsche AWPs mit leicht gestörter Hamiltonfunktion.

▷ qualitativ richtige numerische Lösungen

Beispiel: Federpendel

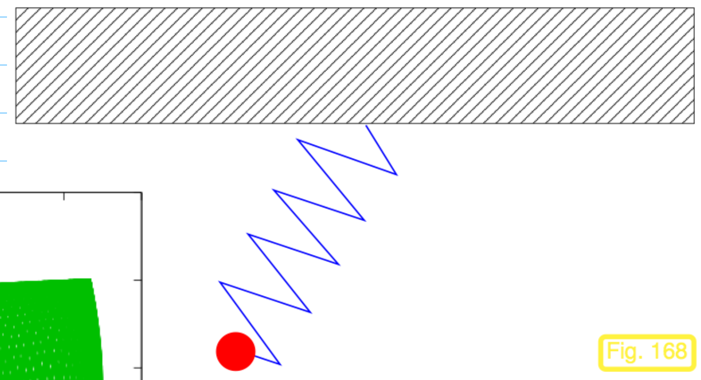


Fig. 168

$q \leftrightarrow$ Positionsvektor

chaotisches mechanisches System

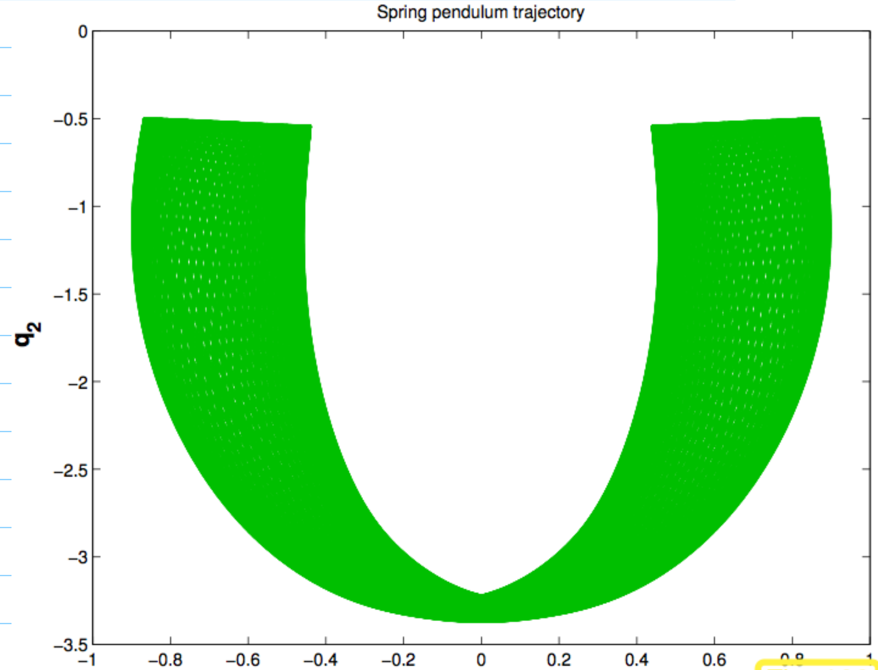


Fig. 169

Explizite Mittelpunktregel

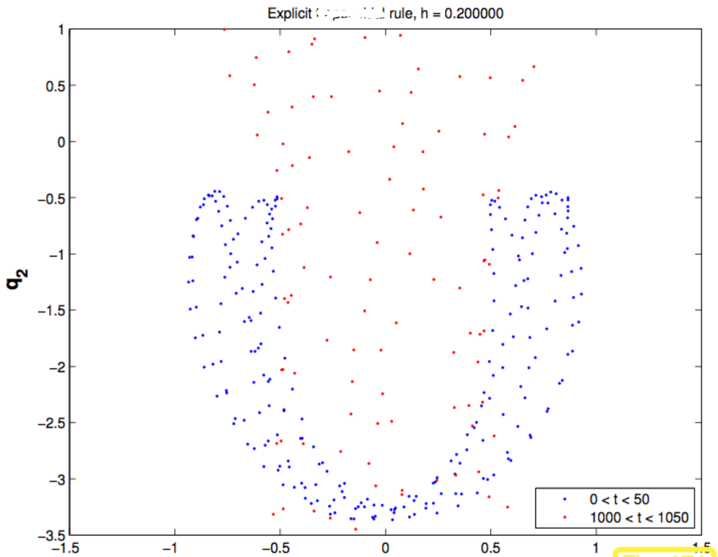


Fig. 171

Störmer Verlet

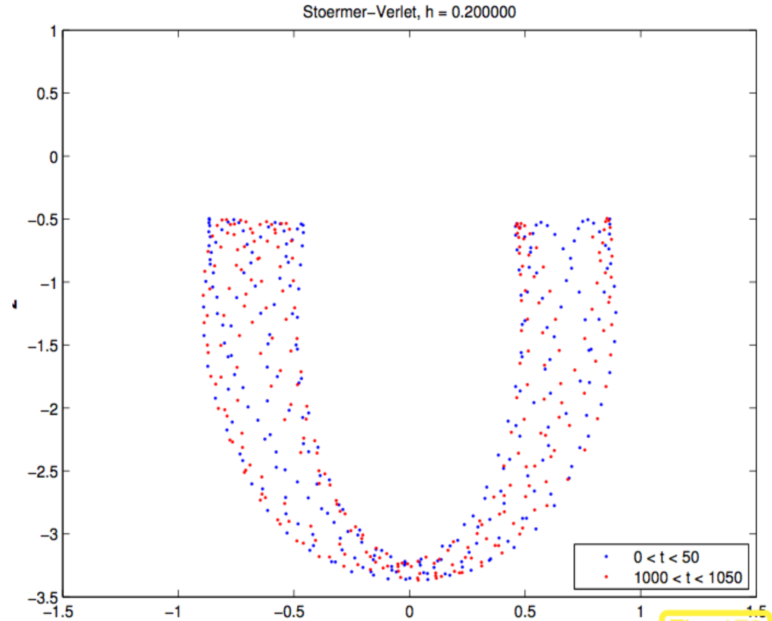


Fig. 170