Numerische Mathematik II

Dozent: Prof. Dr. Christian Rohde

Vorlesungsmitschrieb [1]
Stand April 20, 2014

Universitt Stuttgart, Wintersemester 2013/2014

[1]Webseite fuer dieses Dokument `https://github.com/jrapp/num2script`

Contents

I Gewöhnliche Differentialgleichungen: Ein Üeberblick

I.1 Grundlegende Defintionen

Füer $n \in \mathbb{N}$ sei der Zustandsraum $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^m$ gegeben. Weiter sei $f \in C^0(\mathbb{R} \times \mathcal{U})$. Außerdem wähle man ein $t_0 \in \mathbb{R}$ und ein Intervall $I \subseteq \mathbb{R}$ mit $t_0 \in I$.

Finde $u = (u_1, \dots, u_m)^T \in C^1(I)^m$ mit

$$u = u(t) \in \mathcal{U} fuer t \in I$$

und

$$u'(t) = f(t, u(t)) \tag{1.1}$$

$$u(t_0) = v_0 \tag{1.2}$$

(1.1) heißt m-dimensionales System geöhnlicher Differentialgleichungen (erster Ordnung). (1.1),(1.2) heißt gewöhnliche Anfangeswertproblem.

Definition 1.1 [Klassische Löesung]
Falls eine Funktion $u \in C^1(I)^m$ existiert, die (1.1), (1.2) erfüellt, heißt u klassische Löesung.

Bemerkung 1.2 [Spezielle Typen] (i) (1.1) heißt linear gdw. (1.1) von der Form

$$u'(t) = A(t)u(t) + b(t)(t \in \mathbb{R})$$

ist. Dabei sei $A = A(t) : \mathbb{R} \Rightarrow \mathbb{R}^{n \times m}$ und $b = b(t) : \mathbb{R} \Rightarrow \mathbb{R}^m$.

(ii) Die Gleichung (1.1) heißt autonom, falls

$$f(f, u) = f(u)$$

gilt.

I.2 Einige Beispiele aus der Modellierung

Beispiel 1.3 [Räumliche homogene chemisch aktive Mischung]
Sei $D \subseteq \mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$ offen beschrenkt. In D seien die Stoffe A, B, C räumlich homogen verteilt.

$a = a[A]$	Konzentration von A in $\dfrac{\text{Mol}}{\text{Volumen}}$
$b = b[B]$	B
$c = c[C]$	C

Bimollekulare Reaktion

$$1A + 1B \rightharpoonup 1C \tag{*}$$

Wir wollen ein quantitatives Modell für (*) herleiten. Gesucht sind

$$\begin{aligned} a &= a(x,t) = a(t) \quad \text{(räumliche Homogenität)} \\ b &= b(x,t) = b(t) \\ c &= c(x,t) = c(t) \end{aligned}$$

Für $t_0 = 0$ sind die Anfangskonzentrationen

$$a(0) = a_0 \geq 0, \quad b(0) = b_0 \geq 0, \quad c(0) = c_0 \geq 0$$

gegeben. Wähle

$$u = (a,b,c) \in U, U = [0, \inf)^3$$

Es sei $\Delta t > 0$ und $t \in [0, \inf)$

$$\begin{aligned} a(t+\Delta t) &= a(t) + \text{Reaktionsverlust/-gewinn in}(t, t+\Delta t) \\ &= a(t) \int_t^{t+\Delta t} R_A(s) \mathrm{d}s \end{aligned}$$

Dabei sei $R_A(t)$ der Reaktionsverlusst/-gewinn zum Zeitpunkt t.
Konstituive Annahme:

$$R_A(t) = - \underbrace{k}_{Reaktionsgeschwindichkeit, >0} a(t)b(t)$$

Also:

$$a(t+\Delta t) = a(t) - \int_t^{t+\Delta t} ka(s)b(s)\mathrm{d}s$$

Regularitätsannahme:

$$a,b,c \in C^1([0, \inf))$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} & & a(t+\Delta t) &= a(t) - \Delta t k a(t)b(t) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \\ &\Leftrightarrow & \frac{a(t+\Delta t) - a(t)}{\Delta t} &= -ka(t)b(t) + \mathcal{O}(\Delta t) \\ &\overset{\Delta t \to 0}{\Longrightarrow} & a'(t) &= -ka(t) + b(t) \end{aligned} \tag{**1}$$

Mit derselben Argumentation gilt

$$\begin{aligned} b'(t) &= -ka(t)b(t) \\ c'(t) &= +ka(t)b(t) \end{aligned} \tag{**}$$

Wie kann man (**) löesen ?
Füer $S = a - b$ gilt gerade

$$\begin{aligned} S'(t) &= a'(t) - b'(t) & &= 0 \\ \Rightarrow S(t) &= a(t) - b(t) & &=: S_0 \end{aligned}$$

Auswertung bei $t = 0$ liefert

$$S_0 = a_0 - b_0 \Leftarrow b(t) = a(t) - S_0$$

Sei o.B.d.A. $S_0 \leq 0 (S_0 < 0$ analog). Dann gilt

$$a'(t) = -ka(t)(a(t) - S_0) \overset{T.d.V.^2}{\Longrightarrow} a(t) = \frac{a_0 S_0}{a_0 - b_0 e^{-ks_0 t}} \Rightarrow b(t) = \frac{a_0 S_0}{a_0 - b_0 e^{-ks_0 t}} - S_0$$

Außerdem

$$\begin{aligned}
c(t) &= c_0 + k\int_0^t a(s)b(s)\mathrm{d}s \\
&= c_0 + \int_0^t -b'(t)\mathrm{d}s \\
&= c_0 - b(t) + b_0 \\
&= c_0 + b_0 - b(t)
\end{aligned}$$

Fig 1

Beispiel 1.4 [CO-Oxidation Platin/Katalyse]

$$\begin{aligned}
O_2 + Pt + Pt &\underset{K_{-1}}{\overset{K_1}{\rightleftharpoons}} PtO + PtO \\
CO + Pt &\rightleftharpoons [K_{-2}]K_2 PtCO \\
PtCo + PtO &\overset{K_3}{\leftharpoonup} Pt + Pt + CO_2 \\
CO + Pt &\underset{K_{-4}}{\overset{K_4}{\rightleftharpoons}} \qquad \underbrace{[PtCO]}_{\text{Chemisch inaktive Variante}}
\end{aligned}$$

$k_1, k_{-1}, k_2, k_{-2}, k_3, k_4, k_{-4} > 0$
Konzentration: ($\in [0,1]$)

$$\begin{aligned}
PtO &: x & CO_2 &: 1 \\
PtCO &: y & CO &: 1 \\
[PtCO] &: s & O2 &: 1 \\
Pt &: z
\end{aligned}$$

PtO und PtCO werden ständig nachgefüehrt (sind in beliebiger konzentration vorhanden)

$$\begin{aligned}
x'(t) &= k_1 zz + k_1 1zz \\
&\quad - k_{-1}xx - L_1 xx \\
&\quad - k_3 xx \\
&= 2k_1 z^2 - 2k_{-1}x^2 - k_3 xy \\
y'(t) &= k_2 1z - k_{-2}y - k_3 yx \\
z'(t) &= -2k_1 z^2 1 + 2k_{-1}x^2 - k_1 1z + k_{-2}y \\
&\quad + 2k_3 xy - k_4 z1 + k_{-4}s \\
s'(t) &= k_4 z - k_{-4}s
\end{aligned}$$

Dieses System ist wahlscheinlich nicht eakt löesbar. Es gilt jedoch noch die globale Invariante

$$x'(t) + y'(t) + s'(t) + z'(t) = 0 \forall_{t>0}$$

Beispiel 1.5 [Verbreitung von Gerüchte]
Sei eine (menschliche) Population der gröeße $N \in \mathbb{N}$ gegeben.

Gesucht: Anzahl der Menschen $Z = Z(t) \in \mathcal{U} := [0, N]$, die zum Zeitpunkt $t \geq 0$ eine bestimmte Nachricht kennen.
Kommunikationsmodell:

(i) Zum Zeitpunkt $t_0 = 0$ kennen $z_0 \geq 0$ Menschen die Nachricht.

(ii) Die Nachricht wird nur duch Gespräche "unter vier Augen" weitergegeben (Nachricht = Gerüechte).

(iii) Jeder Informierte hat in der Zeitspanne $\Delta t > 0$ genau $k\Delta t$ Vier-Augen-Kontakte mit anderen Menschen (Informierte und nicht-Informierte)

Falls wir mit $q(t) \in [0, 1]$ den Anteil der Nichtinformierten bezeichnen, gilt

$$q(t)N = N - Z(t) \tag{*}$$

Da die Zuname von Z im Zentrum Δt kann man durch

$$\begin{aligned}
Z(t + \Delta t) &= Z(t) + qk\Delta t Z(t) \\
&\overset{(*)}{=} Z(t) + k\Delta t \frac{N - Z(t)}{N} Z(t)
\end{aligned}$$

beschreiben.

Mit der Annahme $Z \in C^1([0, \inf], \mathcal{U})$ gilt im Limes $\Delta t \to 0$ das gewöhnliche AWP

$$Z'(t) = k\frac{N - Z(t)}{N} Z(t), Z(0) = Z_0 \tag{**}$$

Fig 2: Langzeitverhalten von Z(t)

Wie kann man (**) numerisch Löesen? Auf der Basis des diskreten Modells kann man den Algorithmus

$$\begin{aligned} Z^{n+1} &= Z^n + \Delta t k \frac{N - Z^n}{N} Z^n, \quad (N \in \mathbb{N}) \\ Z^0 &= Z_0 \end{aligned}$$

konstruieren. Dabei ist Z^n eine Approximation $Z(n\Delta t)$

Beispiel 1.6 [Bewegunsgleichungen]
Fuer $N \in \mathbb{N}$ betrachten wir die d-dimesionale Bewegung von Masseteilchen $p_i (i = 1, \ldots, N)$ mit Masse $m_i > 0$ Anwendungen: z.B. die Dynamik von Planeten, Sandköernern oder die Moleküldynamik. Gesucht: Position $x_i = x_i(t) \in \mathbb{R}^d, i = 1, \ldots, N$ des Masseteilchen p_i zum Zeitpunkt $t > 0$

Wir schränken uns auf Bewegungen ein, die unter Einfluss einens Potentialfelds $V : \mathbb{R}^{dN} \leftarrow \mathbb{R}$ stattfinden. Falls das Potentialfeld duch ein Gravitationsfeld gegeben ist, gilt z.B.

$$V(x_1, \ldots, x_N) = \sum_{j \neq k, (j,k)=1,\ldots,N} \frac{m_j m_k}{||x_j - x_k||_2}$$

nach dem Newtischen Gesetz gilt dann

$$m_i x_i''(t) = -\frac{\partial V}{\partial x_i}(x_1(t), \ldots, x_N(t))$$

Daher ist

$$\frac{\partial}{\partial x_i} V(x_1, \ldots, x_N) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_i 1} V(x_1, \ldots, x_N) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_i d} V(x_1, \ldots, x_N) \end{pmatrix}$$

Füer das Gravitationspotenzial gilt peziell

$$m x_i'')t) = m_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} \frac{m_j}{|x_i(t) - x_j(t)|_2^3} (x_i(t) - x_j(t))$$

Zum Zeitpunkt $t = 0$ sind die Anfangspositionen- und -geschwindichkeiten durch

$$x_i(0)x_i^0 \in \mathbb{R}^a, x_i^0(0) = v_i^0 \in \mathbb{R}^a$$

Dabei sein $x_1^0, \dots, x_n^0$ paarweise verschieden.

Wir schreiben dieses AWP (zweiter Ordnung) in erin $(2dN)$ – dimensionales System erster Ordnung um. Deibei sei

$$u(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_{2N}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_1'(t) \\ x_2(t) \\ x_2' \\ \vdots \\ u_{2N}(t) \end{pmatrix}$$

Damit erhalten wir füer u das AWP

$$u'(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ \frac{-1}{m_1}\frac{\partial}{\partial x_1} V(u_1(t), u_3(t), \dots, u_{2N-1}(t)) \\ u_4(t) \\ \vdots \\ \frac{-1}{m_N}\frac{\partial}{\partial x_N} V(u_1(t), u_3(t), \dots, u_{2N-1}(t)) \end{pmatrix} \qquad (*)$$
$$u(0) = (x_2^0, v_1^0, x_2^0, \dots, v_2^0)^T$$

Damit ist gerade

$$\mathcal{U} = \{(x_1, v_1, \dots, x_N, v_N) \in \mathbb{R}^{2dN} | x_1, \dots, x_N \text{ paarwerise verschieden}\}$$

Im Graviationsfall sollte (*) eine klassische Löessung auf $I = [0, \infty]$ besitzen (, wenn die physikalische Realitäte korret beschreibt).
Füer (*) ist die “natüerliche” Energie gerade

$$\begin{aligned} E(t) &= \text{kinetische Energie} + \text{Potentialenergie} \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i(x_i'(t))^2 + V(x_1(t), \dots, x_N(t)) \end{aligned}$$

Wir multiplizieren das Newtonsche Kraftgesetz mit $x_i(t)$

$$\begin{aligned} m_i \underbrace{x_i''(t)x_i'(t)}_{} &= (\frac{x_i'(t)^2}{2})' = -x_i'(t)\frac{\partial}{\partial x_i}V(x_1(t), \dots, x_1(t)) \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N} m_i(\frac{(x_i'(t))^2}{2})' &= -\sum_{i=1}^{N} x_i'(t)\frac{\partial}{\partial x_i}V(x_1(t), \dots, x_N(t)) \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^{N}(m_i(\frac{(x_i'(t))^2}{2})' + V(x_1(t), \dots, x_1(t))' &= 0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E(t) = 0 \end{aligned}$$

Falls eine klassische Löesung in $[0, \infty]$ existiert, haben wir

$$E(t) = E(0) = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2} m_i(v_i^0)^2 + V(x_1^0, \dots, x_N^0)$$

E ist also eine globale Invariante!

□

Beispiel 1.7 [Löessungsintervalle]
Sei $m = 1$ und $u_0 = 0$. Füer $a \in \mathbb{R}$ betrachtet das AWP

$$u'(t) = U(t)^2 + a, \quad (t \in I)$$
$$u(0) = U_0 = 0$$

(a) $a = 0 \Rightarrow u(t) = 0$ auf $I = \mathbb{R}$

(b) $a < 0 \Rightarrow u = u(t) = -\sqrt{-a}\tanh(\sqrt{-1}t)$ auf $I = \mathbb{R}$

(c) $a > 0 \Rightarrow u = u(t) = \sqrt{a}\tan(\sqrt{a}t)$ auf $I = (-\frac{\pi}{2\sqrt{a}}, \frac{\pi}{2\sqrt{a}}) \subsetneq \mathbb{R}$

Beispiel 1.8 [Eindeutigkeit]
Sei $m = 1, a_0 = 0$. Betrachte das AWP

$$u'(t) = \sqrt{u(t)}, u(0) = 0$$

Es existiert die Löesungen

$$u_1(t) = 0, \quad u_2(t) = \frac{t^2}{u}, \quad u_3(t) = \begin{cases} 0, t < 0 \\ \frac{t^2}{4}, t \geq 0 \end{cases}$$

auf ganz $\mathbb{R}$

□

Füer einen Zusandsraum $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^m, u_0 \in \mathcal{U}, t_0 \in \mathbb{R}$ betrachen wir (1.1),(1.2), d.h.

$$u'(t) = f(t, U(t)), u(0) = u_0$$

Dann gilt

Satz 1.9 [Picard-Lindelöef]
Sei $a > 0$ und weiter $b \geq 0$ so gewäwhlt, dass $\overline{B_b(u_0)} \subset \mathcal{U}$ gilt. Außerdem sei $L = L(a, b, u_0) > 0$ eine Konstante, sodass alle $t \in [t_0 - a, t_0 + a]$ und alle $w, \tilde{w} \in \overline{B_b(u_0)}$ gerade

$$|f(t, w) - f(t, \tilde{w})| \leq L|w - \tilde{w}|$$

gildt (Lipschitz-Stetigkeit in $[t_0 - a, t_0 + a] \times \overline{B_b(u_0)}$) Dann haben wir

(i) Es existiert eine Zahl $\alpha \in (0, a], sodass (1.1)(1.2)$ eine Löesung $u \in C^1(t_0 - a, t_0 + a, \mathcal{U})$ besitzt

(ii) Es existiert genau eine Löesung von (1.1),(1.2) in $t_0 - a, t_0 + a$

(iii) Füer α in (i),(ii) gilt in Falle $\mathcal{U} = \mathbb{R}^m$,

$$\alpha = \min a, \frac{b}{A}, \quad A := \max_{\substack{t \in [t_0 - a, t_0 + a] \\ w \in \overline{B_b(u_0)}}}$$

gilt