MATHEMATISCHES INSTITUT

PROF. DR. CHRISTIANE HELZEL
DAVID KERKMANN

10. JULI 2017

HEINRICH HEINE
UNIVERSITÄT DÜSSELDORF

Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen – 11. Übungsblatt

Aufgabe 39: Untersuchen Sie die folgenden linearen MSV auf Konvergenz.

(a) $U^{n+2} = \frac{1}{2}U^{n+1} + \frac{1}{2}U^n + 2kf(U^{n+1})$

(b) $U^{n+1} = U^n$

(c) $U^{n+4} = U^n + \frac{4}{3}k(f(U^{n+3}) + f(U^{n+2}) + f(U^{n+1}))$

(d) $U^{n+3} = -U^{n+2} + U^{n+1} + U^n + 2k(f(U^{n+2}) + f(U^{n+1}))$.

Aufgabe 40: Zeigen Sie, dass das Gebiet absoluter Stabilität für die Mittelpunktregel

$$U^{n+1} = U^{n-1} + 2kf(U^n)$$

das offene Intervall $(-i, i)$ ist.

Aufgabe 41: Beweisen Sie Lemma 5.8 der Vorlesung!

Hinweis: Sei λ Nullstelle von $\rho(\zeta)$, dann ist $(\lambda^{r-1}, \lambda^{r-2}, \ldots, 1)$ Eigenvektor der Matrix A zum Eigenwert λ. D.h. die Eigenwerte von A sind Nullstellen von $\rho(\zeta)$ und erfüllen die Wurzelbedingung.

Transformation in Jordansche Normalform liefert:

$$T^{-1}AT = J = \operatorname{diag}\left(\lambda_1, \ldots, \lambda_l, \begin{pmatrix} \lambda_{l+1} & \varepsilon_{l+1} & & \\ & & \ddots & \varepsilon_{r-1} \\ & & & \lambda_r \end{pmatrix}\right),$$

wobei $\lambda_1, \ldots, \lambda_l$ einfache Eigenwerte mit Betrag 1 sind. Es gilt $\|J \otimes Id\|_\infty \leq 1$.

Unter Verwendung der Transformation T definieren wir die Vektornorm

$\|x\| := \|(T^{-1} \otimes Id)x\|_\infty$, $T \in \mathbb{R}^{r\times r}$, $Id \in \mathbb{R}^{s\times s}$.

Aufgabe 42: Betrachten Sie die gewöhnliche Differentialgleichung

$$u'(t) = \lambda\,(u(t) - \cos(t)) - \sin(t) \tag{1}$$

mit Anfangswert $u(0) = 1.5$ und $\lambda = -10^6$. Die exakte Lösung lautet:

$$u(t) = \frac{1}{2}e^{\lambda t} + \cos(t) \tag{2}$$

(a) Verwenden Sie das explizite Euler-Verfahren, um die Lösung bis zum Zeitpunkt $T = 3$ zu bestimmen. Welche ungefähre maximale Schrittweite können Sie wählen, damit das Verfahren stabil bleibt?

(b) Verwenden Sie nun das implizite Euler-Verfahren sowie die Trapezregel. Was stellen Sie fest? Begründen Sie Ihre Beobachtungen.

(c) Das TR-BDF2 Verfahren lautet:

$$\begin{aligned} U^* &= U^n + \frac{k}{4}(f(U^n) + f(U^*)), \\ U^{n+1} &= \frac{1}{3}(4U^* - U^n + kf(U^{n+1})). \end{aligned} \tag{3}$$

Implementieren Sie auch dieses Verfahren. Was ist der Vorteil gegenüber dem impliziten Euler-Verfahren?

Aufgabe 43: Wir betrachten zunächst den Reaktionsmechanismus

$$A \xrightarrow{K_1} B \xrightarrow{K_2} C. \tag{4}$$

Dieser Reaktionsmechanismus wird durch das lineare System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} u_1'(t) &= -K_1 u_1(t) \\ u_2'(t) &= K_1 u_1(t) - K_2 u_2(t) \\ u_3'(t) &= K_2 u_2(t) \end{aligned}$$

modelliert. Dabei bezeichnet $u_1 = [A]$ die Konzentration der Spezies A, und $u_2 = [B]$, $u_3 = [C]$ die Konzentrationen von B und C.

Das File `decay1.m` approximiert diese lineare System für $K_1 = 1$, $K_2 = 2$ mit Anfangsdaten $u_1(0) = 1$, $u_2(0) = 0$, $u_3(0) = 0$.

(a) Verwenden Sie `decaytest.m` (*http://faculty.washington.edu/rjl/fdmbook/matlab/*) um festzustellen, wieviele Funktionsauswertungen für die vier verschiedene im Programm verwendeten Fehlertoleranzen benötigt werden.

(b) Betrachten Sie nun den Reaktionsmechanismus

$$A \xrightarrow{K_1} D \xrightarrow{K_3} B \xrightarrow{K_2} C.$$

Modifizieren Sie `decay1.m` um diesen Reaktionsmechanismus zu approximieren. Setzen Sie dazu $u_4 = [D]$ und verwenden Sie $u_4(0) = 0$. Testen Sie Ihr Programm für $K_3 = 3$.

(c) Für $K_3 \gg K_1, K_2$ erwarten wir, dass die Lösungskurven für u_1, u_2, u_3 den Lösungskurven aus (a) ähneln. Warum?

(d) Testen Sie ode113 mit $K_3 = 1000$ und den in `decaytest.m` angegebenen Toleranzen. Sie sollten dabei die folgenden Beobachtungen machen:

   (i) Die Zahl der Funktionsauswertungen ist viel größer als bei der Approximation von (1) (vergl. mit Teil (a)), obwohl die Lösungen nahezu identisch sind.

   (ii) Die Anzahl der Funktionsauswertungen verändert sich kaum wenn man die Toleranz reduziert.

   Begründen Sie diese Beobachtungen.

(e) Zeichnen Sie die Lösungen für Teil (d) mit tol=1e-2 und tol=1e-4.

(f) Testen Sie Ihr Programm für verschiedene Werte von K_3 ($K_3 = 500$, 1000 und 2000) und tol = 1e-6. Sie sollten dabei beobachten, dass die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen linear mit K_3 anwächst. Begünden Sie, warum man dieses Verhalten erwarten kann. Wieviele Funktionsauswertungen würde man für $K_3 = 10^7$ benötigen?

(g) Wiederholen Sie Teil (f) unter Verwendung der Matlab-Routine ode15s statt ode113. Erklären Sie, warum die Zahl der Funktionsauswertungen nun viel kleiner ist und etwa konstant für große Werte von K_3. Testen Sie auch $K_3 = 10^7$.

Abgabe am 17. Juli 2017 am Beginn der Vorlesung.
Besprechung in den Übungen ab 24. Juli 2017.