Aufgaben zur Vorlesung
Numerik II
Wintersemester 2012/13
Übungsblatt 10

W.–J. Beyn
D. Otten

Abgabe: Montag, 07.01.2013, vor Beginn der Übung (Aufgabe 28–30)
Abgabe: Mittwoch, 09.01.2013, vor Beginn der Übung (Aufgabe 31–32)

Übung: Mo. 16:15–17.45, V5-148 (Sondersitzung: einmalig am 07.01.2013)
Mi. 12:15–13:45, V5-148 (Übung am 19.12.2012 fällt aus)

Aufgabe 28: [Symmetrische Koeffizienten von Mehrschrittverfahren]

Gegeben sei eine Mehrstellenformel

$$\ell(f) = \sum_{\nu=0}^{m} a_\nu f(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} b_\nu f'(\nu), \quad f \in C^1(\mathbb{R},\mathbb{R})$$

mit

$$\ell(f) = 0 \text{ für alle } f \in \mathcal{P}_p, \quad \sum_{\nu=0}^{m} b_\nu = 1. \tag{1}$$

Die Koeffizienten a_ν, b_ν seien durch (1) eindeutig bestimmt.
Man zeige:

$$a_{m-\nu} = -a_\nu \quad \text{und} \quad b_{m-\nu} = b_\nu \quad \text{für alle} \quad \nu = 0,\dots,m.$$

Hinweis: Man beachte, dass $p = 2m$ aus der eindeutigen Lösbarkeit von (1) folgt, und man wähle eine geeignete Basis von $\mathcal{P}_p$.

(6 Punkte)

Aufgabe 29: [BDF-Verfahren mit variabler Schrittweite]

Man bestimme die Koeffizienten $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ eines Zweischritt-Verfahrens mit nichtäquidistanten Knoten $t_j < t_{j+1} < t_{j+2}$,

$$\alpha_0 u^j + \alpha_1 u^{j+1} + \alpha_2 u^{j+2} = f(t_{j+2}, u^{j+2}), \quad j = 0,1,2,\dots,$$

so dass die Konsistenzordnung $\mathcal{O}(h_{\max}^2)$ vorliegt, wobei $h_{\max} = \max_{j=0,\dots,M-1} h_j$ und $h_j = t_{j+1} - t_j$.
Unter welcher Bedingung an h_j, h_{j+1} erfüllt das charakteristische Polynom $q(z) = \sum_{\nu=0}^{2} \alpha_\nu z^\nu$ die Wurzelbedingung?
Hinweis: Zur Konstruktion der Formel und zum Nachweis der Konsistenzordnung kann Numerik I, §5.4 verwendet werden.

(6 Punkte)

Aufgabe 30: [Lineare Differenzengleichungen]

Geben Sie für die folgenden Differenzengleichungen jeweils die allgemeine Lösung der homogenen Aufgabe und die spezielle Lösung zu den vorgegebenen Anfangswerten an.

(a) $v_{j+2} = v_{j+1} + v_j, \quad j = 0, 1, 2 \dots$

Anfangswerte: $v_0 = 0,\ v_1 = 1$ (Fibonacci–Folge)

(b) Verfahren der rückwärtigen Differenzen (BDF) der Ordnung 2 bzw. 3 für die Aufgabe $u' = 0,\ u(0) = 1$

Anfangswerte: $v_0 = 1,\ v_1 = 1 + h^2$ bzw. $v_0 = 1,\ v_1 = 1,\ v_2 = 1 + h^3$

(6 Punkte)

Aufgabe 31: [Adams–Bashforth–Programmierung]

Das Anfangswertproblem

$$\begin{pmatrix} u_1' \\ u_2' \end{pmatrix} = \frac{1}{10}\begin{pmatrix} -9 & 8 \\ -2 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} u_1(0) \\ u_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

soll numerisch mit dem m–Schritt–Adams–Bashforth–Verfahren für $m \in \{1, \dots, 12\}$ auf $[0, 1]$ realisiert werden.
Berechnen Sie dafür zunächst für jedes m die Koeffizienten $a_{m-1}, a_m, b_0, \dots, b_{m-1}$, indem Sie das entsprechende lineare Gleichungssystem (vgl. Skript, Satz 3.1) aufstellen und numerisch lösen.
Verwenden Sie für alle Verfahren die Schrittweiten $h_i = \frac{1}{5}\left(\frac{1}{2}\right)^{i+2}$, $i = 0, \dots, 5$. Als Startwerte nehmen Sie die Werte der aus Aufgabe 12 a) bekannten exakten Lösung $\bar{u}(t) = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 + 2t \\ 5 + t \end{pmatrix} e^{-\frac{t}{2}}$ an den Stellen $t_j = h_i j$, $j = 0, \dots, m - 1$.
Zeichnen Sie den Fehler der numerischen Lösung u_h zur exakten Lösung $\bar{u}$ an den Stellen t_j in ein aussagekräftiges logarithmisches Diagramm ein und bestimmen Sie die experimentelle Konvergenzordnung zur Zeit $t = 1$ (vgl. Aufgabe 10)

$$EOC(h_i, h_{i+1}) := \frac{\ln\left(\frac{\varphi(h_i)}{\varphi(h_{i+1})}\right)}{\ln\left(\frac{h_i}{h_{i+1}}\right)}, \quad i = 0, \dots, 4, \quad \varphi(h) = \|u_h(1) - \bar{u}(1)\|_2 \, .$$

Senden Sie Ihr Programm per Email an dotten@math.uni-bielefeld.de.

(6 Punkte)

Aufgabe 32: [Randwertaufgaben in der chemischen Modellierung]

Stellen Sie für die inhibierte Michaelis–Menten–Reaktion (vgl. Aufgabe 7)

$$C + E \xrightarrow{k_1} CE \xrightarrow{k_2} D + E, \quad C + CE \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftarrows}} CCE$$

eine Anfangsrandwertaufgabe auf, in der Dirichletsche Randbedingungen für die diffundierenden Substrate und Diffusion nur für C und D angenommen werden. Leiten Sie für den stationären Zustand $c(x),\ 0 \le x \le L$, des Substrats C eine Randwertaufgabe der Form

$$c'' = S_0(x) \cdot g(c),\ 0 \le x \le L, \quad c(0) = c_0,\ c(L) = c_L$$

her, wobei $S_0(x)$ die Summe der Anfangskonzentrationen von E, CE und CCE ist.
Skizzieren Sie die Funktion $g(c)$ (Kurvendiskussion) und diskutieren Sie ihr Verhalten beim Übergang $k_3 \to 0$.

(6 Punkte)

Numerik II
Übungsblatt 10
Lösungen

Aufgabe 28:

Gegeben:

Mehrstellenformel: $\ell(f) = \sum_{\nu=0}^{m} a_\nu f(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} b_\nu f'(\nu)$, $f \in C^1(\mathbb{R},\mathbb{R})$

(28.1) $\quad$ mit $\ell(f) = 0 \quad \forall f \in \mathcal{P}_p$ <u>und</u> $\sum_{\nu=0}^{m} b_\nu = 1.$

Die Koeffizienten seien durch (28.1) eindeutig bestimmt.

Zeige:

$$a_{m-\nu} = -a_\nu \quad \text{und} \quad b_{m-\nu} = b_\nu \quad \forall \nu = 0,\dots,m.$$

Lösung:

1. Wähle eine Basis von $\mathcal{P}_p$:

$$q_k(t) = \left(t - \tfrac{m}{2}\right)^k, \quad k = 0,\dots,p$$

2. Die eindeutige Lösbarkeit von (28.1) ist äquivalent zur Nichtsingularität der Matrix

(28.4)
$$\begin{pmatrix} q_0(0) & \cdots & q_0(m) & q_0'(0) & \cdots & q_0'(m) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ q_p(0) & \cdots & q_p(m) & q_p'(0) & \cdots & q_p'(m) \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{p+2,\,2(m+1)}$$

Daher muss insbesondere

$$p+2 = 2(m+1) \iff p = 2m$$

gelten.

3. Ferner gelten die Eigenschaften

(28.2)
$$q_k(m-\nu) = \left(\tfrac{m}{2} - \nu\right)^k = (-1)^k \cdot q_k(\nu), \quad k = 0,\dots,p,$$

(28.3)
$$q_k'(m-\nu) = k \cdot \left(\tfrac{m}{2} - \nu\right)^{k-1} = (-1)^{k-1} q_k'(\nu), \quad k = 0,\dots,p.$$

4. Wenn a_ν, b_ν das System (28.1) eindeutig lösen, so folgt

$$\boxed{0 = \sum_{\nu=0}^{m} \boxed{a_\nu}\, q_k(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} \boxed{b_\nu}\, q_k'(\nu)}$$

umgekehrt aufsummieren

$$= \sum_{\nu=0}^{m} a_{m-\nu}\, q_k(m-\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} b_{m-\nu}\, q_k'(m-\nu)$$

(28.2) & (28.3)

$$= \sum_{\nu=0}^{m} a_{m-\nu} (-1)^k q_k(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} b_{m-\nu} (-1)^{k-1} q_k'(\nu)$$

$$= (-1)^{k-1} \left[\sum_{\nu=0}^{m} (-a_{m-\nu}) \cdot q_k(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} b_{m-\nu}\, q_k'(\nu) \right]$$

d.h.

$$\boxed{0 = \sum_{\nu=0}^{m} \boxed{(-a_{m-\nu})}\, q_k(\nu) - \sum_{\nu=0}^{m} \boxed{b_{m-\nu}}\, q_k'(\nu)}.$$

Da außerdem $\sum_{\nu=0}^{m} b_{m-\nu} = 1$, folgt aus der eindeutigen Lösbarkeit von (28.1)

$$-a_{m-\nu} = a_\nu \quad \text{und} \quad b_\nu = b_{m-\nu} \quad , \nu = 0, \dots, m$$

Bemerkung:

a) Falls m ungerade ist, so ist $a_{\frac{m}{2}} = -a_{\frac{m}{2}}$, also $a_{\frac{m}{2}} = 0$ (vgl. Aufgabe 25, $m=2$, Milne – Simpson)

b) Dieselbe Aussage gilt, wenn das Funktional die Form

$$\ell(f) = \sum_{\nu \in J_a} a_\nu f(\nu) - \sum_{\nu \in J_b} b_\nu f'(\nu)$$

mit symmetrischen Indexmengen J_a, J_b besitzt (d.h. $\nu \in J_{a,b} \Leftrightarrow m-\nu \in J_{a,b}$)
Dann ist in (28.4) natürlich $\rho = |J_a| + |J_b| - 2$ zu setzen und der Beweis verläuft wie oben.

Aufgabe 29:

Gegeben: $f: [t_0, t_E] \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

- Zweischrittverfahren: $\alpha_0 u^j + \alpha_1 u^{j+1} + \alpha_2 u^{j+2} = f(t_{j+2}, u^{j+2})$, $j = 0, 1, 2, \dots$
- $t_j < t_{j+1} < t_{j+2}$ nichtäquidistante Knoten
- $h_{max} = \max_{j=0,\dots,M} h_j$, $h_j = t_{j+1} - t_j$

a) Bestimme die Koeffizienten $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ so, dass die Konsistenzordnung $\mathcal{O}(h_{max}^2)$ vorliegt.

b) Unter welcher Bedingung an h_j, h_{j+1} erfüllt das charakteristische Polynom

$$q(z) = \sum_{\nu=0}^{2} a_\nu z^\nu$$

die Wurzelbedingung?

Lösung:

zu a) 1. Anwendung von Satz 5.3 (Numerik I) (mit $m=2, k=1, f=\bar{u}, [a,b] = [t_0, t_E]$, $t_0, \dots, t_m = t_j, t_{j+1}, t_{j+2}$, $\bar{t} = t_{j+2}$): Nach Satz 5.3 gilt für die interpolatorische Differentiationsformel zu den Knoten $t_j, t_{j+1}, t_{j+2} \in [t_0, t_E]$ mit $\bar{t} = t_{j+2}$

$$L_{2,1} := L_{2,1}(\bar{u}) = \sum_{\nu=0}^{2} \alpha_\nu \bar{u}(t_{j+\nu}) \quad ; \quad \alpha_\nu = L_\nu^{(1)}(t_{j+2}) \; ; \; \nu = 0, 1, 2.$$

die Fehlerabschätzung

$$(29.1) \qquad \exists C \geq 0 : |L_{2,1}(\bar{u}) - \bar{u}'(t_{j+2})| \leq C \cdot \underbrace{\left(\max_{\nu=0,1,2} |t_{j+2} - t_{j+\nu}|\right)^2}_{= \left(\max\{|t_{j+2} - t_j|, |t_{j+2} - t_{j+1}|\}\right)^2} \cdot \left(\sum_{j=3}^{4} \|\bar{u}^{(j)}\|_\infty\right),$$

falls $\bar{u} \in C^4([t_0, t_E], \mathbb{R})$ erfüllt ist.

Bemerke: Da man dies komponentenweise anwenden kann, gilt es auch für $\bar{u} \in C^4([t_0, t_E], \mathbb{R}^n)$.

2. Koeffizienten α_ν: Die Koeffizienten α_ν erhalten wir aus den Lagrangeschen Basisfunktionen

$$L_\nu(t) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq \nu}}^{2} \frac{t - t_{j+i}}{t_{j+\nu} - t_{j+i}} \quad , \nu = 0, 1, 2$$

also

(29.2)
$$\boxed{\begin{aligned}\alpha_0 &:= L_0^{(1)}(t_{j+2}) = \frac{t_{j+2}-t_{j+1}}{(t_j-t_{j+1})(t_j-t_{j+2})} = \frac{h_{j+1}}{h_j(h_{j+1}+h_j)}\\ \alpha_1 &:= L_1^{(1)}(t_{j+2}) = \frac{t_{j+2}-t_j}{(t_{j+1}-t_j)(t_{j+1}-t_{j+2})} = -\frac{h_j+h_{j+1}}{h_j\cdot h_{j+1}}\\ \alpha_2 &:= L_2^{(1)}(t_{j+2}) = \frac{[(t_{j+2}-t_{j+1})+(t_{j+2}-t_j)]}{(t_{j+2}-t_j)(t_{j+2}-t_{j+1})} = \frac{h_j+2h_{j+1}}{h_{j+1}(h_j+h_{j+1})}\end{aligned}}$$

Im Falle äquidistanter Stützstellen $h_j = h_{j+1} = h$ findet man die bekannte Formel
$$\alpha_0 = \frac{1}{2h}, \quad \alpha_1 = -\frac{2}{h}, \quad \alpha_2 = \frac{3}{2h} \quad \text{(BDF der Ordnung 2)}$$

3. Konsistenzordnung: Aus (29.1) folgt für den Konsistenzfehler

$$\|\tau_h(t_{j+2})\| =$$
$$= \Big\| \sum_{\nu=0}^{2} \alpha_\nu \bar{u}(t_{j+\nu}) - f(t_{j+2}, \bar{u}(t_{j+2}))\Big\|$$

$a_\nu = \alpha_\nu,\ b_0 = b_1 = 0$
$b_2 = 1$

$$= \| L_{2,1}(\bar u) - \bar u'(t_{j+2})\|$$
$$\le C\cdot\Big(\max\{\underbrace{|t_{j+2}-t_j|}_{\le |t_{j+2}-t_{j+1}|+|t_{j+1}-t_j| \le 2\cdot\max\{\overbrace{|t_{j+2}-t_{j+1}|}^{=h_{j+1}}, \overbrace{|t_{j+1}-t_j|}^{=h_j}\} = 2\cdot\max\{h_j,h_{j+1}\}}, |t_{j+2}-t_{j+1}|\}\Big)^2$$

$\max\{\max\{h_j,h_{j+1}\},h_{j+1}\}$
$=\max\{h_j,h_{j+1}\}$

$$\le 2^2\cdot C\,(\max\{h_j,h_{j+1}\})^2 \le 4\,C\,h_{max}^2$$

$$\Rightarrow \sup_j \|\tau_h(t_{j+2})\| \le 4C\,h_{max}^2 \Rightarrow \mathcal{O}(h_{max}^2).$$

zu b): 4. Wurzelbedingung: Sei
$$q(z) := \sum_{k=0}^{m} a_k z^k, \quad a_m \ne 0$$
das charakteristische Polynom eines linearen m-Schrittverfahrens. Die Wurzelbedingung lautet:
$$\forall z\in\mathbb{C} \text{ mit } q(z)=0: \begin{cases}(1): & |z|<1\\ \text{oder} & \\ (2): & |z|=1 \text{ und } z \text{ ist einfache NST.}\end{cases}$$

5. Charakteristisches Polynom: Mit $m=2$ erhalten wir
$$q(z) = \sum_{k=0}^{2} L_k^{(1)}(t_{j+2})\, z^k$$
$$= \frac{h_{j+1}}{h_j(h_{j+1}+h_j)} - \frac{h_j+h_{j+1}}{h_j h_{j+1}}\cdot z + \frac{h_j+2h_{j+1}}{h_{j+1}(h_j+h_{j+1})}\cdot z^2$$
$$= (z-1)\cdot\Big(z - \frac{h_{j+1}^2}{h_j(h_j+2h_{j+1})}\Big)$$

Die Nullstellen haben Vielfachheit 1.

$$\xi_1 := 1 \quad \text{mit } k_1 = 1,$$
$$\xi_2 := \frac{h_{j+1}^2}{h_j(h_j+2h_{j+1})} > 0 \quad \text{mit } k_2 = 1.$$
$$= \frac{\alpha_0}{\alpha_2}$$

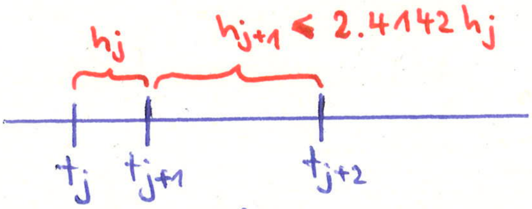
σ_1 erfüllt (2). σ_2 erfüllt (1)

(29.3) $$\iff \left| \frac{h_{j+1}^2}{h_j(h_j+2h_{j+1})} \right| < 1 \iff h_j > (\sqrt{2}-1)h_{j+1} \quad \forall j$$

(denn: wegen $h_j, h_{j+1} > 0$ gilt:

$$|\sigma_2| \le 1 \iff h_{j+1}^2 = |h_{j+1}^2| \le |h_j^2 + 2h_jh_{j+1}| = (h_j+h_{j+1})^2 - h_{j+1}^2$$
$$\iff 2h_{j+1}^2 \le (h_j+h_{j+1})^2$$
$$\iff \sqrt{2}\,h_{j+1} \le h_j + h_{j+1}$$
$$\iff (\sqrt{2}-1)h_{j+1} \le h_j$$
$$\iff h_{j+1} \le \frac{1}{\sqrt{2}-1} \cdot h_j = \overbrace{(\sqrt{2}+1)}^{\approx 2.4142} h_j \;) \quad \forall j$$

D.h. die Wurzelbedingung ist erfüllt, falls (29.3) gilt. (29.3) besagt, daß die Schrittweite nicht zu schnell anwachsen darf



Allerdings haben wir für den Fall variabler Schrittweiten keinen Stabilitätssatz bewiesen.

Achtung: $|\sigma_2| = 1$ ist nicht erlaubt, denn da $\sigma_2 > 0$ und $\sigma_2 \in \mathbb{R}$ ist, folgt aus $|\sigma_2| = 1$, dass $\sigma_2 = 1 = \sigma_1$. Damit wären σ_1, σ_2 keine einfachen (sondern doppelte) Nullstellen und die Wurzelbedingung wäre nicht erfüllt.

Aufgabe 29: (Alternativlösung)

zu (a): Es bezeichne $\bar{u}:[t_0,t_E]\to\mathbb{R}^N$ die exakte Lösung von $u'=f(t,u)$, $u(t_0)=u^0$.

1. Nach der Taylorformel gilt für $\bar{u}\in C^{n+1}([t_0,t_E],\mathbb{R}^N)$, $n\in\mathbb{N}$; $t,a\in[t_0,t_E]$

$$\bar{u}(t)=\sum_{k=0}^{n}\frac{\bar{u}^{(k)}(a)}{k!}\cdot(t-a)^k+\int_a^t\frac{(t-s)^n}{n!}\,\bar{u}^{(n+1)}(s)\,ds.$$

2. Für den Konsistenzfehler gilt nun: (Konsistenzfehler erhält man, wenn man $\bar{u}$ in die diskrete Gleichung einsetzt)

$$\|\tau_h(t_{j+2})\|$$

$$=\|\alpha_0\boxed{\bar{u}(t_j)}+\alpha_1\boxed{\bar{u}(t_{j+1})}+\alpha_2\bar{u}(t_{j+2})-\underbrace{f(t_{j+2},\bar{u}(t_{j+2}))}_{=\bar{u}'(t_{j+2})}\|$$

Taylor: $n=2$, $t=t_{j+1}$, $a=t_{j+2}$

Taylor: $n=2$, $t=t_j$, $a=t_{j+2}$

$$=\|\alpha_0\Big(\bar{u}(t_{j+2})+\bar{u}'(t_{j+2})\cdot(t_j-t_{j+2})+\bar{u}''(t_{j+2})\cdot\frac{(t_j-t_{j+2})^2}{2}+\int_{t_{j+2}}^{t_j}\frac{(t_j-s)^2}{2}\cdot\bar{u}'''(s)\,ds\Big)$$

$$+\alpha_1\Big(\bar{u}(t_{j+2})+\bar{u}'(t_{j+2})\cdot(t_{j+1}-t_{j+2})+\bar{u}''(t_{j+2})\cdot\frac{(t_{j+1}-t_{j+2})^2}{2}+\int_{t_{j+2}}^{t_{j+1}}\frac{(t_{j+1}-s)^2}{2}\cdot\bar{u}'''(s)\,ds\Big)$$

(29.4) $$+\alpha_2\bar{u}(t_{j+2})-\bar{u}'(t_{j+2})\|$$

$$=\|\underbrace{\boxed{(\alpha_0+\alpha_1+\alpha_2)}}_{\overset{!}{=}0}\cdot\bar{u}(t_{j+2})$$

$$+\underbrace{\boxed{(\alpha_0\cdot(t_j-t_{j+2})+\alpha_1\cdot(t_{j+1}-t_{j+2})-1)}}_{\overset{!}{=}0}\cdot\bar{u}'(t_{j+2})$$

$$+\underbrace{\boxed{(\alpha_0\cdot\tfrac{1}{2}\cdot(t_j-t_{j+2})^2+\alpha_1\cdot\tfrac{1}{2}\cdot(t_{j+1}-t_{j+2})^2)}}_{\overset{!}{=}0}\cdot\bar{u}''(t_{j+2})$$

$$+\alpha_0\int_{t_{j+2}}^{t_j}\frac{(t_j-s)^2}{2}\cdot\bar{u}'''(s)\,ds+\alpha_1\int_{t_{j+2}}^{t_{j+1}}\frac{(t_{j+1}-s)^2}{2}\cdot\bar{u}'''(s)\,ds\,\|\;=\circledast$$

D.h. wähle $(\alpha_0,\alpha_1,\alpha_2)$ als Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix}1&1&1\\(t_j-t_{j+2})&(t_{j+1}-t_{j+2})&0\\\frac{1}{2}(t_j-t_{j+2})^2&\frac{1}{2}(t_{j+1}-t_{j+2})^2&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_0\\\alpha_1\\\alpha_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}.$$

Wir erhalten, dass $(\alpha_0,\alpha_1,\alpha_2)$ durch (29.2) gegeben sind, d.h. (29.4) geht über in

$$\circledast = \Big\|\alpha_0\int_{t_j=\varphi(0)}^{t_{j+2}=\varphi(1)} \frac{(s-t_j)^2}{2}\cdot \bar u'''(s)\,ds + \alpha_1\int_{t_{j+1}=\tilde\varphi(0)}^{t_{j+2}=\tilde\varphi(1)} \frac{(s-t_{j+1})^2}{2}\cdot \bar u'''(s)\,ds\Big\|$$

$$\varphi(\tau) := t_j+\tau(t_{j+2}-t_j) \qquad \tilde\varphi(\tau) := t_{j+1}+\tau(t_{j+2}-t_{j+1})$$

Integration durch Sub.

$$= \Big\|\alpha_0\int_0^1 \frac{\tau^2(t_{j+2}-t_j)^2}{2}\cdot \bar u'''(t_j+\tau(t_{j+2}-t_j))\cdot(t_{j+2}-t_j)\,d\tau + \alpha_1\int_0^1 \frac{\tau^2(t_{j+2}-t_{j+1})^2}{2}\cdot \bar u'''(t_{j+1}+\tau(t_{j+2}-t_{j+1}))\cdot(t_{j+2}-t_{j+1})\,d\tau\Big\|$$

Δ's Ungl.

$$\le |\alpha_0|(t_{j+2}-t_j)^3\int_0^1 \frac{\tau^2}{2}\cdot \underbrace{\|\bar u'''(t_j+\tau(t_{j+2}-t_j))\|}_{\substack{\le \sup_{t\in[t_j,t_{j+2}]}\|\bar u'''(t)\| \\ \le \sup_{t\in[t_0,t_E]}\|\bar u'''(t)\| \\ = C<\infty,\ \text{falls } \bar u\in C^3, \\ \text{bzw. } f\in C^2}}\,d\tau + |\alpha_1|(t_{j+2}-t_{j+1})^3\cdot\int_0^1 \frac{\tau^2}{2}\cdot \underbrace{\|\bar u'''(t_{j+1}+\tau(t_{j+2}-t_{j+1}))\|}_{\substack{\le \sup_{t\in[t_{j+1},t_{j+2}]}\|\bar u'''(t)\| \\ \le \sup_{t\in[t_0,t_E]}\|\bar u'''(t)\| \\ = C<\infty \text{ (analog)}}}\,d\tau$$

$$\le C|\alpha_0|(t_{j+2}-t_j)^3\cdot\underbrace{\int_0^1\frac{\tau^2}{2}\,d\tau}_{=\frac16} + C|\alpha_1|(t_{j+2}-t_{j+1})^3\cdot\underbrace{\int_0^1\frac{\tau^2}{2}\,d\tau}_{=\frac16}$$

$$= \frac{C}{6}\cdot\Big(|\alpha_0|(\underbrace{t_{j+2}-t_j}_{\substack{=t_{j+1}+h_{j+1}-t_j \\ =h_{j+1}+h_j}})^3 + |\alpha_1|(\underbrace{t_{j+2}-t_{j+1}}_{=h_{j+1}})^3\Big)$$

$$= \frac{C}{6}\cdot\Big(|\alpha_0|(h_{j+1}+h_j)^3 + |\alpha_1|h_{j+1}^3\Big)$$

$$= \frac{C}{6}\cdot\Big(\frac{h_{j+1}}{h_j(h_{j+1}+h_j)}\cdot(h_{j+1}+h_j)^3 + \frac{h_j+h_{j+1}}{h_jh_{j+1}}\cdot h_{j+1}^3\Big)$$

$$= \frac{C}{6}\cdot\Big(\frac{h_{j+1}(h_{j+1}+h_j)^2+(h_j+h_{j+1})\cdot h_{j+1}^2}{h_j}\Big)$$

$$= \frac{C}{6}\cdot\Big(\frac{h_j+h_{j+1}}{h_j}\Big)\cdot\Big(\underbrace{h_{j+1}^2+h_j^2}_{\substack{\le 2\max\{h_{j+1}^2,h_j^2\} \\ =2\cdot(\max\{h_{j+1},h_j\})^2}} + \underbrace{h_jh_{j+1}}_{\substack{\le\max\{h_j^2,h_{j+1}^2\} \\ =(\max\{h_j,h_{j+1}\})^2}}\Big)$$

$$\le \underbrace{3\cdot\frac{C}{6}}_{=\frac{C}{2}}\cdot\underbrace{\Big(1+\frac{h_{j+1}}{h_j}\Big)}_{\overset{(H)}{\le}(1+\tilde C)}\cdot\underbrace{(\max\{h_j,h_{j+1}\})^2}_{\le \max_{j=0,\dots,M-1}h_j = h_{max}}$$

(H): $\boxed{\tilde C := \max_{j=0,\dots,M-1}\frac{h_{j+1}}{h_j}}$

$\Rightarrow \frac{h_{j+1}}{h_j}\le\tilde C \Rightarrow h_{j+1}\le\tilde C\cdot h_j \quad \forall j=0,\dots,M-1$

$\tilde C(j)\ne\tilde C_{>0}=\tilde C(M)$!

$$\le \frac{C}{2}\cdot(1+\tilde C)\cdot h_{max}^2 = C\,h_{max}^2$$

$$\Rightarrow \|\tau_h\| = \sup_{j=0,\dots,M-1}\|\tau_h(t_{j+2})\| \le C\cdot h_{max}^2, \qquad C=C(\bar u''',M)\ge 0$$

mit „=" falls $\bar u'''(t)=0\ \forall t\in[t_0,t_E]$

Aufgabe 30:

(a) $v_{j+2} = v_{j+1} + v_j \quad , \ j = 0,1,2,\dots$

Anfangswerte: $v_0 = 0, \ v_1 = 1$, (vgl. Skript Seite 111)

(b_1) Verfahren der rückwärtigen Differenzen (BDF) der Ordnung 2 für

$u' = 0 \ , \ u(0) = 1$

Anfangswerte: $v_0 = 1, \ v_1 = 1 + h^2$, (vgl. Skript Seite 111)

(b_2) Verfahren der rückwärtigen Differenzen (BDF) der Ordnung 3 für

$u' = 0 \ , \ u(0) = 1$

Anfangswerte: $v_0 = 1, \ v_1 = 1, \ v_2 = 1 + h^3$.

Geben Sie jeweils die „allgemeine Lösung der homogenen Aufgabe" und die „spezielle Lösung zu den vorgegebenen Anfangsdaten" an.

Lösung: (vgl. Kap III, §3.1, Lemma 3.7)

zu (a): 1. Differenzengleichung (vgl. (3.26)):

(30.1) $$\sum_{k=0}^{2} a_k v_{j+k} = 0 \quad , \ j = 0,1,2,\dots,N \quad , \ N \text{ beliebig.} \quad (m=2)$$
$$a_0 = a_1 = -1, \ a_2 = 1$$

2. Charakteristisches Polynom:

$$q(z) = \sum_{k=0}^{2} a_k z^k = z^2 - z - 1 \overset{!}{=} 0 \iff z = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Die Nullstellen haben Vielfachheit 1.

$$\sigma_1 := \frac{1+\sqrt{5}}{2} \quad \text{mit } K_1 = 1,$$
$$\sigma_2 := \frac{1-\sqrt{5}}{2} \quad \text{mit } K_2 = 1.$$

3. Anwendung von Lemma 3.7 (mit $m=2$, $s=2$, N beliebig):

$$a_2 = 1 \neq 0 \ , \ \sum_{i=1}^{2} K_i = 2$$

Nun setzen wir für $j = 0,\dots,N+2$

$$v_j^{(1,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+1}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}} \cdot \sigma_1^{j-0} = \sigma_1^j = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^j \ ,$$

$$v_j^{(2,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+2}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}} \cdot \sigma_2^{j-0} = \sigma_2^j = \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^j \ .$$

und wir erhalten

4. Allgemeine Lösung der homogenen Aufgabe (30.1):

(30.2) $$\boxed{\begin{aligned} v_j &= c_{1,0}\, v_j^{(1,0)} + c_{2,0}\, v_j^{(2,0)} \quad , \ j = 0,\dots,N+2 \\ &= c_{1,0} \cdot \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^j + c_{2,0} \cdot \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^j \quad , \ c_{1,0}, c_{2,0} \in \mathbb{C} \end{aligned}}$$

und

5. spezielle Lösung zu den vorgegebenen Anfangsdaten:

Die Lösung des AWPs

(30.3) $$\sum_{k=0}^{2} a_k v_{j+k} = 0 \ , \ j = 0,\dots,N \quad \text{mit } v_j = \alpha_j \ , \ j = 0,1 \quad (\alpha_0 = 0, \alpha_1 = 1)$$

ist durch (30.2) gegeben, wobei $c_{1,0}, c_{2,0}$ die eindeutige Lösung von

$$C_{1,0}\, v_j^{(1,0)} + C_{2,0}\, v_j^{(2,0)} = \alpha_j \quad , \; j=0,1$$

ist, d.h.

$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot 1 = 0$$
$$C_{1,0}\cdot\left(\frac{1+\sqrt5}{2}\right) + C_{2,0}\cdot\left(\frac{1-\sqrt5}{2}\right) = 1$$

also

$$\boxed{C_{1,0} = -C_{2,0} = \frac{1}{\sqrt5}}.$$

Somit ist die eindeutige Lösung des AWPs (30.3) gegeben durch

$$\boxed{v_j = \frac{1}{\sqrt5}\cdot\left(\frac{1+\sqrt5}{2}\right)^j - \frac{1}{\sqrt5}\cdot\left(\frac{1-\sqrt5}{2}\right)^j \quad , \; j=0,\dots,N+2}$$

Zu (b₁): 1. Differenzengleichung:

Betrachte

$$u'(t) = f(t,u(t)),\, t\in[0,t_E] \qquad , \; t_E \text{ beliebig.}$$

Das BDF-Verfahren der Ordnung 2 ist gegeben ($m=2$) durch

$$\frac{1}{h}\cdot\sum_{\ell=0}^{2} a_\ell\, u^{j+\ell} = \sum_{\ell=0}^{2} b_\ell\, f(t_{j+\ell}, u^{j+\ell}) \quad , \; j=0,\dots,M-2$$

mit den Koeffizienten (vgl. Seite 111)

$$\boxed{\begin{array}{l} a_0 = \frac12 \;,\; a_1 = -\frac42 = -2 \;,\; a_2 = \frac32 \\ b_0 = b_1 = 0 \;,\; b_2 = 1 \;,\; L=2 \;,\; M=1 \;,\quad x_0 = 0 \;,\; x_1 = -1 \;,\; x_2 = -2 \end{array}}$$

d.h.

$$\frac{1}{h}\cdot\left(\frac12 u^j - 2u^{j+1} + \frac32 u^{j+2}\right) = f(t_{j+2}, u^{j+2}) \quad , \; j=0,\dots,M-2.$$

Speziell für $f\equiv 0$ erhalten wir die lineare Differenzengleichung

$$\boxed{\frac{1}{2h}u^j - \frac{2}{h}u^{j+1} + \frac{3}{2h}u^{j+2} = 0 \quad , \; j=0,\dots,M-2}$$

also

(30.4) $$\sum_{k=0}^{2} a_k v_{j+k} = 0 \quad , \; j=0,1,2,\dots,N:=M-2 \quad \text{mit } m=2 \text{ und}$$

$$a_0 = \frac{1}{2h} \;,\; a_1 = -\frac{2}{h} \;,\; a_2 = \frac{3}{2h}.$$

2. Charakteristisches Polynom:

$$q(z) = \sum_{k=0}^{2} a_k z^k = \frac{3}{2h}z^2 - \frac{2}{h}z + \frac{1}{2h} \overset{!}{=} 0 \iff z\in\left\{1, \frac13\right\}$$

Die Nullstellen haben Vielfachheit 1.

$$\sigma_1 := 1 \quad \text{mit } K_1 = 1,$$
$$\sigma_2 := \frac13 \quad \text{mit } K_2 = 1.$$

3. Anwendung von Lemma 3.7 (mit $m=2$, $s=2$, N beliebig).

$$a_2 = \frac{3}{2h} \neq 0 \;,\quad \sum_{i=1}^{2} K_i = 2$$

Nun setzen wir für $j=0,\dots,N+2$

$$v_j^{(1,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+1}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}}\cdot \sigma_1^{j-0} = \sigma_1^j = 1^j = 1$$

$$v_j^{(2,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+2}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}}\cdot \sigma_2^{j-0} = \sigma_2^j = \left(\frac13\right)^j = \frac{1}{3^j}$$

und wir erhalten

4. Allgemeine Lösung der homogenen Aufgabe (30.4)

(30.5) $$\boxed{\begin{aligned} V_j &= C_{1,0}\cdot V_j^{(1,0)} + C_{2,0}\cdot V_j^{(2,0)} \quad , \; j=0,\dots,N+2 \\ &= C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot \frac{1}{3^j} \quad , \; C_{1,0}, C_{2,0} \in \mathbb{C} \end{aligned}}$$

und

5. Spezielle Lösung zu den vorgegebenen Anfangsdaten:

Die Lösung des AWP's

(30.6) $$\sum_{k=0}^{2} a_k V_{j+k} = 0 \quad , \; j=0,\dots,N \quad \text{mit} \quad V_j=\alpha_j \; , \; j=0,1 \; (\alpha_0=1, \alpha_1=1+h^2)$$

ist durch (30.5) gegeben, wobei $C_{1,0}$, $C_{2,0}$ die eindeutige Lösung von

$$C_{1,0}\cdot V_j^{(1,0)} + C_{2,0}\cdot V_j^{(2,0)} = \alpha_j \quad , \; j=0,1$$

ist, d.h.

$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot 1 = 1$$
$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot \frac{1}{3} = 1+h^2$$

also

$$\boxed{C_{1,0} = 1+\frac{3h^2}{2} \quad , \; C_{2,0} = -\frac{3h^2}{2}}.$$

Somit ist die eindeutige Lösung des AWPs (30.6) gegeben durch

$$\boxed{V_j = 1+\frac{3h^2}{2}\left(1-\frac{1}{3^j}\right) \quad , \; j=0,\dots,N+2}.$$

zu (b_2): 1. Differenzengleichung:

Betrachte

$$u'(t) = f(t,u(t)) \,, \; t\in[0,t_E] \quad , \; t_E \text{ beliebig.}$$

Das BDF-Verfahren der Ordnung 3 ist gegeben durch $(m=3)$

$$\frac{1}{h}\cdot\sum_{\nu=0}^{3} a_\nu u^{j+\nu} = \sum_{\nu=0}^{3} b_\nu f(t_{j+\nu}, u^{j+\nu}) \quad , \; j=0,\dots,M-3$$

mit den Koeffizienten (Vgl. Seite 111)

$$\boxed{\begin{aligned} &a_0 = -\tfrac{2}{6} = -\tfrac{1}{3} \,,\; a_1 = \tfrac{9}{6} = \tfrac{3}{2} \,,\; a_2 = -\tfrac{18}{6} = -3 ,\; a_3 = \tfrac{11}{6} \\ &b_0 = b_1 = b_2 = 0 ,\; b_3 = 1 ,\; L=6 \;,\; M=1,\; x_0=0, x_1=-1, x_2=-2, x_3=-3 \end{aligned}}$$

d.h.

$$\frac{1}{h}\left(-\frac{1}{3}u^j + \frac{3}{2}u^{j+1} - 3\cdot u^{j+2} + \frac{11}{6}u^{j+3}\right) = f(t_{j+3}, u^{j+3}) \;, \; j=0,\dots,M-3.$$

Speziell für $f\equiv 0$ erhalten wir die lineare Differenzengleichung

$$\boxed{-\frac{1}{3h}u^j + \frac{3}{2h}u^{j+1} - \frac{3}{h}u^{j+2} + \frac{11}{6h}u^{j+3} = 0 \;, \; j=0,\dots,M-3}$$

also

(30.7) $$\sum_{k=0}^{3} a_k V_{j+k} = 0 \;, \; j=0,1,2,\dots,N:=M-3 \quad \text{mit} \quad m=3 \text{ und}$$

$$a_0 = -\frac{1}{3h} \;,\; a_1 = \frac{3}{2h} \;,\; a_2 = -\frac{3}{h} \;,\; a_3 = \frac{11}{6h}.$$

2. Charakteristisches Polynom:

$$q(z) = \sum_{k=0}^{3} a_k z^k = \frac{11}{6h}\cdot z^3 - \frac{3}{h}\cdot z^2 + \frac{3}{2h}\cdot z - \frac{1}{3h} \overset{!}{=} 0$$

$$\Longleftrightarrow z \in \left\{1, \frac{7\pm i\sqrt{39}}{22}\right\}$$

Die Nullstellen haben die Vielfachheit 1

$$\sigma_1 := 1 \quad \text{mit } k_1 = 1,$$
$$\sigma_2 := \frac{7+i\sqrt{39}}{22} \quad \text{mit } k_2 = 1,$$
$$\sigma_3 := \frac{7-i\sqrt{39}}{22} \quad \text{mit } k_3 = 1.$$

3. Anwendung von Lemma 3.7 (mit $m=3$, $s=3$, N beliebig)

$$a_3 = \frac{11}{6h} \neq 0, \quad \sum_{i=1}^{3} k_i = 3$$

Nun setzen wir für $j=0,\dots,N+2$

$$V_j^{(1,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+1}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}} \cdot \sigma_1^{j-0} = \sigma_1^j = 1^j = 1,$$

$$V_j^{(2,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+2}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}} \cdot \sigma_2^{j-0} = \sigma_2^j = \left(\frac{7+i\sqrt{39}}{22}\right)^j,$$

$$V_j^{(3,0)} = \underbrace{\left(\prod_{\mu=j-0+3}^{j} \mu\right)}_{=1 \text{ (leeres Produkt)}} \cdot \sigma_3^{j-0} = \sigma_3^j = \left(\frac{7-i\sqrt{39}}{22}\right)^j,$$

und erhalten

4. Allgemeine Lösung der homogenen Aufgabe (30.7):

(30.8)
$$\boxed{\begin{aligned} V_j &= C_{1,0}\cdot V_j^{(1,0)} + C_{2,0}\cdot V_j^{(2,0)} + C_{3,0}\cdot V_j^{(3,0)}, \quad j=0,\dots,N+2 \\ &= C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot\left(\frac{7+i\sqrt{39}}{22}\right)^j + C_{3,0}\cdot\left(\frac{7-i\sqrt{39}}{22}\right)^j, \quad C_{1,0}, C_{2,0}, C_{3,0} \in \mathbb{C}\end{aligned}}$$

und

5. Spezielle Lösung zu den vorgegebenen Anfangsdaten:

Die Lösung des AWP's

(30.9)
$$\sum_{k=0}^{3} a_k V_{j+k} = 0, \quad j=0,\dots,N \quad \text{mit } V_j = \alpha_j, \; j=0,1,2$$
$$(\alpha_0 = \alpha_1 = 1, \; \alpha_2 = 1+h^3)$$

ist durch (30.8) gegeben, wobei $C_{1,0}, C_{2,0}, C_{3,0}$ die eindeutige Lösung von

$$C_{1,0}\cdot V_j^{(1,0)} + C_{2,0}\cdot V_j^{(2,0)} + C_{3,0}\cdot V_j^{(3,0)} = \alpha_j, \quad j=0,1,2$$

ist, d.h.,

$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot 1 + C_{3,0}\cdot 1 = 1$$
$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot\left(\frac{7+i\sqrt{39}}{22}\right) + C_{3,0}\cdot\left(\frac{7-i\sqrt{39}}{22}\right) = 1$$
$$C_{1,0}\cdot 1 + C_{2,0}\cdot\left(\frac{7+i\sqrt{39}}{22}\right)^2 + C_{3,0}\cdot\left(\frac{7-i\sqrt{39}}{22}\right)^2 = 1+h^3$$

also

$$\boxed{C_{1,0} = 1 + \frac{11h^3}{6}, \quad C_{2,0} = \overline{C_{3,0}} = -\frac{11h^3}{12} + i\frac{55\sqrt{39}}{156}\cdot h^3}$$

Somit ist die eindeutige Lösung des AWPs (30.9)

$$\boxed{\begin{aligned} V_j = 1 + \frac{11h^3}{6} &+ \left(-\frac{11h^3}{12} + i\frac{55\sqrt{39}}{156}h^3\right)\left(\frac{7+i\sqrt{39}}{22}\right)^j \\ &+ \left(-\frac{11h^3}{12} - i\frac{55\sqrt{39}}{156}h^3\right)\left(\frac{7-i\sqrt{39}}{22}\right)^j, \quad j=0,\dots,N+2.\end{aligned}}$$

```
% Aufgabe 31
%% 1. Initialisierung
A = 1/10*[-9,8;-2,-1];
f = @(t,v) A*[v(1);v(2)];
u_init=[1;1];
t_init=0;
t_end=1;
h_steps=1/5*(1/2).^((0:5)+2);
m_steps=1:12;

%% 2. Explizites m-Schritt Adams-Bashforth Verfahren
str='Computing solution for ';
w=waitbar(0,str,'Name','Adams-Bashforth method');
step=0;
steps=length(m_steps)*length(h_steps);
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  for h=h_steps
    step=step+1;
    waitbar(step/steps,w,[str,'m=',num2str(m),', h=',num2str(h)]);
    h_ind=find(h==h_steps);
    [tn{h_ind},un{m_ind,h_ind},a{m_ind},b{m_ind}]=AdamsBashforth(f,u_init,
t_init,t_end,h,m);
  end
end
close(w);

%% 3. Fehler der numerischen Loesung uh zur exakten Loesung u_bar an den
Stellen tj
% Auswertung der exakten Loesung
for h=h_steps
  h_ind=find(h==h_steps);
  t_grid=t_init:h:t_end;
  for i=1:length(t_grid)
    un_bar{h_ind}(:,i)=expm(A*(t_grid(i)-t_init))*u_init;
  end
end
% Berechung des Fehlers
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  for h=h_steps
    h_ind=find(h==h_steps);
    err_AB{m_ind,h_ind}=un{m_ind,h_ind}-un_bar{h_ind};
  end
end
% Plot des Fehlers
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  fig(m_ind)=figure;
  hold on;
  for h=h_steps
    h_ind=find(h==h_steps);
    %plot(tn{h_ind},sqrt(err{m_ind,h_ind}(1,:).^2+err{m_ind,h_ind}(2,:).
^2),'*');
    semilogy(tn{h_ind},sqrt(err_AB{m_ind,h_ind}(1,:).^2+err_AB{m_ind,h_ind}
(2,:).^2),'');
```

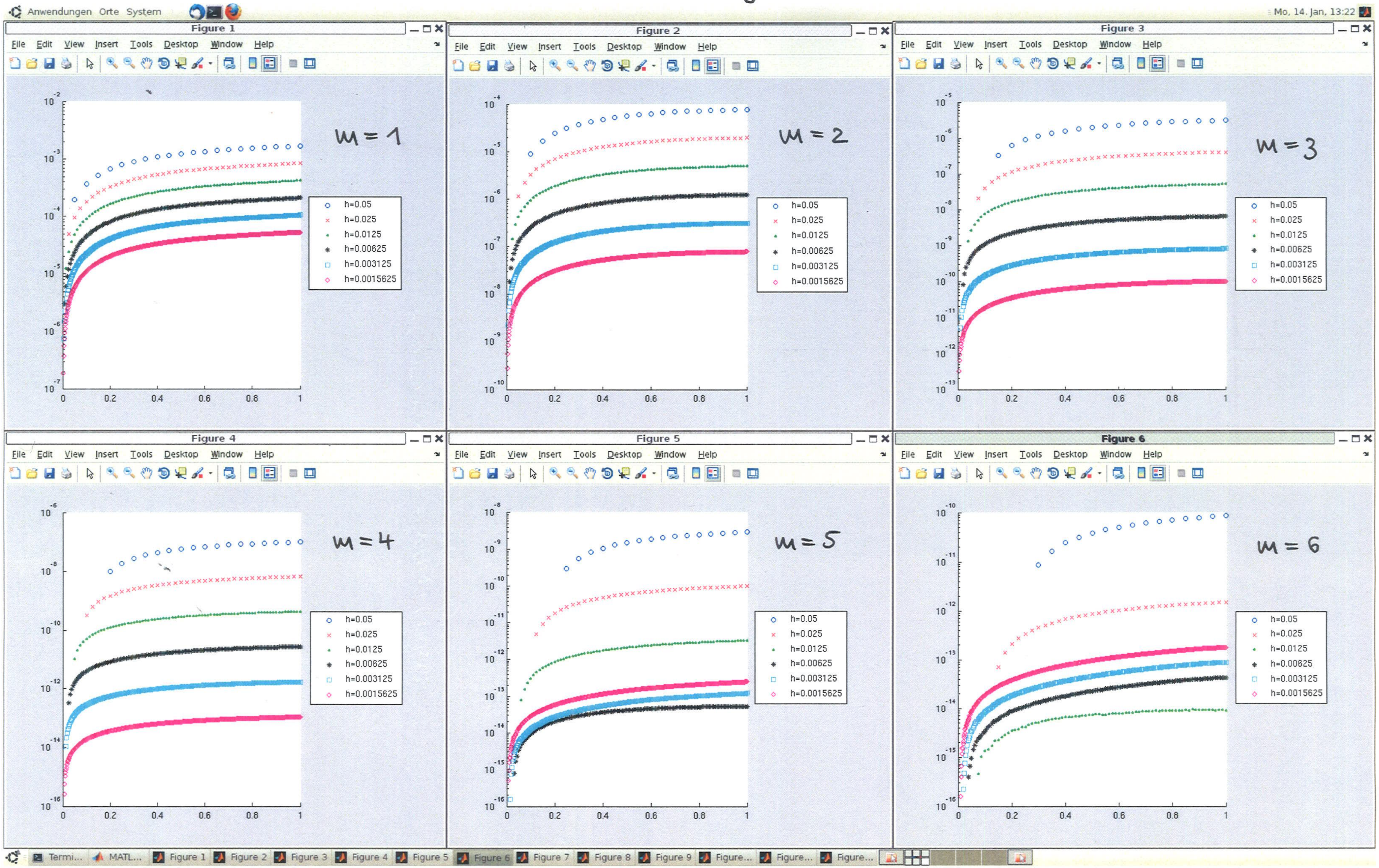
```
  end
  %legend(['h=',num2str(h_steps(1))],['h=',num2str(h_steps(2))],['h=',num2str
(h_steps(3))],['h=',num2str(h_steps(4))],['h=',num2str(h_steps(5))],['h=',
num2str(h_steps(6))],'Location','EastOutside');
  hold off
end

%% 4. Experimentelle Konvergenzordnung zur Zeit t=1 (EOC)
% Berechnung des Fehlers zur Zeit t=1
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  for h=h_steps
    h_ind=find(h==h_steps);
    err_AB_time1{m_ind,h_ind}=norm(err_AB{m_ind,h_ind}(:,end));
  end
end
% Berechnung der experimentellen Konvergenzordnung (EOC)
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  for n=2:length(h_steps)
    %err_AB_time1{m_ind,h_ind}=norm(err_AB{m_ind,h_ind}(:,end));
    EOC_AB{m_ind}(n) = log(err_AB_time1{m_ind,n-1}/err_AB_time1{m_ind,n}) / log
(h_steps(n-1)/h_steps(n));
  end
end
% Ausgabe der experimentellen Konvergenzordnung
fprintf('\n        Musterloesung zu Aufgabe 31, Numerik2, WS 2012/13\n\n')
fprintf('             h              phi(h)          exp. Konvergenzordnung\n')
fprintf('        ------------------------------------------------------------\n')
fprintf('(explizites) m-Schritt Adams-Bashforth Verfahren:\n')
for m=m_steps
  m_ind=find(m==m_steps);
  fprintf(['m=',num2str(m),':\n'])
  fprintf('       %6.5f    %10.9e\n',h_steps(1),err_AB_time1{m_ind,1})
  for n = 2:length(h_steps)
    fprintf('         %6.5f    %10.9e     %10.9f\n',h_steps(n),err_AB_time1
{m_ind,n},EOC_AB{m_ind}(n))
  end
end

% Analytic solution
%function y=u_anal(t,A,u_init,t0)
%     y = expm(A*(t-t0))*u_init;
%end
```

```
function [tn,un,a,b] = AdamsBashforth(f,u_init,t_init,t_end,h,m)
%ADAMSBASHFORTH loest Anfangswertprobleme der Form
%                 u'(t) = f(t,u(t)), u(t_init) = u_init
%             mit dem (expliziten) m-Schritt Adams-Bashforth Verfahren
%             (der Ordnung p=2) zur konstanten Zeitschrittweite h auf dem
%             endlichen Zeitintervall [t_init,t_end].

%% 1. Initialisierung
  % (a) Diskretisierung
  tn=t_init:h:t_end;
  time_steps=length(tn);
  space_dim=length(u_init);
  un=zeros(space_dim,time_steps);
  % (b) Parameter fuer das explizite Adams-Bashforth Verfahren:
  m_0=m-1;
  nu_0=0;
  nu_1=m-1;
  a=zeros(1,m+1);
  b=zeros(1,m+1);

%% 2. Bestimmung der Koeffizienten
  % 1. Moeglichkeit: (Loese lineares Gleichungssystem (3.4),(3.6))
    % (a) Gleichungssystem initialisieren
    n1=m-m_0+1;
    n2=nu_1-nu_0+1;
    p=m;
    A=zeros(p+2,n1+n2);
    for i=1:p+1
      for j=1:n1
        A(i,j)=poly(i-1,m_0+(j-1));
      end
      for j=1:n2
        A(i,n1+j)=-poly_diff(i-1,nu_0+(j-1));
      end
    end
    A(end,n1+1:end)=ones(1,n2);
    rhs=zeros(p+2,1);
    rhs(end,1)=1;
    % (b) Gleichungssystem loesen
    x=A\rhs;  % Alternativ liesen sich hier numerische Verfahren zum
              % loesen LGS verwenden (siehe: Numerik 1)
    % (c) Koeffizienten zuweisen
    for i=1:n1;
      a(m_0+i)=x(i);
    end
    for i=1:n2;
      b(nu_0+i)=x(n1+i);
    end
  % 2. Moeglichkeit: (Explizite Koeffizientendarstellung durch Integration
  %                   (vgl. Satz 3.1) -> Symbolic toolbox)

    %syms x
    %for nu=nu_0:nu_1
    %  g=0*x+lagrange(nu,x,nu_0,nu_1);   %Hinweis: Term 0*x fuer den Fall, dass
                                        %          nu_0=nu_1=0 (falls m=1)
    %  b(nu+1)=1/(m-m_0)*int(g,m_0,m);
```

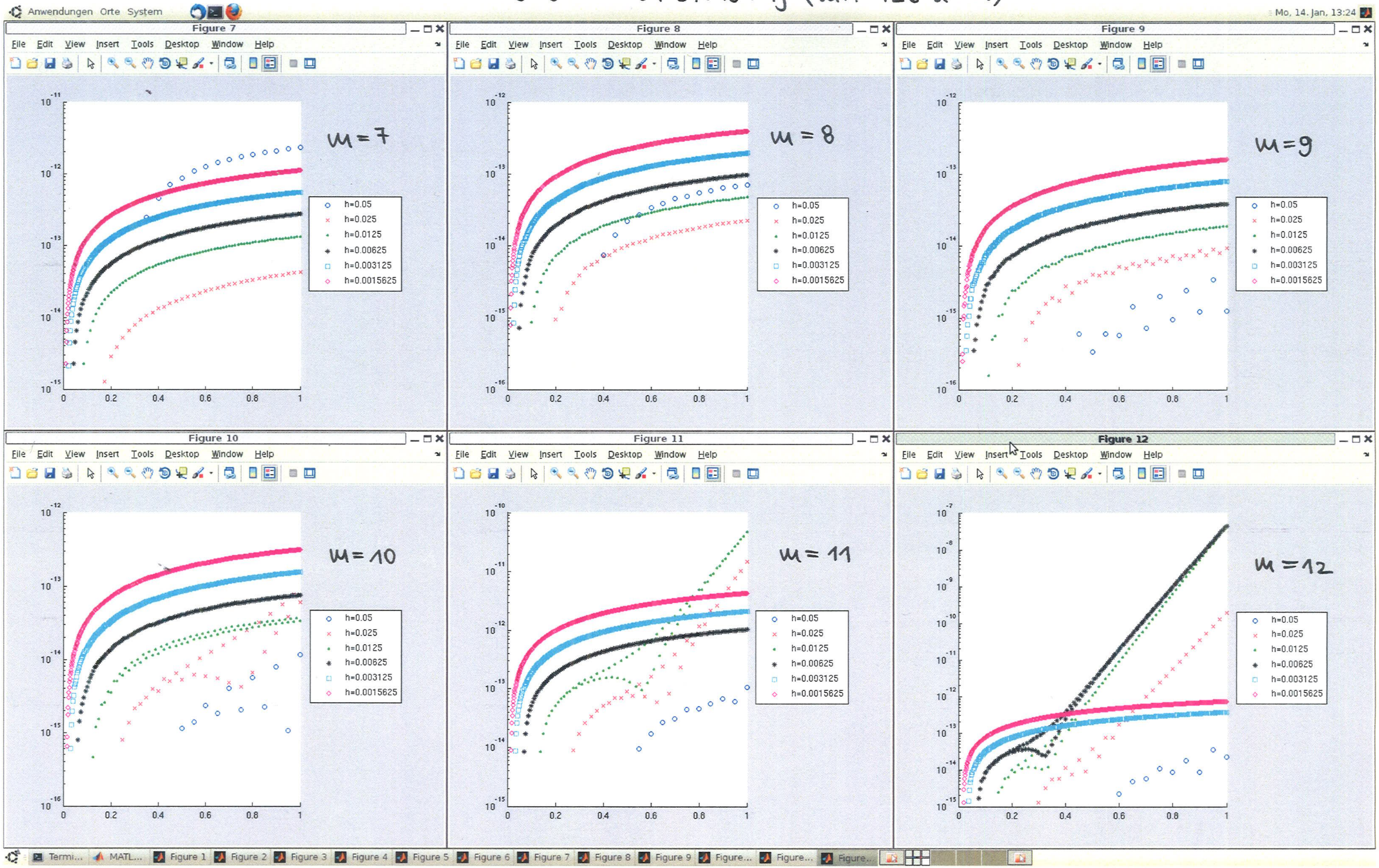
```
a(m_0+(1:n1)) = x(1:n1);
b(nu_0+(1:n2)) = x(n1+(1:n2));
```

```
    %end
    %a(m+1)=1/(m-m_0);
    %a(m_0+1)=-a(m+1);
  % Beachte: Exakte Integration mittels int dauert hier sehr lange!!
  % Ausweg: Numerisches Integrationsverfahren verwenden (siehe Numerik 1)
  %         anstelle der 'Symbolic toolbox'.

%% 3. Berechnung m-Anfangsdaten
  % Bestimmung der m-Startwerte mittels analytischer Loesung
  A = 1/10*[-9,8;-2,-1];
  for i=0:m-1
    un(:,i+1)=u_anal(tn(i+1),A,u_init,t_init);
  end

%% 4. Berechnung der Adams-Bashforth Iteration
  M=time_steps;
  for j=0:M-m-1
    sum_temp=zeros(space_dim,1);
    for nu=1:m
        sum_temp=sum_temp-a(nu)*un(:,j+nu)+h*b(nu)*f(tn(j+nu),un(:,j+nu));
    end
    un(:,j+m+1)=sum_temp/a(m+1);
  end
end

% Polynomial and derivative
function y=poly(k,s)
  y=s^k/factorial(k);
end

function y=poly_diff(k,s)
  if k==0
    y=0;
  else
    y=s^(k-1)/factorial(k-1);
  end
end

% Lagrange function
function y=lagrange(nu,t,nu0,nu1)
  y=1;
  for i=nu0:nu1
    if i~=nu
        y=y*(t-i)/(nu-i);
    end
  end
end

% Analytic solution
function y=u_anal(t,A,u_init,t0)
    y = expm(A*(t-t0))*u_init;
end
```

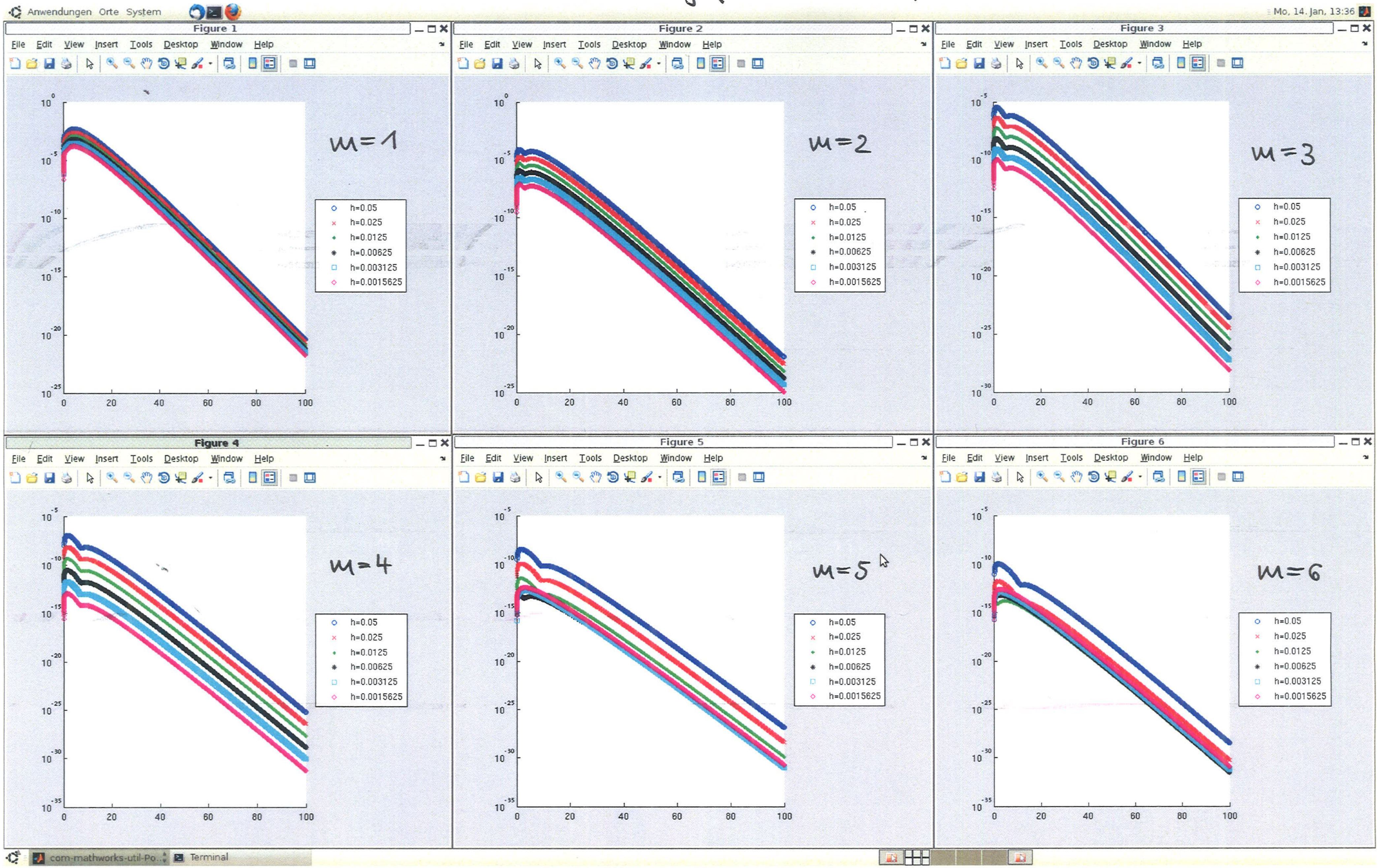
Fehler an den Stellen t_j (mit t_end = 1)



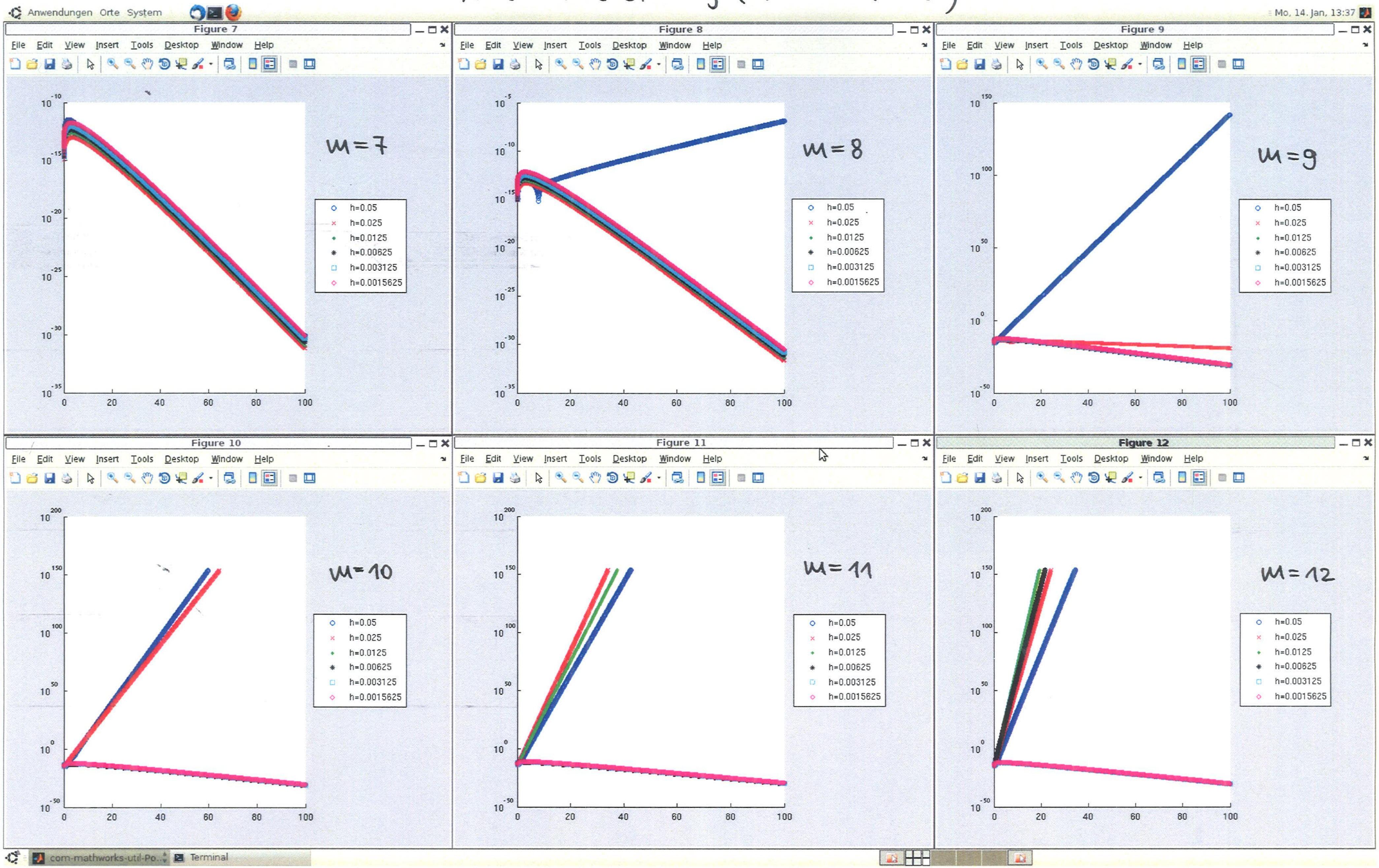
Fehler an den Stellen tj (mit t_end=1)



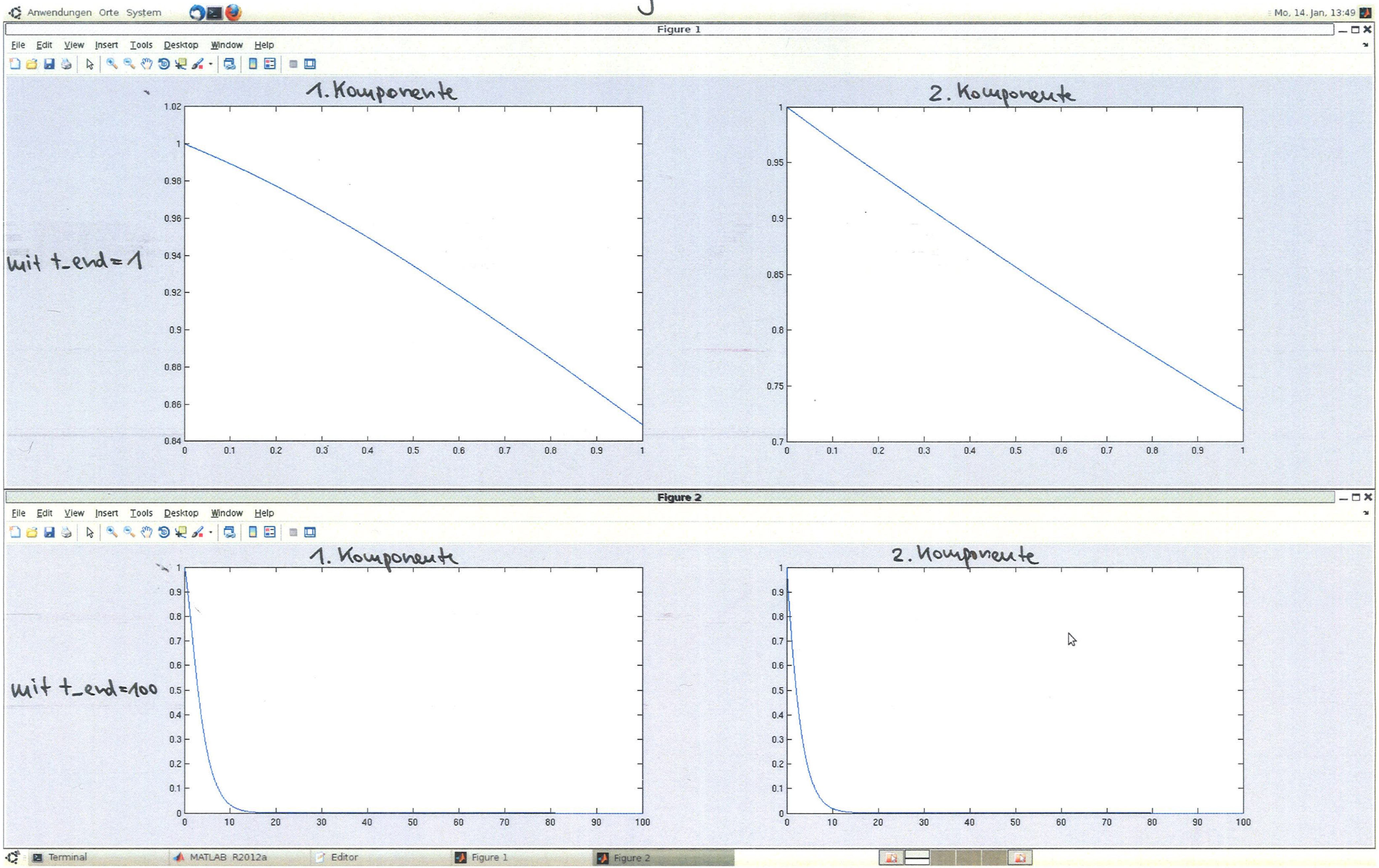
Fehler an der Stelle t_j (mit $t\_end = 100$)



Fehler an der Stelle t_j (mit t_end = 100)



Exakte Lösung



aufgabe31

Musterloesung zu Aufgabe 31, Numerik2, WS 2012/13

h	phi(h)	exp. Konvergenzordnung
(explizites) m-Schritt Adams-Bashforth Verfahren:		
m=1:		
0.05000	1.719020183e-03	
0.02500	8.534847995e-04	1.010149120
0.01250	4.252725502e-04	1.004977722
0.00625	2.122732347e-04	1.002465263
0.00313	1.060464016e-04	1.001226807
0.00156	5.300071443e-05	1.000611956
m=2:		
0.05000	7.708403210e-05	
0.02500	1.951194669e-05	1.982074317
0.01250	4.907270492e-06	1.991365020
0.00625	1.230422742e-06	1.995766721
0.00313	3.080527695e-07	1.997904664
0.00156	7.706885265e-08	1.998957687
m=3:		
0.05000	3.067643804e-06	
0.02500	3.968336427e-07	2.950524731
0.01250	5.040977801e-08	2.976758833
0.00625	6.350615501e-09	2.988735272
0.00313	7.968248659e-10	2.994561850
0.00156	9.967152618e-11	2.999009345
m=4:		
0.05000	1.005511892e-07	
0.02500	6.664267625e-09	3.915339996
0.01250	4.278493838e-10	3.961271420
0.00625	2.708697936e-11	3.981431589
0.00313	1.702220567e-12	3.992109625
0.00156	1.062981584e-13	4.001229480
m=5:		
0.05000	3.003712135e-09	
0.02500	1.022605250e-10	4.876425313
0.01250	3.292868437e-12	4.956760657
0.00625	5.199685415e-14	5.984776720
0.00313	1.200325159e-13	-1.206929027
0.00156	2.480137848e-13	-1.046995035
m=6:		
0.05000	8.499849586e-11	
0.02500	1.481824836e-12	5.841990487
0.01250	9.026324854e-15	7.359020502
0.00625	4.268876106e-14	-2.241645686
0.00313	8.691656621e-14	-1.025774887
0.00156	1.758148144e-13	-1.016353555
m=7:		
0.05000	2.292585255e-12	
0.02500	4.226116115e-14	5.761499168
0.01250	1.316269949e-13	-1.639051085
0.00625	2.707657335e-13	-1.040589776
0.00313	5.493830918e-13	-1.020767338
0.00156	1.105666701e-12	-1.009032142
m=8:		
0.05000	7.072042236e-14	
0.02500	2.217390834e-14	1.673263811
0.01250	4.683207082e-14	-1.078633753
0.00625	9.692138907e-14	-1.049318249
0.00313	1.953157785e-13	-1.010921515
0.00156	3.937910987e-13	-1.011621999
m=9:		
0.05000	1.241267077e-15	
0.02500	9.284810488e-15	-2.903058898
0.01250	1.854371589e-14	-0.997985999
0.00625	3.801715549e-14	-1.035720223

	0.00313	7.870948821e-14	-1.049886968
	0.00156	1.585310234e-13	-1.010155729
m=10:			
	0.05000	1.154738693e-14	
	0.02500	6.024737538e-14	-2.383331974
	0.01250	3.319176943e-14	0.860072852
	0.00625	7.532394819e-14	-1.182283082
	0.00313	1.554192088e-13	-1.044984295
	0.00156	3.125831694e-13	-1.008075278
m=11:			
	0.05000	1.072466247e-13	
	0.02500	1.469654242e-11	-7.098400725
	0.01250	4.731895732e-11	-1.686941505
	0.00625	1.038669464e-12	5.509609761
	0.00313	2.131494618e-12	-1.037128795
	0.00156	4.321296136e-12	-1.019598689
m=12:			
	0.05000	2.202275063e-14	
	0.02500	1.956152831e-10	-13.116736798
	0.01250	4.279108588e-08	-7.773147390
	0.00625	4.427920926e-08	-0.049319169
	0.00313	3.665888509e-13	16.882107023
	0.00156	7.242365265e-13	-0.982298031

Aufgabe 32:

Betrachte die inhibierte Michaelis-Menten Reaktion (iMMR)

$$C + E \xrightarrow{K_1} CE \xrightarrow{K_2} D + E,$$

$$C + CE \rightleftarrows CCE,$$

$\Omega =]0,L[$

mit Konzentrationen:

$c(t,x)$ Konzentration von Substrat C zur Zeit $t \geq 0$ an der Stelle $x \in \bar{\Omega} = [0,L]$,
$e(t,x)$ " " " E " " " ",
$K(t,x)$ " " " CE " " " ",
$\sigma(t,x)$ " " " CCE " " " ",
$d(t,x)$ " " " D " " " ";

und Diffusionskonstanten C_{diff}, $D_{diff} > 0$ der Substrate C, D.

(a): Anfangswertaufgabe aufstellen (Dirichletsche RB für alle Substrate, Diffusion nur für C und D)

(b): leiten Sie für den stationären Zustand $\bar{c}(x)$, $x \in \bar{\Omega}$, eine RWA der Form

$$c'' = S_0(x) \cdot g(c) \quad , \quad x \in \Omega$$
$$c(0) = c_0$$
$$c(L) = c_L$$

her, wobei

$S_0(x) := e(0,x) + K(0,x) + \sigma(0,x)$

Summe der Anfangskonzentrationen von E, CE, CEE ist.

(c): Skizzieren Sie die Funktion $g(c)$ (Kurvendiskussion) und diskutieren Sie ihr Verhalten beim Übergang $K_3 \to 0$.

Lösung:

zu (a): (Vgl. Skript 1. §2.2 & Aufgabe 7). Die (partielle) Differentialgleichung für (iMMR) lautet

$$\frac{\partial c}{\partial t} = C_{diff} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - K_1 \cdot c \cdot e - K_3 \cdot c \cdot K + K_{-3}\sigma \quad , \quad x \in \Omega, \ t > 0,$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -K_1 \cdot c \cdot e + K_2 K \quad , \quad x \in \Omega, \ t > 0,$$

(32.1)
$$\frac{\partial K}{\partial t} = K_1 \cdot c \cdot e - K_2 K - K_3 \cdot c \cdot K + K_{-3}\sigma \quad , \quad x \in \Omega, \ t > 0,$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = K_3 \cdot c \cdot K - K_{-3}\sigma \quad , \quad x \in \Omega, \ t > 0,$$

$$\frac{\partial d}{\partial t} = D_{diff} \cdot \frac{\partial^2 d}{\partial x^2} + K_2 K \quad , \quad x \in \Omega, \ t > 0,$$

Randbedingungen:

(32.2)
$$c(t,0) = c_0 \ , \ c(t,L) = c_L \ , \quad t \geq 0$$
$$d(t,0) = d_0 \ , \ d(t,L) = d_L \ ,$$

Anfangsbedingungen:

(32.3)
$$c(0,x) = c^0(x) \ , \quad x \in \bar{\Omega},$$
$$e(0,x) = e^0(x) \ , \quad x \in \bar{\Omega},$$
$$K(0,x) = K^0(x) \ , \quad x \in \bar{\Omega},$$
$$\sigma(0,x) = \sigma^0(x) \ , \quad x \in \bar{\Omega},$$
$$d(0,x) = d^0(x) \ , \quad x \in \bar{\Omega}.$$

(32.1)–(32.3) bilden die gesuchte AWA.

zu (b): Der stationäre Zustand $(\bar{c}, \bar{e}, \bar{k}, \bar{\sigma}, \bar{d})$ löst

$$(32.4) \qquad 0 = C_{diff} \cdot \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - K_1 c e - K_3 c k + K_{-3} \sigma \quad , x \in \Omega,$$

$$(32.5) \qquad 0 = -K_1 c e + K_2 k \quad , x \in \Omega,$$

$$(32.6) \qquad 0 = K_1 c e - K_2 k - K_3 c k + K_{-3} \sigma \quad , x \in \Omega,$$

$$(32.7) \qquad 0 = K_3 c k - K_{-3} \sigma \quad , x \in \Omega,$$

$$(32.8) \qquad 0 = D_{diff} \cdot \frac{\partial^2 d}{\partial x^2} + K_2 k \quad , x \in \Omega,$$

mit

$$c(0) = c_0 \quad , \quad c(L) = c_L ,$$
$$d(0) = d_0 \quad , \quad d(L) = d_L .$$

Definiere

$$S_0(x) := E_0(x) := \underbrace{e(x) + k(x) + \sigma(x)}_{\text{Anfangskonzentrationen, Da stationär, gilt}} \quad , x \in \bar{\Omega} \quad \text{(Erhaltungsgröße)},$$

$e(x) = e^0(x)$
$k(x) = k^0(x)$
$\sigma(x) = \sigma^0(x)$

dann gilt:

$$e = S_0 - k - \sigma$$
$$\overset{(32.7)}{=} S_0 - k - \frac{K_3}{K_{-3}} c k$$
$$\overset{(32.5)}{=} S_0 - \frac{K_1}{K_2} c e - \frac{K_3}{K_{-3}} \frac{K_1}{K_2} c^2 e$$
$$\Longleftrightarrow \left(1 + \frac{K_1}{K_2} c + \frac{K_3}{K_{-3}} \frac{K_1}{K_2} c^2\right) e = S_0$$
$$\Longleftrightarrow \qquad e = \frac{1}{\left(1 + \frac{K_1}{K_2} c + \frac{K_3}{K_{-3}} \frac{K_1}{K_2} c^2\right)} \cdot S_0 .$$

Daraus erhalten wir

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \overset{(32.4)}{=} \frac{1}{C_{diff}} \cdot \left(K_1 c e + K_3 c k - K_{-3} \sigma\right)$$
$$\overset{(32.7)}{=} \frac{K_1 c}{C_{diff}} \cdot e$$
$$= S_0 \cdot \underbrace{\frac{K_1 c}{C_{diff}} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{K_1}{K_2} c + \frac{K_3}{K_{-3}} \frac{K_1}{K_2} c^2\right)}}_{=: g(c)} \quad , x \in \Omega$$

d.h.

$$g(c) = \frac{1}{C_{diff}} \cdot \frac{K_1 K_2 K_{-3} c}{K_2 K_{-3} + K_1 K_{-3} c + K_1 K_3 c^2} .$$

zu (c): • Skizzieren von g(c):

$$g'(c) = -\frac{1}{C_{diff}} \cdot \frac{K_1K_2K_{-3}(K_1K_3c^2 - K_2K_{-3})}{(K_2K_{-3} + K_1K_{-3}c + K_1K_3c^2)^2}$$

$$g''(c) = \frac{1}{C_{diff}} \cdot \frac{2K_1^2K_2K_{-3}(-K_2K_{-3}^2 - 3K_2K_3K_{-3}c + K_1K_3^2c^3)}{(K_2K_{-3} + K_1K_{-3}c + K_1K_3c^2)^3}$$

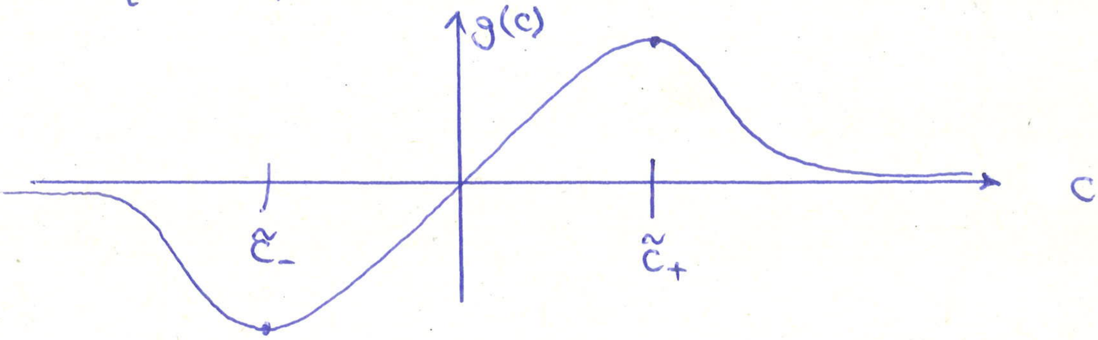
$$g(c) > 0 \quad , \quad c \in]0,\infty[$$

$$g(0) = 0 \quad ,$$

$$\lim_{c\to\infty} g(c) = 0 \quad , \quad \lim_{c\to-\infty} g(c) = 0$$

$$g'(\tilde{c}) = 0 \iff \tilde{c} = \pm\frac{\sqrt{K_1K_2K_3K_{-3}}}{K_1K_3} =: \tilde{c}_\pm$$

$$g''(\tilde{c}) \begin{cases} < 0 & , \tilde{c} = \tilde{c}_+ \\ > 0 & , \tilde{c} = \tilde{c}_- \end{cases}$$



(Zur Analyse lässt sich auch

$$\bar{g}(x) := \frac{x}{1+\alpha x+\beta x^2} > 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}_+ =]0,\infty[$$

betrachten.)

$$g(\tilde{c}) = \begin{cases} \frac{1}{C_{diff}} \dfrac{K_2\sqrt{K_1K_2K_3K_{-3}}}{(2K_2K_3 + \sqrt{K_1K_2K_3K_{-3}})} & , \tilde{c} = \tilde{c}_+ \\[2ex] \frac{1}{C_{diff}} \dfrac{K_2\sqrt{K_1K_2K_3K_{-3}}}{(-2K_2K_3 + \sqrt{K_1K_2K_3K_{-3}})} & , \tilde{c} = \tilde{c}_- \end{cases}$$

• Verhalten beim Übergang $K_3 \to 0$: $g_{K_3=0}(c) = \frac{1}{C_{Diff}} \cdot \frac{c}{\frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2}c}$.

$$\lim_{c\to\pm\infty} g_{K_3=0}(c) = \frac{K_2}{C_{Diff}} \quad , \quad g_{K_3=0}(c) \text{ unstetig in } -\frac{K_2}{K_1}$$

$$g_{K_3=0}(0) = 0$$