Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

universitätbonn

Übungen zu Einführung in die Numerische Mathematik (V2E2)

Sommersemester 2016

Prof. Dr. Martin Rumpf — Pascal Huber — Sascha Tölkes

Übungsblatt 3 — Abgabe: 10.05.2016

Aufgabe 8 (Schrittweitenabschätzung) — 4 Punkte

Betrachten Sie die skalare Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\ddot{x}(t) + \mu^2 x(t) = F(x(t)), \quad x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = v_0$$

mit Koeffizient $\mu > 0$, Startwerten $x_0, v_0 \in \mathbb{R}$ und einer (möglicherweise nichtlinearen) Funktion $F \in C^1(\mathbb{R})$.

Untersuchen Sie das qualitative Verhalten der Lösung $x(t)$ für den Fall $|F'(x)| \ll \mu^2$. In welcher Größenordnung müsste eine vernünftige Schrittweite τ für einen numerischen Integrator liegen?

Lösung

Für eine qualitative Untersuchung des Verhaltens von $x(t)$, betrachten wir eine geeignete Linearisierung der gegebenen Differentialgleichung. Dazu entwickeln wir die Funktion F in einer Taylorentwicklung um einen Punkt $y \in \mathbb{R}$ in der von x:

$$F(x) = F(y) + F'(y)(x-y) + \mathcal{O}\left((x-y)^2\right).$$

Damit erhalten wir als Linearisierung die Gleichung

$$\ddot{\tilde{x}}(t) + \left(\mu^2 - F'(y)\right)\tilde{x}(t) = F(y) - F'(y)y.$$

Wegen der Annahme $|F'(x)| \ll \mu^2$ können wir die Gleichung noch einmal vereinfachen und erhalten schließlich

$$\ddot{\tilde{x}}(t) + \mu^2 \tilde{x}(t) = F(y) + F'(y)y.$$

Diese Gleichung kann explizit gelöst werden (lineare Differentialgleichung mit konstanten Koeffizienten) mit

$$\tilde{x}(t) = \alpha \sin(\mu t) + \beta \cos(\mu t) + \frac{1}{\mu^2}\left(F(y) - F'(y)y\right),$$

wobei die Koeffizienten $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ leicht aus den Startwerten berechnet werden können. Qualitativ beschreibt die Lösung $x(t)$ also eine Oszillation mit Frequenz μ

um $(F(y) + F'(y)y)/\mu^2$. Um die Oszillation numerisch zu approximieren sollte die Schrittweite deutlich kleiner $1/\mu$ sein, damit die numerische Lösung die Oszillation auflösen kann.

Aufgabe 9 (Explizites Euler-Verfahren) 4 Punkte

Betrachten Sie die skalare Differentialgleichung

$$\dot{x}(t) = \lambda \left(1 - x(t)^2\right), \quad \lambda > 0 \qquad \text{mit} \quad x(0) = x_0 .$$

(i) Zeigen Sie: Die Gleichung hat einen stabilen Fixpunkt bei $x_s = 1$ und einen instabilen Fixpunkt bei $x_i = -1$.

(ii) Betrachten Sie das explizite Euler-Verfahren für die linearisierte Gleichung in der Nähe des stabilen Fixpunktes x_s. Welche Bedingung muss die Zeitschrittweite τ erfüllen, damit das explizite Euler-Verfahren gegen den Fixpunkt konvergiert?

Lösung

Die Fixpunkte erhält man als Nullstellen der rechten Seite. Außerdem gilt

$$\lim_{t\to\infty} x(t) = 1 \quad \text{für } x_0 > -1 .$$

Die linearisierte Gleichung lautet

$$\dot{x}(t) = -2\lambda(x - 1) .$$

Mit Hilfe von Definition 1.34 aus der Vorlesung erhält man, dass die Schrittweite τ durch $\frac{1}{\lambda}$ nach oben beschränkt sein muss, damit das explizite Euler-Verfahren gegen den Fixpunkt x_s konvergiert.

Aufgabe 10 (Implizites Euler-Verfahren) 4 Punkte

Betrachten Sie die autonome Differentialgleichung aus Aufgabe 9

$$\dot{x}(t) = \lambda \left(1 - x(t)^2\right), \quad \lambda > 0 \qquad \text{mit} \quad x(0) = x_0 .$$

Zeigen Sie, dass für das implizite Euler-Verfahren

$$\hat{\Phi}_\tau x = g_1 \quad \text{mit} \quad g_1 = x + \tau\lambda(1 - g_1^2)$$

zwei mögliche Werte $g_1^\pm \in \mathbb{R}$ in Frage kommen. Es stellt sich die Frage, ob dies ein Widerspruch zum Satz über die eindeutige Lösbarkeit von impliziten Runge-Kutta-Verfahren (Satz 1.37 aus der Vorlesung) ist. Zeigen Sie, dass für kleine Schrittweiten τ einer der beiden Werte $g_1^\pm$ nicht zur numerischen Lösung der Gleichung verwendet werden kann.

Lösung

Wir lösen zunächst die quadratische Gleichung und erhalten

$$g_1^{\pm} = \frac{1}{2\lambda\tau}\left(\pm\sqrt{1+4\tau\lambda(x+\tau\lambda)}-1\right).$$

Dies kein Widerspruch zu Satz 1.37 ist, da eine der obigen Lösungen für kleine τ “explodiert”. Um dies zu sehen betrachten wir die Lösung $g_1^-(\tau)$ in Abhängigkeit von τ. Man stellt leicht fest, dass

$$\lim_{\tau\to 0} g_1^-(\tau) = -\infty \neq x,$$

so dass diese Lösung für kleine τ nicht die exakte Lösung $x(t+\tau)$ approximiert. (Die eindeutige Lösung aus Satz 1.37 hingegen muss für $\tau = 0$ die Relation $g_1 = x$ erfüllen!)

Die zweite Lösung g_1^+ hingegen liefert den erwartbaren Konsistenzfehler von $\mathcal{O}(\tau^2)$. (Dies zu zeigen war nicht Teil der Aufgabe). Um dies zu sehen, entwickelt man die Wurzel in g_1^+ in einer Taylorreihe und erhält damit

$$g_1^+(\tau) = x_0 + \tau\lambda(1-x_0^2) + \mathcal{O}(\tau^2).$$

Die exakte Lösung der Differentialgleichung ist gegeben durch

$$x(t) = \frac{e^{2\lambda t} - e^{2\lambda c}}{e^{2\lambda t} + e^{2\lambda c}},$$

wobei $c \in \mathbb{R}$ durch den Anfangswert x_0 bestimmt ist. Auch die exakte Lösung entwickeln wir in einer Taylorreihe:

$$x(\tau) = x_0 + \tau\lambda(1-x_0^2) + \mathcal{O}(\tau^2).$$

Ein Koeffizientenvergleich der beiden Entwicklungen liefert

$$g_1^+(\tau) = x(\tau) + \mathcal{O}(\tau^2).$$

Programmieraufgabe 2 (Reaktion dreier Spezies)

Das Differentialgleichungssystem

$$\begin{aligned}
\dot{x}(t) &= -0.04x(t) + 10^4 y(t)z(t)\\
\dot{y}(t) &= 0.04x(t) - 10^4 y(t)z(t) - 3\cdot 10^7 y(t)^2\\
\dot{z}(t) &= 3\cdot 10^7 y(t)^2
\end{aligned}$$

beschreibt die Reaktion dreier Spezies.

Implementieren Sie das in Beispiel 1.25 der Vorlesung beschriebene explizite Runge-Kutta-Verfahren mit Schrittweitensteuerung, um für die Startwerte

$$x(0) = 1, \quad y(0) = 0, \quad z(0) = 0$$

die Lösung zum Zeitpunkt $t = 0.3$ zu approximieren. Verwenden Sie hierzu verschiedene Toleranzen von TOL $= 10^{-2}, \ldots, 10^{-9}$ und die Schwellwerte $\widehat{\epsilon} = 1$ und $\widehat{\epsilon} = 10^{-5}$.

Tableaus aus Beispiel 1.25:

$$
\begin{array}{r|ccccc}
 & 0 & & & & \\
 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\
 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\
 & 1 & 0 & 0 & 1 & \\
 & 1 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\
\hline
\text{4. Ordnung} & 1 & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \\
\hline
\text{5. Ordnung} & & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{6}
\end{array}
$$