

# 1 Newton–Verfahren

(ergänzend zu Vorlesung Nr. 8.)

Gesucht werden die Lösungen  $A$  der Gleichung

$$f(A) = 0.$$

Sei  $A^s$  die Nullstelle von  $f$ . Um das Verfahren zu erhalten, approximieren wir die Funktion  $f$  gemäß ihrer Taylorentwicklung durch eine lineare Funktion:

$$0 = f(A^s) \approx f(A_0) + f'(A_0) \cdot (A - A_0)$$

und erhalten so den Näherungswert  $\bar{A}$  als

$$\bar{A} = A_0 - \frac{f(A_0)}{f'(A_0)}.$$

Dabei ist  $\bar{A}$  freilich nur ein Näherungswert von  $A^s$ , und die Idee besteht nun darin, diese Approximation durch Wiederholen desselben Schemas (möglicherweise) zu verbessern. Man erhält so das Iterationsverfahren:

$$A_{i+1} = A_i - \frac{f(A_i)}{f'(A_i)}, \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

## Vorteile des Newton–Verfahrens:

- Wenn das Verfahren konvergiert, dann sehr schnell.
- Es kann leicht für die Lösung von Systemen angewendet werden (wobei an Stelle von  $1/f'(A)$  die Inverse von Jacobi–Matrix steht).

## Nachteile:

- Bei Wahl eines ungeeigneten Startwertes  $A_0$  können die Iterationen divergieren.
- Bei großen Systemen ist die Berechnung der Jacobi–Inversen ziemlich aufwendig.

## Beispiel.

Wir berechnen hier die Nullstellen einer Funktion, die wir später verwenden werden (siehe Paragraph über Stabilitätsanalyse und Abschnitt über eindimensionale Systeme):

$$f(A) = k_1 + k_2 A - \frac{k_3 A}{K_m + A} = 0$$

Die exakte Lösung ist ganz einfach zu berechnen, da die Multiplikation mit  $K_m + A$  zu einer quadratischen Gleichung für  $A$  führt:

$$A_i^s = \frac{-(k_2 K_m + k_1 - k_3) \pm \sqrt{(k_2 K_m + k_1 - k_3)^2 - 4 k_1 k_2 K_m}}{2 k_1}, \quad i = 1, 2.$$

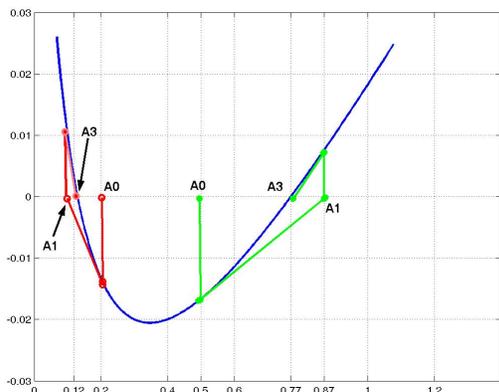
Insbesondere für die Parameterwerte  $k_1 = 0.1$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $K_m = 0.1$ ,  $k_3 = 0.2$  haben die Nullstellen von  $f$  den Dezimalwert

$$A_1^s = 0.1298437881, \quad A_2^s = 0.7701562119.$$

Zu welchen Approximationen das Newton–Verfahren führt, hängt vom Anfangsnäherungswert ab. Wir haben für zwei Startwerte  $A_0 = 0.2$  und  $A_0 = 0.5$  das Verfahren angewendet. Die Ergebnisse sind in der Tabellen und Graphik unten dargestellt:

$i$	$A_i$	$f(A_i)$	$f'(A_i)$	$i$	$A_i$	$f(A_i)$	$f'(A_i)$
0	0.2	-0.01333333	-0.12222	0	0.5	-0.01666667	0.04444
1	0.090909	0.0138528	-0.44875	1	0.0875	0.008013	0.0789612
2	0.12177867	0.0023578	-0.3066	2	0.773522	0.0002348	0.073789
3	0.12946849	0.0000105	-0.27982	3	0.7701608	0.000000034	0.073586
4	0.129842956	0.0000002	-0.27859	4	0.7701562119	0.0000000	0.0735859
5	0.129843788			5	0.7701562119		

Das Verfahren konvergiert offenbar sehr schnell, denn nach 4 Iterationen ist der Näherungswert bis auf 6 bis 7 Stellen nach der Komma genau.



Die Iterationen sind in der linken Graphik veranschaulicht: Man nimmt den Startwert  $A_0$ , rechnet die Funktionswert  $f(A_0)$  und folgt dann der Tangenten an den Graphen im Punkt  $(A_0, f(A_0))$  bis zur  $x$ -Achse. Diesen Punkt nimmt man als (neuen) Näherungswert  $A_1$ . Dann wird das Verfahren wiederholt.

## 2 Stabilität von (Fließ-) Gleichgewichten

Die Stabilität eines Fließgleichgewichts wird durch das Verhalten bei kleinen Auslenkungen aus diesem Zustand entschieden. Kehrt das System in den ursprünglichen Fließgleichgewichtszustand innerhalb einer gewissen Relaxationszeit zurück (oder nicht), so ist dieser stabil (oder nicht).

Die Stabilität von Punktlösungen kann mit der **linearen Stabilitätsanalyse** ermittelt werden. Die Stabilität höherdimensionaler Lösungen kann nur durch aufwendigere Methoden der **Bifurkationstheorie** bestimmt werden.

Insbesondere nichtlineare Systeme können bei Parameteränderungen qualitativ verschiedene Verhaltensweisen zeigen. Da nichtlineare Systeme mehrere Fließgleichgewichts-

zustände haben können, beobachtet man häufig, dass sie nach Parameteränderungen eine andere stabile Zustandskonstellation “bevorzugen”.

## 2.1 Mehr Mathematik dazu:

Die Konzentrationen in einem (bio-)chemischen Reaktionssystem wird normalerweise durch ein System von  $n$  nichtlinearen gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung beschrieben:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

Dabei bezeichnen  $\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \{f_i(\mathbf{z}); i = 1, 2, \dots\}$  den Vektor der Geschwindigkeitsraten in Abhängigkeit der jeweiligen Konzentrationen und  $\mathbf{x}(t) = \{x_i(t); i = 1, 2, \dots\}$  den Konzentrationen-Vektor in Abhängigkeit von der Zeit (**Zustandsgrößen**).

Wenn sich die Konzentrationen zeitlich nicht mehr ändern, ist eine **stationäre Lösung** (Ruhepunkt, Fließgleichgewicht) erreicht:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$$

Insbesondere nichtlineare Systeme können über mehrere Ruhepunkte verfügen.

Die Stabilität einer stationären Lösung  $\mathbf{x}^s$  wird bestimmt, indem man das Zeitverhalten einer kleinen Auslenkung  $\delta \mathbf{x}(t)$  untersucht:

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^s + \delta \mathbf{x}(t) \implies \delta \mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}^s$$

Wächst  $\delta \mathbf{x}(t)$  mit der Zeit, ist die betrachtete Lösung  $\mathbf{x}^s$  **instabil**.

Gilt dagegen  $\lim_{t \rightarrow \infty} \delta \mathbf{x}(t) = 0$ , ist die Lösung **stabil**.

Man setzt  $\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}^s + \delta \mathbf{x}(t)$  in die Differentialgleichung ein und vernachlässigt (nach einer Taylorentwicklung der rechten Seite) alle “späteren” Terme, d.h. die nicht linear in  $\delta \mathbf{x}(t)$  sind.

$$\frac{d[\mathbf{x}^s + \delta \mathbf{x}]}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}^s + \delta \mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}^s) + J \cdot \delta \mathbf{x} + \frac{1}{2} \delta \mathbf{x} \cdot D^2 \mathbf{f}(\mathbf{x}) \cdot \delta \mathbf{x} + \dots \implies \frac{d[\delta \mathbf{x}]}{dt} = J \cdot \delta \mathbf{x}$$

mit der **Jacobi-Matrix**

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

die im stationären Punkt gerechnet wird ( $\mathbf{x} = \mathbf{x}^s$ ).

Die Lösung lässt sich durch einen Exponentialansatz bestimmen (vgl. Systeme linearer Differentialgleichungen)

$$\delta \mathbf{x}(t) = \delta \mathbf{x}_0 \cdot e^{\lambda t}$$

⇒ charakteristische Gleichung für die Eigenwerte  $\lambda$

$$|J - \lambda E| = 0$$

mit der Einheitsmatrix

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

⇒  $n$  Eigenwerte  $\lambda_1 \cdots \lambda_n$  und als Superposition des Fundamentalsystems der Lösungen die Lösung für die kleinen Auslenkungen

$$\delta \mathbf{x}_i(t) = \sum_{i=1}^n c_{ij} \cdot e^{\lambda_i t}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

⇒ Die Realteile aller Eigenwerte  $\lambda$  müssen kleiner Null sein, um die Stabilität der stationären Lösung  $\mathbf{x}^s$  zu garantieren.

### Einige wichtige Begriffe:

**Phasenraum:** Der Zustand des Systems wird durch die  $n$  Funktionen  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  beschrieben, man spricht auch von Zustands- oder Phasenkoordinaten. Der Vektor  $\mathbf{x}(t)$  mit den Koordinaten  $x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)$  heißt Zustands- oder Phasenvektor, der  $n$ -dimensionale Raum der Punkte  $\mathbf{x}(t)$  Zustands- oder Phasenraum.

**Bifurkation** — plötzliche Änderung des qualitativen Verhaltens des Systems in Abhängigkeit von einem Parameter, an einem bestimmten Schwellwert (z.B. Auftreten / Verschwinden von stationären Punkten, Änderung der Stabilität, ...)

## 2.2 Einkomponentige Systeme

$$\frac{dX}{dt} = f(X, k)$$

wobei die Werte von  $X$  reelle Zahlen sind und  $k$  einen Parameter bezeichnet (z.B. Reaktionsgeschwindigkeit). Nehmen wir an, dass diese Gleichung eine stationäre Lösung

$$X = X^s, \quad f(X^s) = 0$$

hat. Die lineare Näherung für die Auslenkung ergibt:

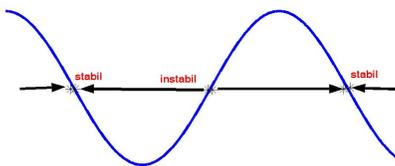
$$\frac{d}{dt} \delta X = f'(X^s, k) \cdot \delta X$$

mit der Lösung

$$\delta X(t) = \delta X_0 \cdot \exp(f'(X^s, k) t)$$

$$\implies \text{Die stationäre Lösung } X^s \text{ ist } \begin{cases} \text{stabil} & \text{für } f'(X^s, k) < 0 \\ \text{instabil} & \text{für } f'(X^s, k) > 0 \end{cases}$$

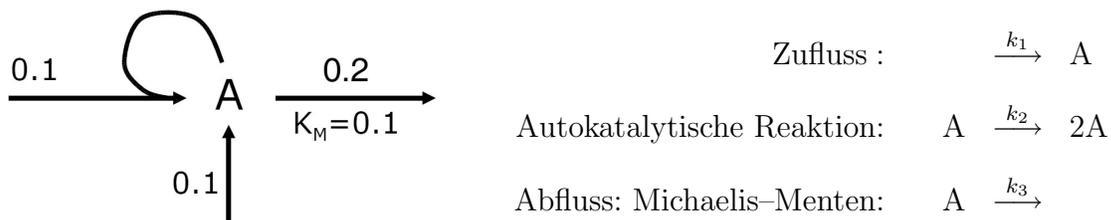
Für  $f'(X^s, k) = 0$  liefert die lineare Stabilitätsanalyse keine Aussage.



Der Phasenraum des eindimensionalen Systems ist eine Gerade, auf der sich die Bewegung des Systems als Wanderung des Punktes  $X(t)$  widerspiegelt. Welche der stabilen Lösungen angefahren wird, hängt vom jeweiligen Anfangswert ab.

### Beispielmodell:

(s. auch Vorlesungsskript 10.)



Diese Reaktionskinetik wird durch die folgende Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{dA}{dt} = k_1 + k_2 A - \frac{k_3 A}{K_m + A}$$

Zur Berechnung der stationären Lösungen setzen wir die rechte Seite gleich 0:

$$k_2 A^2 + (k_2 K_m + k_1 - k_3) A + k_1 K_m = 0$$

Diese quadratische Gleichung hat (höchstens) zwei Lösungen, und diese sind die Ruhepunkte der obigen Differentialgleichung:

$$A_i^s = \frac{-(k_2 K_m + k_1 - k_3) \pm \sqrt{(k_2 K_m + k_1 - k_3)^2 - 4 k_1 k_2 K_m}}{2 k_1}, \quad i = 1, 2.$$

Für dieselben Parameterwerte  $k_1 = 0.1$ ,  $k_2 = 0.1$ ,  $K_m = 0.1$ ,  $k_3 = 0.2$  wie im Beispiel zum Newton-Verfahren

$$A_1^s = 0.1298437881, \quad A_2^s = 0.7701562119.$$

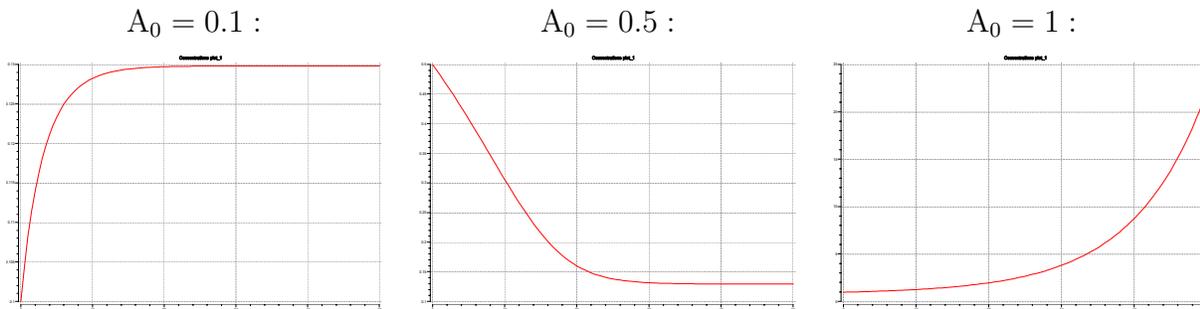
ist eine stationäre Lösung  $A^s$   $\begin{cases} \text{stabil} & \text{für } f'(A_i^s) < 0 \\ \text{instabil} & \text{für } f'(A_i^s) > 0 \end{cases}$ , wobei  $f'(A) = k_1 - \frac{k_3 K_m}{(K_m + A)^2}$ .

Das heißt für die hier gewählten Parametern konkret:

$$f'(A_1^s) = -0.278585916 < 0 \implies A_1^s \text{ ist stabil}$$

$$f'(A_2^s) = 0.0735859164 > 0 \implies A_2^s \text{ ist instabil}$$

Für Anfangswerte  $A_0 < A_2^s$  geht die Lösung also zum stabilen Ruhepunkt  $A_1^s = 0.1298$ . Da  $A_2^s$  instabil ist, führen Anfangswerte  $A_0 > A_2^s$  zu einer Lösung, die sich keinem Gleichgewicht nähert (s.auch Vorlesung 10):



**Bemerkung.** Die Steady State-Analyse in COPASI für  $A_0 = 0.5$  findet als Ruhepunkt den instabilen Wert  $A_2^s = 0.7756$

Summary of stability:  
This state is unstable.  
Eigenvalue statistics:  
Largest real part: 0.0735859  
Largest absolute imaginary part: 0

... obwohl das System offensichtlich zum stabilen Gleichgewichtspunkt strebt, wie aus der entsprechenden Graphik hervorgeht. Der Grund dafür ist das Newton-Verfahren, das in COPASI implementiert ist. Es nimmt nämlich als Anfangswert für die Iteration den Anfangswert der Differentialgleichung, und dieser führt zum instabilen Ruhepunkt (s. Tabelle des Beispiels zum Newton-Verfahren). Um den "richtigen" Wert zu erhalten, muss man in der COPASI-Tabelle zu Steady States "Use Newton" ausschalten (0 setzen) und den "Use Integration" einschalten (1 setzen).

Somit ist es ein exzellentes Beispiel, dass die numerischen Ergebnisse von Software-Paketen immer nur mit Vorsicht zu genießen sind.

### 2.3 Zweidimensionale Systeme

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2), \quad \frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, x_2)$$

Zur graphischen Ermittlung der stationären Lösungen werden oft die Schnittpunkt der **Nullklinen**:

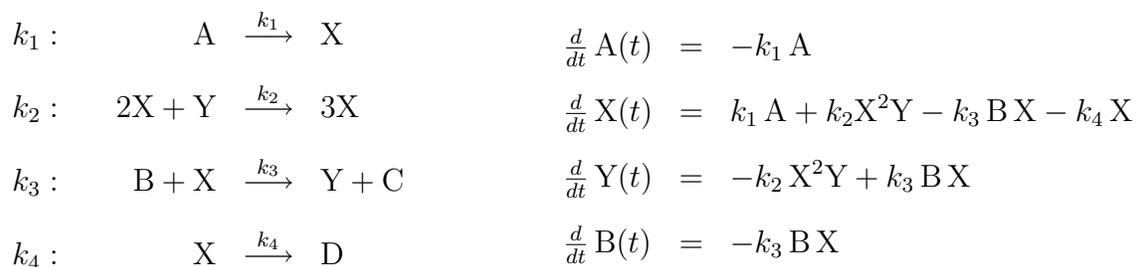
$$f_1(x_1, x_2) = 0 \implies \text{z.B. } x_1 = g_1(x_2)$$

$$f_2(x_1, x_2) = 0 \implies x_2 = g_2(x_1)$$

in zweidimensionalen Phasenraum (Phasenebene) gesucht. Die Phasentrajektorie ist durch die zeitfreie Darstellung des Differentialgleichungssystems charakterisiert:

$$\frac{dx_2}{dx_1} = \frac{f_2(x_1, x_2)}{f_1(x_1, x_2)}$$

**Beispiel: Brusselator** (COPASI File: brusselator.cps)



Die interessantesten Komponenten hier sind die "autokatalytische" Spezies X und Y. Um sie zu analysieren, nehmen wir an, dass sich die Spezies A und B nicht zeitlich ändern:  $A = 1, B = 1$ . Außerdem sind die Geschwindigkeiten  $k_1 = 1$  und  $k_4 = 1$ . So reduziert sich das System von 4 Gleichungen zu folgendem System von 2 nichtlinearen Differentialgleichungen mit den beiden Parametern  $k_2, k_3$ :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} X = 1 - (1 + k_3) X + k_2 X^2 Y \\ \frac{d}{dt} Y = k_3 X - k_2 X^2 Y \end{cases}$$

**Schritt 1: Suche die Fließgleichgewichte:**

$$\begin{cases} 0 = 1 - (1 + k_3) X + k_2 X^2 Y \\ 0 = k_3 X - k_2 X^2 Y \end{cases} \implies \begin{cases} X_s = 1 \\ Y_s = \frac{k_3}{k_2} \end{cases}$$

**Schritt 2: "Störung" und Linearisierung des Systems nahe eines Fließgleichgewichts:**

$$\begin{cases} X = X_s + \delta X \\ Y = Y_s + \delta Y \end{cases} \implies \begin{cases} \frac{d}{dt} \delta X = 1 - (1 + k_3)(X_s + \delta X) + k_2 (X_s + \delta X)^2 (Y_s + \delta Y) \\ \frac{d}{dt} \delta Y = k_3 (X_s + \delta X) - k_2 (X_s + \delta X)^2 (Y_s + \delta Y) \end{cases}$$

Setze  $X_s = 1, Y = k_3/k_2$  ein und vernachlässige alle nichtlinearen Terme in  $\delta X, \delta Y$  (linearisiere das System):

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \delta X = (k_3 - 1) \delta X + k_2 \delta Y \\ \frac{d}{dt} \delta Y = -k_3 \delta X - k_2 \delta Y \end{cases} \implies \begin{pmatrix} \frac{d}{dt} \delta X \\ \frac{d}{dt} \delta Y \end{pmatrix} = J_s \cdot \begin{pmatrix} \delta X \\ \delta Y \end{pmatrix}$$

mit der Jacobi-Matrix  $J_s$ , berechnet im betrachteten stationären Punkt:

$$J = \begin{pmatrix} -(1 + k_3) + 2 k_2 XY & k_2 X^2 \\ k_3 - 2 k_2 XY & -k_2 X^2 \end{pmatrix} \implies J_s = \begin{pmatrix} k_3 - 1 & k_2 \\ -k_3 & -k_2 \end{pmatrix}$$

### Schritt 3: Bestimmung der Eigenwerte dieser Jacobi-Matrix $J_s$ :

Für die Lösung von linearisierten Differentialgleichungen für  $(X, Y)$  nutzen wir die “Standard”-Technik zur Lösung der linearen Differentialgleichungen mit konstanten Koeffizienten, d.h. wir suchen die Lösung der Form

$$\begin{aligned} \delta X &= C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \\ \delta Y &= D_1 e^{\lambda_1 t} + D_2 e^{\lambda_2 t} \end{aligned}$$

wobei  $\lambda_1, \lambda_2, C_1, C_2, D_1$  und  $D_2$  Konstanten sind, die nur von den Anfangsbedingungen und den Parametern in der Matrix  $J_s$  abhängen. Nehmen wir zum Beispiel an, dass sich das System bei  $t = 0$  im stationären Zustand befindet, so folgt  $\delta X(t = 0) = 0$  und  $\delta Y(t = 0) = 0$  und demzufolge:

$$C_1 = -C_2, \quad D_1 = -D_2$$

Die anderen Konstanten kann man durch das direkte Einsetzen von  $\delta X$  und  $\delta Y$  in die Differentialgleichung bestimmen.

Für Stabilität des betrachteten stationären Punktes ist das Vorzeichen von  $\Re \lambda_i$  wichtig. Offensichtlich wird für positive Realteile von  $\lambda$  die Lösung ziemlich schnell vom stationären Punkt “abhauen”. Man kann zeigen, dass  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  die Eigenwerte der Jacobi-Matrix  $J_s$  sind, nämlich die Nullstellen von

$$|J_s - \lambda E| = (k_3 - 1 - \lambda)(-k_2 - \lambda) + k_2 k_3 = \lambda^2 + \lambda(k_2 + 1 - k_3) + 1 = 0.$$

Das ist eine “ganz normale” quadratische Gleichung, wobei die Nullstellen bestimmt sind durch

$$\begin{aligned} 2 \lambda_1 &= -(k_2 + 1 - k_3) - \sqrt{(k_3 - k_2 - 1)^2 - 4} \\ 2 \lambda_2 &= -(k_2 + 1 - k_3) + \sqrt{(k_3 - k_2 - 1)^2 - 4} \end{aligned}$$

Wir merken, dass  $\Re \lambda_1$  und  $\Re \lambda_2$  immer dasselbe Vorzeichen haben. Genauer betrachtet ist

$$\begin{aligned} \Re \lambda_i < 0, \quad \Im \lambda_i = 0, & \quad \text{wenn } k_3 - k_2 < 1, & \quad i = 1, 2 \\ \Re \lambda_i = 0, \quad \Im \lambda_i \neq 0, & \quad \text{wenn } k_3 - k_2 = 1, & \quad i = 1, 2 \\ \Re \lambda_i > 0, \quad \Im \lambda_i \neq 0, & \quad \text{wenn } 1 < k_3 - k_2 < 3, & \quad i = 1, 2 \\ \Re \lambda_i > 0, \quad \Im \lambda_i = 0, & \quad \text{wenn } k_3 - k_2 > 3, & \quad i = 1, 2, \end{aligned}$$

und nun gehen wir zum letzten

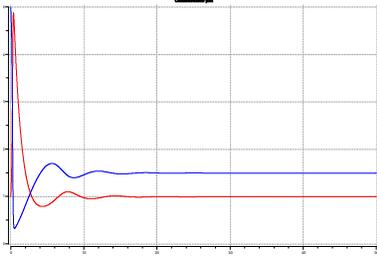
#### Schritt 4. "Spielen" mit COPASI:

Tipp: Setze  $k_2 = 1$  und ändere den Parameter  $k_3$  ( $k_1$  in dritter Reaktion (R3) in COPASI)

Fall 1:  $k_3 = 1.5$

Beide Eigenwerte sind komplex mit negativen Realteilen. Das System nähert sich der stationären Lösung mit einer gedämpften periodischen Bewegung:

Zeitreihe:



Summary:

This state is asymptotically stable, transient states in its vicinity have oscillatory components.

Eigenvalue statistics:

Largest real part: -0.25

Largest absolute imaginary part: 0.968246

0 are purely real

0 are purely imaginary

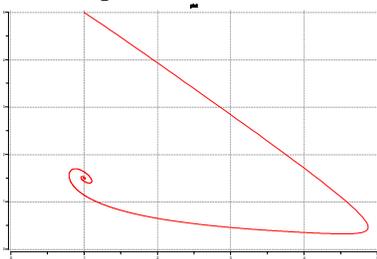
2 are complex

0 are equal to zero

0 have positive real part

2 have negative real part

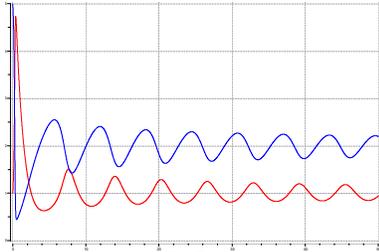
Phasenplot:



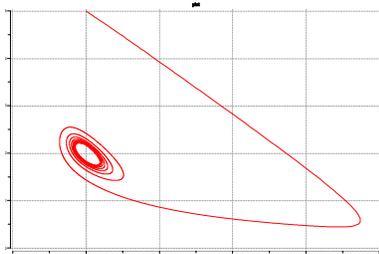
Fall 2:  $k_3 = 2$

Beide Eigenwerte sind rein imaginär. Regime der ungedämpften Schwinkungen, bei kleiner Auslenkung beschreibt das System eine Ellipsenbahn um die stationäre Lösung.

Zeitreihe:



Phasenplot:



Summary:

This state's stability is undetermined, transient states in its vicinity have oscillatory components.

Eigenvalue statistics:

Largest real part:  $-1.08752e-13$

Largest absolute imaginary part: 1

0 are purely real

2 are purely imaginary

0 are complex

0 are equal to zero

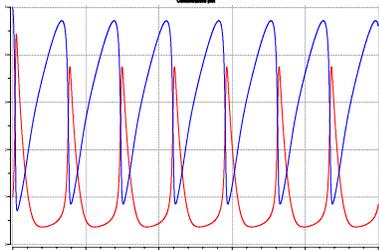
0 have positive real part

0 have negative real part

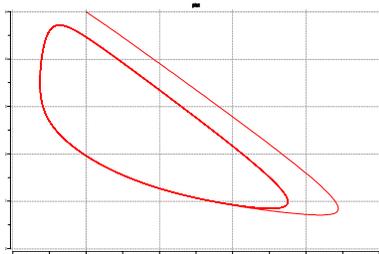
Fall 3:  $k_3 = 3$

Eigenwerte sind komplex und haben positive Realteile. Das System entfernt sich oszillierend von der stationären Lösung.

Zeitreihe:



Phasenplot:



Summary:

This state is unstable, transient states in its vicinity have oscillatory components.

Eigenvalue statistics:

Largest real part: 0.5

Largest absolute imaginary part: 0.866025

0 are purely real

0 are purely imaginary

2 are complex

0 are equal to zero

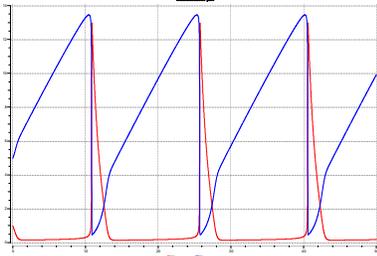
2 have positive real part

0 have negative real part

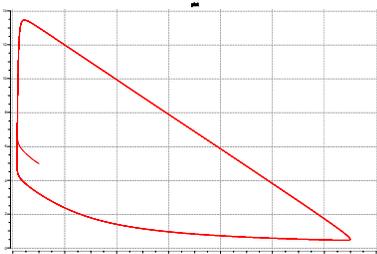
Fall 4:  $k_3 = 6$

Eigenwerte sind reell und positiv. Das System entfernt sich aperiodisch selbsterregt von der stationären Lösung.

Zeitreihe:



Phasenplot:



Summary:

This state is unstable.

Eigenvalue statistics:

Largest real part: 3.73205

Largest absolute imaginary part: 0

2 are purely real

0 are purely imaginary

0 are complex

0 are equal to zero

2 have positive real part

0 have negative real part

### 3 Einführung in die Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

**Suche:** die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (ODE)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0$$

Bei den numerischen Verfahren wird nicht ein formelmäßiger (expliziter) Ausdruck für die gesuchte Lösung  $y(t)$  konstruiert — dies ist für die meisten biologischen Modelle gar nicht möglich — sondern es werden an gewissen ausgezeichneten Abszissen  $t_i$ ,  $i = 0, 1 \dots n$ , Näherungswerte  $u_i := u(t_i)$  für die exakten Werte  $y_i := y(t_i)$  bestimmt. Am einfachsten ist die auch leicht graphisch realisierbare Euler-Methode.

#### 3.1 Explizites Euler-Verfahren.

- Wähle Zeitschrittweite  $h > 0$
- **Diskretisierung:** Ersetze die Zeit  $t \geq 0$  durch diskrete Menge von Punkten:

$$t_i = t_0 + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

- Nach einer bestimmten numerischen Regel wird die **Tabelle von Näherungswerte**  $u_i := u(t_i)$  erstellt.

Zum Euler-Verfahren kommt man durch eine einfache Überlegung: Da  $f(t, y)$  die Steigung  $y'(t)$  der gesuchten exakten Lösung  $y(t)$  ist, gilt näherungsweise für kleine  $h > 0$ :

$$\frac{y(t+h) - y(t)}{h} \approx f(t, y(t))$$

oder (gleichbedeutend damit)

$$y(t+h) \approx y(t) + h \cdot f(t, y(t)).$$

Nach Wahl einer Schrittweite  $h > 0$  erhält man so ausgehend von den gegebenen Anfangswerten  $t_0, y_0 = y(t_0)$  an den äquidistanten Stellen  $t_i = t_0 + ih, i = 0, 1, 2, \dots$ , Näherungswerte  $u_i$  für die Werte  $y_i := y(t_i)$  der exakten Lösung  $y(t)$ :

$$\begin{aligned} u_0 &:= y_0, & \text{für } i = 0, t = t_0 \\ u_{i+1} &:= u_i + h \cdot f(t_i, u_i), & \text{für } t_{i+1} := t_i + h, i = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Offensichtlich hängen die Näherungswerte  $u_i$  von der Schrittweite  $h > 0$  ab.

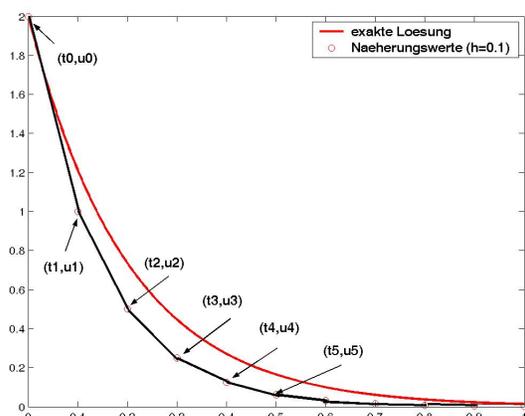
### Beispiel

Wir betrachten die einfache lineare Gleichung:

$$\frac{dy}{dt} = -5 \cdot y(t), \quad y(t_0 = 0) = 2$$

Exakte Lösung :  $y(t) = 2 \cdot e^{-5t}$

Euler Verfahren:  $y_{i+1} = y_i - 5 \cdot h \cdot y_{i-1}, \quad t_i = h \cdot i, \quad i = 1, 2, \dots$



$t_i$	$h = 0.1$	$h = 0.01$	exakt
0.1	1.0000	1.1975	1.2131
0.2	0.5000	0.7170	0.7358
0.3	0.2500	0.4293	0.4463
0.4	0.1250	0.2570	0.2707
0.5	0.0625	0.1539	0.1642
0.6	0.0313	0.0921	0.0996
0.7	0.0156	0.0552	0.0604
0.8	0.0078	0.0330	0.0366
0.9	0.0039	0.0198	0.0222

### 3.2 Einschrittverfahren.

Das Euler-Verfahren ist wohl das einfachste numerische Verfahren, das bei jedem Rechenschritt zu einem Fehler von der Größenordnung  $h$  führt. Das Verfahren ist sehr einfach, aber konvergiert (wenn überhaupt) relativ langsam. Für eine bessere Konvergenzgeschwindigkeit verwendet man die Methoden von "höherer" Ordnung (die pro Rechenschritt zu kleineren Fehlern führen).

Ersetzt man in der Formel des Euler–Verfahrens  $f(t_i, u_i)$  durch einen allgemeineren Ausdruck  $\bar{f}(t_i, u_i)$ , so entsteht die Formel eines allgemeinen **Einschrittverfahrens**:

$$u_{i+1} := u_i + h \bar{f}(t_i, u_i); \quad u_0 := y_0, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Zu den bekanntesten gehören die Varianten der Runge–Kutta–Verfahren (s. auch Vorlesung 7).

### 3.3 Schwierigkeiten bei biologischen Modellen. Steife Systeme.

Typisch für Probleme der biochemischen Reaktionskinetik sind die stark unterschiedlichen Zeitordnungen, in denen die Reaktionen ablaufen. Das äußert sich in den unterschiedlichen Größenordnungen der Koeffizienten im Differentialgleichungssystem. Eine Linearisierung ergibt daher einen weiten Bereich der Eigenwerte.

Solche Systeme bereiten bei der numerischen Lösung große Schwierigkeiten. Ein Beispiel soll das erläutern. Gegeben sei das System:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} x + \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} y \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} x + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} y \end{aligned}$$

mit Konstanten  $\lambda_1 < 0$ ,  $\lambda_2 < 0$ .

Die allgemeine Lösung lautet

$$\begin{aligned} x(t) &= C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \\ y(t) &= C_1 e^{\lambda_1 t} - C_2 e^{\lambda_2 t} \end{aligned}$$

mit Konstanten  $C_1$  und  $C_2$ , die von den vorgegebenen Anfangswerten abhängen.

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2} (x_0 + y_0) & x_0 &= C_1 + C_2 \\ C_2 &= \frac{1}{2} (x_0 - y_0) & y_0 &= C_1 - C_2 \end{aligned} \implies$$

Integriert man mit dem Euler–Verfahren, so lassen sich die numerischen Näherungen ”geschlossen” darstellen, es ist:

$$\begin{aligned} u_{1i} &= C_1 (1 + h \lambda_1)^i + C_2 (1 + h \lambda_2)^i \\ u_{2i} &= C_1 (1 + h \lambda_1)^i - C_2 (1 + h \lambda_2)^i \end{aligned}$$

Offensichtlich konvergieren die Näherungen nur dann, falls die Schrittweite  $h$  so klein gewählt wird, dass

$$|1 + h \lambda_1| < 1 \text{ und } |1 + h \lambda_2| < 1.$$

Es sei nun  $|\lambda_2|$  gegen  $|\lambda_1|$ . Wegen  $\lambda_2 < 0$  ist dann in der exakten Lösung der Einfluss der Komponente  $e^{\lambda_2 t}$  gegenüber  $e^{\lambda_1 t}$  vernachlässigbar klein. Leider gilt das nicht für die numerische Integration. Wegen  $|1 + h \lambda_2| < 1$  muß nämlich die Schrittweite  $h > 0$  so klein gewählt werden, daß:

$$h < \frac{2}{|\lambda_2|}.$$

Für den Fall  $\lambda_1 = -1$ ,  $\lambda_2 = -1000$  ist  $h \leq 0.002$ . Obwohl also  $e^{-1000t}$  zur Lösung praktisch nichts beiträgt, bestimmt der Faktor 1000 im Exponenten die Schrittweite. Dieses Verhalten bei der numerischen Integration bezeichnet man als **steif** (in Englisch: **stiff equations**).

Ein solches Verhalten ist zu erwarten, wenn für eine Differentialgleichung  $y' = f(t, y)$  die Jacobi Matrix Eigenwerte  $\lambda$  mit  $\Re\lambda \ll 0$  besitzt.

Das Euler-Verfahren ist für die numerische Integration solcher Systeme kaum geeignet, da die Schrittweiten für biologische Modelle sehr klein sein müssen (oft  $h \approx 10^{-10}$  und noch kleiner). Gleiches gilt für Runge-Kutta-Verfahren sowie für alle **explizite** Verfahren. Allgemein heißt ein Verfahren *explizit*, wenn zur Berechnung des nächsten Wertes  $u_{i+1}$  nur die vorhergehende Werte  $u_i, u_{i-1}, \dots, u_0$  verwendet werden.

### 3.4 Implizite Verfahren

Geeignete Methoden zur Integration steifer Differentialgleichungen leiten sich aus den sogenannten **impliziten** Verfahren ab. Als Beispiel diene das **implizite Euler-Verfahren**.

$$u_{i+1} = u_i + h f(t_{i+1}, u_{i+1}), i = 0, 1, 2, \dots$$

Da der Wert  $f(t_{i+1}, u_{i+1})$  nicht bekannt ist, lässt sich die "neue" Näherung  $u_{i+1}$  nur iterativ bestimmen. Der numerische Aufwand wächst also beträchtlich. Allerdings sind solche Verfahren für die numerische Lösung steifer Systeme deutlich besser geeignet, da die impliziten Methoden nicht so starke Einschränkungen für Schrittweite  $h$  wie explizite haben.

### 3.5 Was muss ein guter numerischer Integrator heutzutage können ?

- Schrittweitensteuerung: darunter versteht man die häufig sehr vorteilhafte Veränderung der Schrittweite  $h > 0$  in Abhängigkeit von der erzielten Genauigkeit von Punkt zu Punkt.
- Soll entweder implizit sein oder in der Lage sein umzuschalten – in Abhängigkeit von der Steifigkeit des Systems.