HUMBOLDT-UNIVERSITÄT ZU BERLIN
INSTITUT FÜR THEORETISCHE BIOLOGIE

THEORETISCHE BIOLOGIE MODELLIERUNG

Prof. Hanspeter Herzel
Dr. Grigory Bordyugov
Sarah Lück

Vorlesung: Montag 08:30
Übung: Dienstag 18:00, ITB

**10. Übung** Ausgabe: 6.1.14, Abgabe: 13.1.14, in der Vorlesung
*Beschriften Sie bitte Ihre Abgabe mit Namen und Matrikelnummer*

---

NUMERISCHE INTEGRATIONSVERFAHREN

Betrachte folgende Differentialgleichung für die Funktion $x(t)$ mit der Anfangsbedingung:

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = f(x), \qquad x(t=0) = 1, \tag{1}$$

mit $f(x) = -x$. Das Hauptziel folgender Aufgaben besteht darin, den Wert $x(t=1)$ mithilfe verschiedener numerischer Integrationsverfahren zu ermitteln und diesen mit dem analytisch bekannten Wert zu vergleichen.

(a) *Das explizite Euler-Verfahren.* Aus der Approximation

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} \approx \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}, \qquad \Delta t \text{ ist klein, aber endlich,} \tag{2}$$

ergibt sich *das explizite Euler-Integrationsverfahren*:

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot f(x(t)). \tag{3}$$

Beachte, daß in Gl. (3) die Funktion $f(x)$ an dem "alten" Zeitpunkt $x(t)$ (und nicht an $x(t+\Delta t)$!) ausgerechnet wird. Daher wird der neue Wert $x(t+\Delta t)$ *explizit* durch Gl. (3) bestimmt.

1. Ausgehend von Gl. (1) und Gl. (2), leite Gl. (3) her.
2. Ausgehend von Gl. (3) und $f(x) = -x$, leite folgenden Ausdruck für $x(t+\Delta t)$:

$$x(t+\Delta t) = (1-\Delta t)\, x(t).$$

3. Mithilfe des Taschenrechners bzw. Computers führe einzelne Schritte dieses Verfahrens aus und berechne $x(t=1)$ mit drei verschiedenen Schrittweiten $\Delta t = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$.
*NB:* Die Anzahl der einzelnen Euler-Schritte, um den Wert $x(t=1)$ zu berechnen, hängt von der Wahl von $\Delta t$ ab!

(b) *Das implizite Euler-Verfahren.* Der Unterschied bei dem *impliziten* Verfahren besteht darin, daß die Funktion $f(x)$ auf der rechten Seite Gl. (3) an dem “neuen”, noch unbekannten wert $x(t+\Delta t)$ berechnet wird:

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot f(x(t+\Delta t)). \tag{4}$$

Daher wird der unbekannte Wert $x(t+\Delta t)$ *implizit* durch Gl. (4) bestimmt.

1. Ausgehend von Gl. (4) mit $f(x) = -x$ leite folgenden Ausdruck für $x(t+\Delta t)$ her:

$$x(t+\Delta t) = \frac{x(t)}{1+\Delta t}.$$

2. Mithilfe des Taschenrechners bzw. Computers führe einzelne Schritte des impliziten Verfahrens aus und berechne $x(t=1)$ mit drei verschiedenen Schrittweiten $\Delta t = \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}$.

(c) *Die Midpoint-Methode.* Hierbei wird das explizite Euler-Verfahren durch einen zusätzlichen “halben Schritt” verbessert: die Funktion $f(x)$ wird an der Zwischenstelle $x(t+\Delta t/2)$ ausgerechnet. Den $x$-Wert an der Zwischenstelle gewinnt man anhand des einfachen Euler-Schrittes mit der halben Schrittweite $\Delta t/2$. Das führt zu folgender Formel:

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot f\underbrace{\left(x + \frac{\Delta t}{2} f(x(t))\right)}_{\approx x(t+\Delta t/2)}.$$

Berechne $x(t=1)$ mithilfe des Midpoint-Verfahrens mit $\Delta t = \frac{1}{2}$ und vergleiche dieses mit den Ergebnissen der Euler-Methode.

Ist das eine explizite oder implizite Integrationsmethode?

(d) *Die Runge-Kutta Methode 4. Ordnung* stellt eine weitere Verbesserung der obigen Verfahren dar. Der Einzelschritt dieses Verfahrens lautet:

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6},$$

wobei

$$k_1 = f(x(t)), \qquad k_2 = f\left(x(t) + \frac{\Delta t}{2} k_1\right), \qquad k_3 = f\left(x(t) + \frac{\Delta t}{2} k_2\right), \qquad k_4 = f(x(t) + \Delta t k_3).$$

Berechne $x(t=1)$ mithilfe dieses Verfahrens mit $\Delta t = \frac{1}{2}$.

Mache dir klar, welche Bedeutung die Koeffizienten $k_{1,2,3,4}$ haben.

(e) Vergleiche die Ergebnisse aller vier Methoden mit dem analytisch bekannten Wert $x(t=1)$.