

**2. Übung zur Vorlesung  
Modellierung und Simulation 3**

(WS 2013/14)

Prof. Dr. G. Queisser

Markus Breit, Martin Stepniewski

**Abgabe: Dienstag, 12.11.2013, 12:00 Uhr**

## Mathematische Grundlagen

In einer **gewöhnlichen Differentialgleichung** kommen nur Ableitungen nach einer Variablen vor, typischerweise der Zeit  $t$ . Man definiert allgemein:

**Definition 1.** *Unter einem **Anfangswertproblem (AWP) 1. Ordnung** versteht man die Suche nach einer stetig differenzierbaren Funktion  $u : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ , die folgenden Bedingungen genügt:*

$$\begin{aligned}u'(t) &= f(t, u(t)) & \forall t \in [T_0, T] \subset I \\u(T_0) &= u_0\end{aligned}$$

mit Startzeit  $T_0$ , Anfangswert  $u_0$  und einer stetigen Funktion  $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ .

**Definition 2.** *Unter einem **Einschrittverfahren (ESV)** zu einem AWP 1. Ordnung versteht man ein Verfahren, das ausgehend von der Startzeit  $T_0$  und dem Anfangswert  $u_0$  diskrete Näherungswerte  $u_\tau(t + \tau)$  für die exakte kontinuierliche Lösung  $u(t + \tau)$  gemäß folgender Vorschrift erzeugt:*

$$\begin{aligned}u_\tau(T_0) &= u_0 \\u_\tau(t + \tau) &= u_\tau(t) + \tau \cdot \phi_\tau(t, u_\tau(t), u_\tau(t + \tau))\end{aligned}$$

mit der sogenannten **Verfahrensfunktion**  $\phi_\tau$ .

Hängt  $\phi_\tau$  nicht von der Lösung  $u_\tau(t + \tau)$  im nächsten Zeitschritt ab, so spricht man von einem **expliziten** ESV, andernfalls von einem **impliziten** ESV.

**Definition 3.** *Ist die Funktion  $u(t) : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$  in der Umgebung  $I$  zweimal stetig differenzierbar, so lässt sie sich für  $[t, t + \tau] \subset I$  durch die folgende sogenannte **Taylor-Entwicklung** darstellen:*

$$u(t + \tau) = u(t) + \tau u'(t) + \frac{\tau^2}{2} u''(\xi)$$

mit einem geeigneten Zwischenpunkt  $\xi \in [t, t + \tau]$ .

D.h. die Funktion  $u$  lässt sich mithilfe ihrer Ableitungen darstellen.

**Definition 4.** Beim **expliziten Eulerverfahren** zu einem AWP 1. Ordnung wird die gesuchte Lösung  $u(t)$  mithilfe ihrer ersten Ableitung approximiert. Die Verfahrensfunktion ist explizit gegeben durch  $\phi_\tau(t, u_\tau(t)) := f(t, u_\tau(t))$ . Damit lautet die Iterationsvorschrift:

$$u_\tau(t + \tau) = u_\tau(t) + \tau \cdot f(t, u_\tau(t)).$$

**Definition 5.** Beim **impliziten Eulerverfahren** zu einem AWP 1. Ordnung wird die gesuchte Lösung  $u(t)$  ebenfalls mithilfe ihrer ersten Ableitung approximiert. Allerdings ist die Verfahrensfunktion implizit gegeben durch  $\phi_\tau(t, u_\tau(t + \tau)) := f(t, u_\tau(t + \tau))$ . D.h. also, zur Berechnung des Funktionswertes  $u(t + \tau)$  wird die Ableitung an der zu berechnenden Stelle  $t + \tau$  verwendet. Damit lautet die Iterationsvorschrift:

$$u_\tau(t + \tau) = u_\tau(t) + \tau \cdot f(t, u_\tau(t + \tau)).$$

**Definition 6.** Sei  $\phi_\tau(t, u_\tau(t), u_\tau(t + \tau))$  eine Verfahrensfunktion und  $u(t)$  die exakte Lösung des AWP's 1. Ordnung. Dann ist der **lokale Diskretisierungsfehler** gegeben durch

$$\theta_\tau(t, u(t), u(t + \tau)) = \frac{u(t + \tau) - u(t)}{\tau} - \phi_\tau(t, u(t), u(t + \tau))$$

Der lokale Diskretisierungsfehler beantwortet die Frage, wie stark die exakte Lösung der DGL im Näherungsverfahren bei Ausführung eines Schrittes, also **lokal**, verfälscht wird.

**Definition 7.** Ein ESV heißt **konsistent** genau dann, wenn

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \theta_\tau = 0 \quad \text{für alle } t_i := T_0 + i\tau \in [T_0, T], \quad i = 0, \dots, \frac{T - T_0}{\tau}.$$

**Definition 8.** Ein ESV hat die **Konsistenzordnung**  $p$  genau dann, wenn

$$\theta_\tau = O(\tau^p) \quad \text{für alle } t_i := T_0 + i\tau \in [T_0, T], \quad i = 0, \dots, \frac{T - T_0}{\tau}.$$

**Definition 9.** Sei  $u_\tau$  die durch ein ESV bestimmte diskrete Lösung des AWP's 1. Ordnung und  $u$  sei die exakte Lösung. Dann ist der **globale Diskretisierungsfehler** gegeben durch

$$e_\tau := u_\tau(t_i) - u(t_i) \quad , t_i := T_0 + i\tau$$

Der globale Diskretisierungsfehler in einem Zeitpunkt  $t_i$  repräsentiert die Akkumulation der lokalen Diskretisierungsfehler im Zuge der iterativen Lösung bis  $t_i$ .

**Definition 10.** Ein ESV heißt **konvergent** genau dann, wenn

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} e_\tau = 0 \quad \text{für alle } t_i := T_0 + i\tau \in [T_0, T], \quad i = 0, \dots, \frac{T - T_0}{\tau}.$$

**Definition 11.** Ein ESV hat die **Konvergenzordnung**  $p$  genau dann, wenn

$$e_\tau = O(\tau^p) \quad \text{für alle } t_i := T_0 + i\tau \in [T_0, T], \quad i = 0, \dots, \frac{T - T_0}{\tau}.$$

## Aufgaben

### Aufgabe 2.1 (3 Punkte) (*Konsistenzordnung des expliziten Eulerverfahrens*)

Zeigen Sie unter Verwendung der *Taylor-Entwicklung*, dass das explizite Eulerverfahren *konsistent* ist und die *Konsistenzordnung* 1 besitzt, wenn die Lösung  $u$  der AWA zweimal stetig differenzierbar ist.

### Aufgabe 2.2 (1+1+1+1) (*Stabilität: explizites und implizites Eulerverfahren*)

Ebenso wie das explizite Eulerverfahren besitzt auch das implizite Eulerverfahren die Konsistenzordnung 1. Der Unterschied zwischen explizitem und implizitem Verfahren liegt in der *Stabilität*. Zur deren Untersuchung betrachtet man das folgende **Test-Anfangswert-Problem**:

$$\begin{aligned}u'(t) &= -\alpha u(t), & \alpha > 0 \\u(t_0) &= u_0\end{aligned}$$

mit der exakten Lösung  $u(t) = u_0 e^{-\alpha t}$ , die für  $t \rightarrow \infty$  gegen Null konvergiert.

(i) Zeigen Sie, dass die Iterationsvorschrift des expliziten Eulerverfahrens die Näherungslösung

$$u(t_{i+1}) = (1 - \alpha\tau)^{i+1} u_0$$

in Abhängigkeit vom Startwert  $u_0$  liefert, wobei  $t_i := t + i\tau$ .

(ii) Zeigen Sie, dass die Iterationsvorschrift des impliziten Eulerverfahrens die Näherungslösung

$$u(t_{i+1}) = \left( \frac{1}{1 + \alpha\tau} \right)^{i+1} u_0.$$

in Abhängigkeit vom Startwert  $u_0$  liefert, wobei  $t_i := t + i\tau$ .

(iii) Welche Beziehung müssen  $\alpha$ ,  $\tau$  erfüllen, damit die Lösung des expliziten Eulerverfahrens

- (a) konvergiert bzw. divergiert,
- (b) oszilliert?

(iv) Welche Bedingungen an die Schrittweite  $\tau$  sind beim impliziten Eulerverfahren zu beachten, damit es konvergiert?

**Aufgabe 2.3 (1+2+2+4 Punkte)** (*Membranpotential*)

(i) Nutzen Sie die in der Vorlesung hergeleitete Formel, um das Membranpotential bei den Gleichgewichtskonzentrationen von  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  und  $\text{Cl}^-$  aus Tabelle 1 zu bestimmen.

(ii) Um zu gegebenen Gleichgewichtskonzentrationen ein Membranpotential berechnen zu können, müssen die relativen Permeabilitäten der beteiligten Ionensorten bekannt sein. Wie würden Sie vorgehen, um diese zu bestimmen? Es darf Literatur verwendet werden.

(iii) In der Vorlesung wurde das Ruhe-Membranpotential in einem rein univalenten Ionen-Regime aus der Lösung der Goldman-Hodgkin-Katz-Gleichung hergeleitet. Orientieren Sie sich an den dabei vollzogenen Schritten, um das Membranpotential in einem Regime mit uni- **und** divalenten Ionen zu bestimmen. Sie dürfen bereits in der Vorlesung gezeigte Zwischenergebnisse natürlich verwenden.

**Tip:** Quadratische Ergänzung. Zur Vermeidung von Schreibaarbeit sollten große Ausdrücke nach Möglichkeit durch neue Variablen ersetzt werden.

(iv) Eine Membran der Dicke  $d = 100 \text{ \AA}$  trenne zwei gleich große Volumina wie in Abb. 1 ( $l = 5 \text{ cm}$ ). Auf der einen Seite befinde sich eine 1-molare wässrige Kochsalz-Lösung, die andere enthalte nur Wasser. Die Membran sei permeabel für  $\text{Na}^+$ , nicht aber für  $\text{Cl}^-$ . Bestimmen Sie das Membranpotential, das sich im Gleichgewichtszustand einstellt.

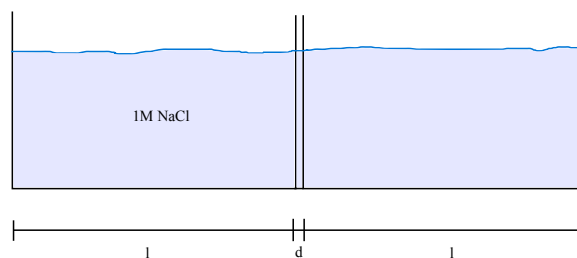


Abbildung 1: Aufbau für Aufgabe 2.3 (iv)

**Tip:** Das Membranpotential ist die Differenz der Potentialwerte auf beiden Seiten. Für das Potential  $\Phi$  gilt die Maxwell-Gleichung  $-\Delta\Phi = \frac{\rho}{\epsilon_0}$  (zum Laplace-Operator: vgl. Aufgabe 1.5 (i)) mit der Vakuum-Permittivität  $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ A s V}^{-1} \text{ m}^{-1}$  und der Ladungsdichte  $\rho$  (in  $\text{C m}^{-3}$ ).

Gehen Sie am besten wie folgt vor:

1. Stellen Sie eine Gleichung auf, die das Membranpotential im Gleichgewichtszustand in Abhängigkeit von den dann vorherrschenden Innen- und Außenraumkonzentrationen angibt.
2. Bestimmen Sie unter Nutzung des Satzes von Gauß und der gegebenen Maxwell-

Gleichung den Verlauf des Potentials innerhalb der Membran (gehen Sie dort von Ladungsfreiheit aus) sowie dessen Gradienten an den Seiten der Membran und drücken Sie damit wiederum das Membranpotential aus. Behandeln Sie die Membran-Seiten als Ebenen mit unendlicher Ausdehnung. Nutzen Sie Symmetrien in der Geometrie und der Ladung und ggf. das Superpositionsprinzip.

3. Finden Sie eine geeignete dritte Gleichung und lösen Sie das System (ggf. mithilfe eines Nullstellensuchverfahrens – etwa: Newton-Verfahren).

**Aufgabe 2.4 (4 oder mehr Bonus-Punkte)** (*Programmieraufgabe*)

Schreiben Sie ein Programm (Java, Python, Matlab, C(++)), das den zeitlichen Verlauf des Membranpotentials von der Ausgangssituation bis zur Einstellung des Gleichgewichts in Aufgabe 2.3 (iv) berechnet. Plotten Sie die Lösung.

**Tip:** Rechnen Sie eindimensional, nutzen Sie Ergebnisse aus Aufgabe 2.3 (iv) und der Vorlesung, gehen Sie davon aus, dass sich die Ionen in den Volumina unendlich schnell verteilen, während der Diffusionskoeffizient von  $\text{Na}^+$  in der Membran  $1330 \mu\text{m}^2 \text{s}^{-1}$  beträgt. Verwenden Sie ein explizites Euler-Verfahren und suchen Sie eine geeignete Zeitschrittweite. Optional, wenn Sie es sich zutrauen, verwenden Sie ein implizites Euler-Verfahren und behandeln Sie Nicht-Linearitäten ggf. mit einem Newton-Verfahren.

Verwenden Sie aussagekräftige Bezeichner und geben Sie Ihren gut kommentierten Code nach Möglichkeit ausgedruckt *und* per E-Mail ab.

Tabelle 1: *Ausgewählte Konzentrationen und Permeabilitäten*

	relative <b>Permeabilität</b>	<b>Innenraum</b> mM	<b>Außenraum</b> mM
<b>K<sup>+</sup></b>	1.0	400	10
<b>Na<sup>+</sup></b>	0.04	50	460
<b>Mg<sup>2+</sup></b>	0.36	10	54
<b>Cl<sup>-</sup></b>	0.005	115	560