

Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen

Oliver Ernst

Professur Numerische Mathematik

Wintersemester 2014/15



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

- ① Einleitung
 - 1.1 Volterras Prinzip
 - 1.2 Begriffe und theoretische Resultate
 - 1.3 Lineare Differenzgleichungen
 - 1.4 Matrixfunktionen
 - 1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung
 - 1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren
 - 1.7 Weitere Beispiele
- ② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
 - 2.1 Das Euler-Verfahren
 - 2.2 Eine Sammlung von Beispielverfahren
 - 2.3 Konvergenz, Konsistenz und Stabilität
 - 2.4 Der Hauptsatz
 - 2.5 Einschrittverfahren
 - 2.6 Numerische Experimente
- ③ Lineare Mehrschrittverfahren
 - 3.1 Begriffe
 - 3.2 Die erste Dahlquist-Barriere

- 3.3 Die Verfahren von Adams-Bashforth und Adams-Moulton
- 3.4 Prädiktor-Korrektor-Verfahren
- 3.5 Absolute Stabilität
- 3.6 BDF-Verfahren

- ④ Runge-Kutta-Verfahren
 - 4.1 Konstruktion
 - 4.2 Konsistenzordnung
 - 4.3 Absolute Stabilität
 - 4.4 Eingebettete Runge-Kutta-Verfahren
 - 4.5 Implizite und halb-implizite Verfahren
 - 4.6 Kollokationsmethoden

- ⑤ Steife Differentialgleichungen
 - 5.1 Was sind steife Differentialgleichungen?
 - 5.2 Stabilitätsbegriffe
 - 5.3 Ordnungssterne
 - 5.4 Lineare MSV für steife Probleme
 - 5.5 RKV für steife Probleme

5.6 Nichtlineare Stabilitätstheorie

- 1 Einleitung
- 2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme
- 3 Lineare Mehrschrittverfahren
- 4 Runge-Kutta-Verfahren
- 5 Steife Differentialgleichungen

1 Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

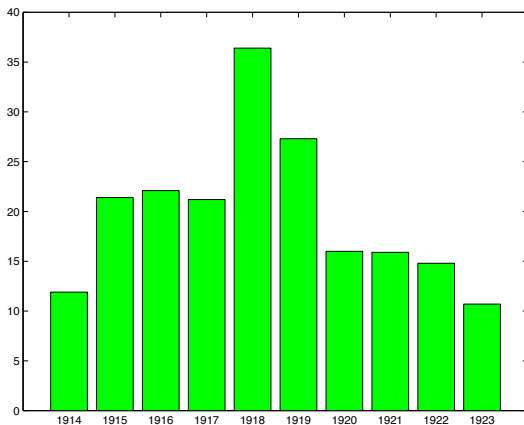
4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Volterras Prinzip

Umberto d'Anconas Beobachtung

Der Biologe Umberto d'Ancona (1896–1964) stellte 1925 den prozentualen Anteil der Haie am Gesamtfang (Speisefische und Haie) im Hafen von Triest fest:



Benachteiligt eingeschränkter Fischfang (1. Weltkrieg) die Speisefische?

Volterras Prinzip

Volterras Räuber-Beute-Modell

D'Ancona konsultierte den Mathematiker Volterra¹, der die Populationsdynamik wie folgt modellierte: Seien

$x(t)$: Beutepopulation zur Zeit t (Speisefische)

$y(t)$: Räuberpopulation zur Zeit t (Haie).

Ohne Räuber würde sich die Beute nach dem **Malthusianischen² Gesetz**

$$x'(t) = a x(t) \quad (\text{mit einer Konstanten } a > 0),$$

vermehrten, d.h. der Zuwachs wäre proportional zum Bestand bzw. das Wachstum wäre exponentiell

$$x(t) = x(0) \exp(at) \quad \text{für } t \geq 0$$

(eingeschränkt realistisch, falls Population nicht sehr dicht und ausreichend Nahrung vorhanden ist).

¹Vito Volterra (1860–1940)

²Thomas Malthus (1766–1834)

Volterras Prinzip

Interaktion von Räuber und Beute

Anzahl Räuber-Beute-Kontakte (pro Zeiteinheit):

$$b x(t) y(t) \quad (\text{mit einer Konstanten } b > 0).$$

$$\text{Insgesamt:} \quad x'(t) = a x(t) - b x(t) y(t).$$

$$\text{Analog:} \quad y'(t) = -c y(t) + d x(t) y(t), \quad \text{mit weiteren Konstanten } c, d > 0.$$

Wir erhalten ein **System zweier GDGen**.

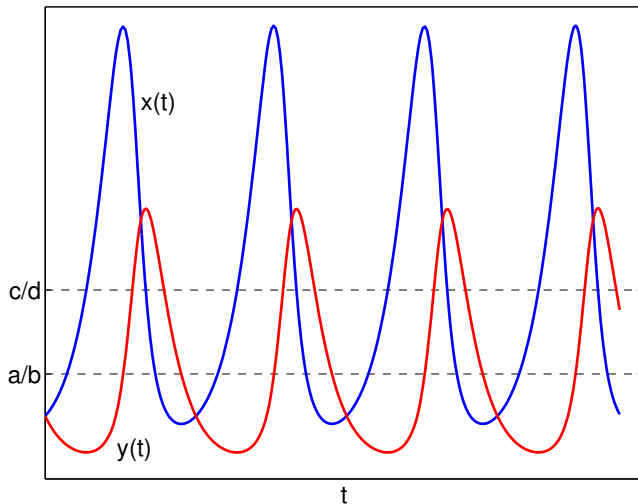
Man kann zeigen: dessen Lösungen sind **periodisch**: d.h. $\exists T > 0$ sodass

$$x(t + T) = x(t), \quad y(t + T) = y(t) \quad \text{für alle } t.$$

$$\text{Mittelwerte:} \quad \bar{x} := \frac{1}{T} \int_0^T x(t) dt = \frac{c}{d}, \quad \bar{y} := \frac{1}{T} \int_0^T y(t) dt = \frac{a}{b}.$$

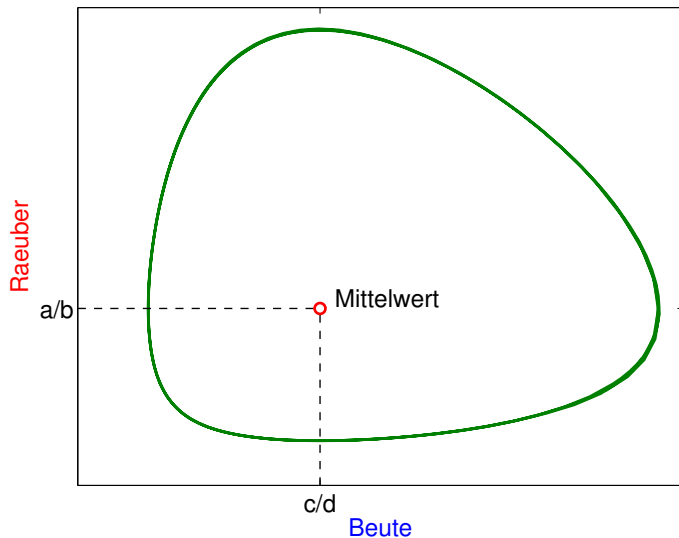
Volterra's Prinzip

Zeitlicher Verlauf der Populationen



Volterra's Prinzip

Darstellung in der Phasebene



Volterras Prinzip

Auswirkung von Fischfang

Berücksichtige Fischfang:

$$\begin{aligned}x'(t) &= ax(t) - bx(t)y(t) - ex(t) &= (a-e)x(t) - bx(t)y(t), \\y'(t) &= -cy(t) + dx(t)y(t) - ey(t) &= -(c+e)y(t) + dx(t)y(t),\end{aligned}\quad (e > 0).$$

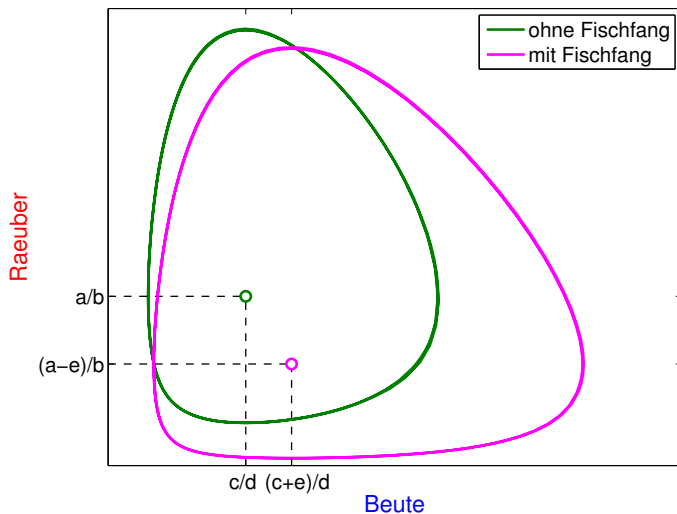
Gleiches System mit neuen Koeffizienten: $a \rightarrow a - e$ und $c \rightarrow c + e$.

$$\text{Mittelwerte:} \quad \frac{c+e}{d} > \frac{c}{d} \quad (\text{Beute}), \quad \frac{a-e}{b} < \frac{a}{b} \quad (\text{Räuber}).$$

Volterras Prinzip: Moderater Fischfang ($e < a$) steigert die durchschnittliche Zahl der Speisefische und reduziert die durchschnittliche Zahl der Haie.

Volterra's Prinzip

Darstellung in der Phaseebene



① Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

② Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

③ Lineare Mehrschrittverfahren

④ Runge-Kutta-Verfahren

⑤ Steife Differentialgleichungen

Einen Ausdruck der Form

$$F(t, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0 \quad (\text{GDG})$$

mit einer Funktion $F : \mathbb{R}^{n+2} \supset M \rightarrow \mathbb{R}$ nennen wir eine **gewöhnliche Differentialgleichung** (GDG) **n -ter Ordnung**. Eine Funktion $y : \mathbb{R} \supset I \rightarrow \mathbb{R}$ heißt **Lösung** von (GDG) **über dem Intervall I** , wenn $y \in C^n(I)$ ist und für alle $t \in I$ gilt

$$F(t, y(t), y'(t), y''(t), \dots, y^{(n)}(t)) = 0.$$

- (GDG) besitzt die **Ordnung n** , weil n die Ordnung der höchsten auftretenden Ableitung ist.
- Sie heißt **gewöhnlich**, weil nur Ableitungen der gesuchten Funktion y nach einer Variablen auftreten.
- (GDG) heißt **implizit** — im Gegensatz zu einer **expliziten** GDG n -ter Ordnung, die nach der höchsten Ableitung von y aufgelöst ist:

$$y^{(n)} = f(t, y, y', \dots, y^{(n-1)}).$$

Wir werden fast ausschließlich **Systeme** von expliziten GDGen erster Ordnung betrachten (warum wir uns auf Systeme erster Ordnung beschränken können, wird später erklärt):

$$\begin{aligned}y_1' &= f_1(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\y_2' &= f_2(t, y_1, y_2, \dots, y_n) \\&\vdots = \vdots \\y_n' &= f_n(t, y_1, y_2, \dots, y_n)\end{aligned}\tag{DG}$$

mit den n unbekanntenen Funktionen y_1, y_2, \dots, y_n . Jedes System von n Funktionen

$$y_1 = y_1(t), \dots, y_n = y_n(t) \in C^1(I),$$

das (DG) für alle $t \in I$ erfüllt, heißt **Lösung** von (DG) über I .

Das System

$$\begin{aligned}y_1' &= 1 \\y_2' &= 2y_1\end{aligned}$$

besitzt die Lösungen

$$y_1(t) = t + \alpha, \quad y_2(t) = t^2 + 2\alpha t + \beta \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{R})$$

über $(-\infty, \infty)$.

Für eine eindeutige Lösung: **Anfangsbedingungen**, z.B. $y_1(0) = 1, y_2(0) = 2$. Dann ist $y_1(t) = t + 1, y_2(t) = t^2 + 2t + 2$ die einzige Lösung.

Allgemein: Die Aufgabenstellung, eine Lösung von (DG) zu finden, die die Anfangsbedingung

$$y_1(t_0) = y_{0,1}, \dots, y_n(t_0) = y_{0,n} \quad (\text{AB})$$

erfüllt, heißt **Anfangswertproblem** (AWP) oder Anfangswertaufgabe für die gewöhnliche Differentialgleichung (DG).

Mit der Vektornotation

$$\mathbf{y} := \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{f} := \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}_0 := \begin{bmatrix} y_{0,1} \\ \vdots \\ y_{0,n} \end{bmatrix},$$

ergibt sich die Kurzschreibweise

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad (\text{DG}')$$

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \quad (\text{AB}')$$

Bemerkung. GDGen höherer Ordnung lassen sich in (äquivalente) Systeme von GDGen erster Ordnung umschreiben: Aus $y'''' + 3y'' + y' = \sin(t)$ wird etwa

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ -3y_3 - y_2 + \sin(t) \end{bmatrix}$$

mit den neuen Variablen $y_1 = y$, $y_2 = y_1' = y'$, $y_3 = y_2' = y''$.

Die explizite Abhängigkeit der rechten Seite von der unabhängigen Variable (hier t) kann durch Hinzunahme einer zusätzlichen Gleichung bzw. Komponente des Lösungsfunktionsvektors \mathbf{y} beseitigt werden:

$$y_4(t) = t \quad (\text{d.h. } y_4'(t) \equiv 1), \quad y_4(t_0) = t_0.$$

Im obigen Beispiel resultiert dies in der **autonomen** Differentialgleichung $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y})$, oder genauer:

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{y}(t)), \quad \mathbf{f}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_3 \\ -3y_3 - y_2 + \sin(y_4) \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Satz 1.1 (Picard-Lindelöf)

Gegeben ist die Anfangswertaufgabe

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \quad (\text{AWP})$$

Die rechte Seite \mathbf{f} sei stetig im 'Quader'

$$Q := \{(t, \mathbf{y}) : |t - t_0| \leq a, \|\mathbf{y} - \mathbf{y}_0\| \leq b\}, \quad Q \subset \mathbb{R}^{n+1},$$

und es sei $M := \max\{\|\mathbf{f}(t, \mathbf{y})\| : (t, \mathbf{y}) \in Q\}$.

Außerdem erfülle \mathbf{f} in Q die **Lipschitz-Bedingung**

$$\|\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(t, \tilde{\mathbf{y}})\| \leq L\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\| \quad \forall (t, \mathbf{y}), (t, \tilde{\mathbf{y}}) \in Q. \quad (\text{Lip})$$

Dann besitzt das Problem (AWP) genau eine Lösung über $I := [t_0 - \alpha, t_0 + \alpha]$, wobei $\alpha = \min\{a, b/M\}$.

Emile Picard (1856–1941), Ernst Lindelöf (1870–1946), Rufolf Lipschitz (1832–1903).

Bemerkungen.

1. In der gesamten Vorlesungen wird vorausgesetzt, dass die fundamentale Bedingung (Lip) erfüllt ist.
2. (AWP) besitzt in $[t_0 - a, t_0 + a]$ eine eindeutige Lösung, wenn f die Bedingung (Lip) in $\tilde{Q} = \{(t, \mathbf{y}) : |t - t_0| \leq a, \|\mathbf{y}\| < \infty\}$ erfüllt.
3. Ist f auf Q bez. \mathbf{y} stetig differenzierbar und bezeichnet $\mathbf{f}_y = [\partial f_i / \partial y_j]_{1 \leq i, j \leq n}$ die zugehörige Jacobi-Matrix, dann folgt aus dem Mittelwertsatz, dass die Voraussetzungen von Satz 1.1 mit

$$L = \sup_{(t, \mathbf{y}) \in Q} \|\mathbf{f}_y(t, \mathbf{y})\| < \infty$$

erfüllt sind.

4. (AWP) besitzt auch dann noch Lösungen, wenn nur vorausgesetzt wird, dass f stetig ist auf Q (Existenzsatz von Peano³). Deren Eindeutigkeit ist aber nicht mehr gesichert.

³Giuseppe Peano (1858–1932)

Theoretische Grundlagen

Existenz- und Eindeutigkeit der Lösung: Beispiel

Beispiel:

$$y' = f(t, y) = \sqrt{y}, \quad y(0) = 0, \quad Q = \mathbb{R} \times [0, \infty),$$

mit den Lösungen

$$y_\lambda(t) = \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq \lambda, \\ (t - \lambda)^2/4, & t \geq \lambda, \end{cases} \quad (\lambda \geq 0).$$

Satz 1.2

Die Anfangswertaufgabe

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0,$$

erfülle die Voraussetzungen von Satz 1.1. Über eine weitere Anfangswertaufgabe

$$\mathbf{z}' = \mathbf{g}(t, \mathbf{z}), \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0,$$

setzen wir nur voraus, dass g stetig in Q ist. Sind dann \mathbf{y} und \mathbf{z} Lösungen dieser Anfangswertaufgabe über dem Intervall I und gilt

$$\|\mathbf{y}_0 - \mathbf{z}_0\| \leq \gamma \quad \text{sowie} \quad \|\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{g}(t, \mathbf{y})\| \leq \delta \quad \forall (t, \mathbf{y}) \in Q,$$

so folgt für $t \in I$

$$\|\mathbf{y}(t) - \mathbf{z}(t)\| \leq \gamma e^{L(t-t_0)} + \frac{\delta}{L} \left(e^{L(t-t_0)} - 1 \right).$$

1 Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Lineare Differenzgleichungen

Bezeichnungen

Eine wichtige Rolle werden **lineare Differenzgleichungen**

$$y_{n+k} + \alpha_{k-1}y_{n+k-1} + \cdots + \alpha_0y_n = \beta_{n+k} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (\text{DzG})$$

spielen.

- Genauer spricht man hier von einer linearen Differenzgleichung der **Ordnung** k mit **konstanten Koeffizienten** (die α 's hängen nicht von n ab). (O.B.d.A. sei $\alpha_0 \neq 0$).
- Die Gleichung heißt **homogen**, wenn $\beta_{n+k} = 0$ für alle n , andernfalls **inhomogen**.
- Jede Folge $\{y_n\}_n$, die (DzG) erfüllt, heißt eine **Lösung** von (DzG).
- Gibt man sich k Startwerte y_0, y_1, \dots, y_{k-1} (beliebig) vor, kann man sich mit (DzG) **rekursiv** eine solche Lösung berechnen.

Lemma 1.3

Die Lösungsmenge einer homogenen linearen Differenzengleichung der Ordnung k ist ein Vektorraum der Dimension k .

Besitzt die Differenzengleichung darüber hinaus konstante Koeffizienten, so kann man eine Basis dieses Lösungsraums mit Hilfe der Nullstellen des zugehörigen **charakteristischen Polynoms**

$$p_k(\zeta) = \zeta^k + \alpha_{k-1}\zeta^{k-1} + \cdots + \alpha_1\zeta + \alpha_0$$

angeben: Bezeichnen λ_j ($1 \leq j \leq \ell$) die Nullstellen von p (mit Vielfachheiten m_j , $\sum_{j=1}^{\ell} m_j = k$), so bilden die k Folgen

$$\{\lambda_j^n\}_n, \{n\lambda_j^{n-1}\}_n, \dots, \{n(n-1)\dots(n-m_j+2)\lambda_j^{n-m_j+1}\}_n \quad (j = 1, 2, \dots, \ell)$$

eine solche Basis.

Lemma 1.4

Für die homogene Differenzgleichung

$$y_{n+k} + \alpha_{k-1}y_{n+k-1} + \cdots + \alpha_0y_n = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (*)$$

sind die folgenden drei Aussagen äquivalent :

- (1) Jede Lösung $\{y_n\}_n$ von $(*)$ ist beschränkt.
- (2) Für jede Lösung $\{y_n\}_n$ von $(*)$ ist $\{y_n/n\}_n$ eine Nullfolge.
- (3) Das zugehörige charakteristische Polynom p erfüllt die sogenannte **Stabilitätsbedingung**:

$$\begin{aligned} p(\lambda) = 0 &\Rightarrow |\lambda| \leq 1, \\ p(\lambda) = 0 \text{ und } |\lambda| = 1 &\Rightarrow \lambda \text{ ist einfach.} \end{aligned} \quad (\text{Stab})$$

Lemma 1.5

Es gebe Konstanten $M, K \geq 0$, so dass die ersten Glieder der Vektorfolge $\{\mathbf{y}_n\}_n$ die Ungleichung

$$\|\mathbf{y}_{n+1}\| \leq K\|\mathbf{y}_n\| + M \quad (n = 0, 1, \dots, n_0)$$

erfüllen. Dann gilt die Abschätzung

$$\|\mathbf{y}_{n+1}\| \leq K^{n+1}\|\mathbf{y}_0\| + \begin{cases} M \frac{K^{n+1} - 1}{K - 1}, & \text{für } K \neq 1, \\ (n + 1)M, & \text{für } K = 1, \end{cases} \quad (n = 0, 1, \dots, n_0).$$

($\|\cdot\|$ bezeichnet eine beliebige Norm.)

Lineare Differenzgleichungen

Lösung der inhomogenen Gleichung

Gesucht ist eine explizite Darstellung der Lösung $\{z_n\}_n$ der inhomogenen Differenzgleichung

$$y_{n+k} + \alpha_{k-1}y_{n+k-1} + \cdots + \alpha_1y_{n+1} + \alpha_0y_n = \beta_{n+k} \quad (n = 0, 1, \dots),$$

die die k Anfangsbedingungen $z_n = y_n$ ($n = 0, 1, \dots, k-1$) erfüllt.

Antwort: Bezeichnen $\{y_n^{(j)}\}_n$, $j = 0, 1, \dots, k-1$, die Lösungen der homogenen Gleichung

$$y_{n+k} + \alpha_{k-1}y_{n+k-1} + \cdots + \alpha_1y_{n+1} + \alpha_0y_n = 0 \quad (n = 0, 1, \dots),$$

die die Anfangsbedingungen $y_n^{(j)} = \delta_{n,j}$ (Kronecker-Symbol) ($n, j = 0, 1, \dots, k-1$) erfüllen, so ist

$$z_n = \sum_{j=0}^{k-1} y_j y_n^{(j)} + \sum_{j=0}^{n-k} \beta_{j+k} y_{n-j-1}^{(k-1)} \quad (n = 0, 1, \dots),$$

wobei $\beta_{n+k} = 0$ und $y_n^{(k-1)} = 0$ für $n < 0$ gesetzt wird.

1 Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Matrixfunktionen

In diesem Abschnitt sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ stets eine quadratische Matrix. Ausserdem sei eine Funktion

$$f : D \rightarrow \mathbb{C}, \quad \mathbb{C} \subset D,$$

gegeben. Wir klären hier, wann und wie die Matrix

$$f(A) \in \mathbb{C}^{n \times n}$$

definiert ist, und wiederholen einige ihrer Eigenschaften. Im Zusammenhang mit GDGen von Interesse ist besonders $\exp(A)$, die **Exponentialfunktion** angewandt auf A .

Für einige elementare Funktionen f ist $f(A)$ kanonisch gegeben. Ist z.B. $f \in \mathcal{P}_m$ ein Polynom vom Grad m ,

$$f(\lambda) = \alpha_0 + \alpha_1 \lambda + \alpha_2 \lambda^2 + \cdots + \alpha_m \lambda^m \quad (\alpha_j \in \mathbb{C}, j = 0, 1, \dots, m),$$

so ist

$$f(A) = \alpha_0 I + \alpha_1 A + \alpha_2 A^2 + \cdots + \alpha_m A^m \in \mathbb{C}^{n \times n}.$$

Matrixfunktionen

Eigenschaften von $f(A)$ für Polynome f

Lemma 1.6

Sei $f \in \mathcal{P}_m$.

- (a) Hat $A = \text{diag}(A_{1,1}, A_{2,2}, \dots, A_{k,k})$ Blockdiagonalstruktur mit quadratischen Diagonalblöcken

$$A_{j,j} \in \mathbb{C}^{n_j \times n_j}, \quad (j = 1, 2, \dots, k), \quad n_1 + n_2 + \dots + n_k = n,$$

dann gilt

$$f(A) = \text{diag}(f(A_{1,1}), f(A_{2,2}), \dots, f(A_{k,k})).$$

- (b) Ist $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$ invertierbar und $B := TAT^{-1}$, dann gilt

$$f(B) = Tf(A)T^{-1}.$$

- (c) Ist λ ein Eigenwert von A mit zugehörigem Eigenvektor v , so ist $f(\lambda)$ ein Eigenwert von $f(A)$ mit zugehörigem Eigenvektor v :

$$Av = \lambda v \quad \implies \quad f(A)v = f(\lambda)v.$$

Matrixfunktionen

Beispiel: Potenzen eines Jordan-Blocks

Wir bestimmen $m_k(J)$ für das k -te Monom $m_k(\lambda) = \lambda^k$ und einen Jordan-Block⁴

$$J = J(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & & & \\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda & 1 \\ & & & & \lambda \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n \times n}.$$

Eine elementare Rechnung zeigt, dass $m_k(J) = J^k$ eine obere Dreiecksmatrix mit Toeplitz-Struktur⁵ ist. Der Eintrag in der j -ten Diagonale ist

$$\binom{k}{j} \lambda^{k-j} = \frac{k(k-1)\cdots(k-j+1)\lambda^{k-j}}{j!} = \frac{m_k^{(j)}(\lambda)}{j!} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1).$$

⁴Camille Jordan (1838–1922)

⁵Otto Toeplitz (1881–1940)

Matrixfunktionen

Beispiel: Potenzen eines Jordan-Blocks

Mit anderen Worten:

$$m_k(J) = J^k = \begin{bmatrix} m_k(\lambda) & m'_k(\lambda) & \cdots & \frac{m_k^{(n-2)}(\lambda)}{(n-2)!} & \frac{m_k^{(n-1)}(\lambda)}{(n-1)!} \\ & m_k(\lambda) & \cdots & \frac{m_k^{(n-3)}(\lambda)}{(n-3)!} & \frac{m_k^{(n-2)}(\lambda)}{(n-2)!} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & m_k(\lambda) & m'_k(\lambda) \\ & & & & m_k(\lambda) \end{bmatrix}.$$

Jetzt sind wir in der Lage, $f(A)$ für beliebiges f zu definieren: Sei dazu $J_A = \text{diag}(J_1, J_2, \dots, J_k)$ die **Jordansche Normalform** von A , $A = TJ_AT^{-1}$. Die einzelnen Jordan-Blöcke $J_j = J_j(\lambda_j)$ seien $(n_j \times n_j)$ -Matrizen. Das charakteristische Polynom c_A von A hat dann die Form

$$c_A(\lambda) = \prod_{j=1}^k (\lambda - \lambda_j)^{n_j}.$$

Matrixfunktionen

Allgemeiner Fall

Wir sagen f ist auf A definiert, wenn f auf einer offenen Menge D definiert ist, die das Spektrum $\Lambda(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}$ von A enthält, und ausserdem f in λ_j $(n_j - 1)$ -mal differenzierbar ist.

In diesem Fall setzen wir für $j = 1, 2, \dots, k$

$$f(J_j(\lambda_j)) := \begin{bmatrix} f(\lambda_j) & f'(\lambda_j) & \cdots & \frac{f^{(n_j-2)}(\lambda_j)}{(n_j-2)!} & \frac{f^{(n_j-1)}(\lambda_j)}{(n_j-1)!} \\ & f(\lambda_j) & \cdots & \frac{f^{(n_j-3)}(\lambda_j)}{(n_j-3)!} & \frac{f^{(n_j-2)}(\lambda_j)}{(n_j-2)!} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & f(\lambda_j) & f'(\lambda_j) \\ & & & & f(\lambda_j) \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{n_j \times n_j}$$

und

$$f(A) := T \operatorname{diag}(f(J_1), f(J_2), \dots, f(J_k)) T^{-1}.$$

Bemerkungen.

- (1) Ist $f(\lambda) = \alpha_0 + \alpha_1\lambda + \cdots + \alpha_m\lambda^m$ ein Polynom, so gilt für die so definierte Matrix $f(A)$: $f(A) = \alpha_0 I + \alpha_1 A + \cdots + \alpha_m A^m$ (natürlich ist ein Polynom auf jeder Matrix definiert).
- (2) Ist $f = p/q$ eine rationale Funktion mit $p \in \mathcal{P}_m$ und $q \in \mathcal{P}_k$, so ist f genau dann auf A definiert, wenn kein Eigenwert von A eine Polstelle von f ist. In diesem Fall gilt $f(A) = p(A)[q(A)]^{-1} = [q(A)]^{-1}p(A)$.
- (3) Alle Aussagen von Lemma 1.6 gelten für jede beliebige Funktion f , wenn nur f auf A definiert ist.
- (4) Ist f analytisch in einer Umgebung von 0 und besitzt dort die Taylor⁶-Reihe $f(\lambda) = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \lambda^j$ mit Konvergenzradius $\tau > 0$ ($\tau = \infty$ ist erlaubt), so ist f auf jeder Matrix A mit Spektralradius $\rho(A) < \tau$ definiert und es gilt

$$f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j A^j = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^m \alpha_j A^j.$$

⁶Brook Taylor (1685–1731)

Matrixfunktionen

Beispiele: Neumannsche Reihe, Exponentialfunktion

Ein bekanntes Beispiel für die letzte Bemerkung ist die **Neumannsche Reihe**⁷

$$(I - A)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} A^j, \quad \text{falls } \rho(A) < 1.$$

Die **Exponentialfunktion einer Matrix** A kann z.B. auch durch

$$\exp(A) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} A^j$$

definiert werden. (Die Reihe konvergiert für jede Matrix A , weil die zugehörige skalare Reihe einen unendlichen Konvergenzradius besitzt.)

Bei GDGen ist es oft wichtig zu wissen, wie sich $\exp(tA)$ für $t \rightarrow \infty$ verhält. Die entscheidende Größe ist die **Spektralabszisse** $\alpha(A)$ von A :

$$\alpha(A) := \max\{\operatorname{Re}(\lambda) : \lambda \in \Lambda(A)\}.$$

⁷Carl Neumann (1832–1925)

Satz 1.7 (Asymptotisches Verhalten von $\exp(tA)$)

Sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.

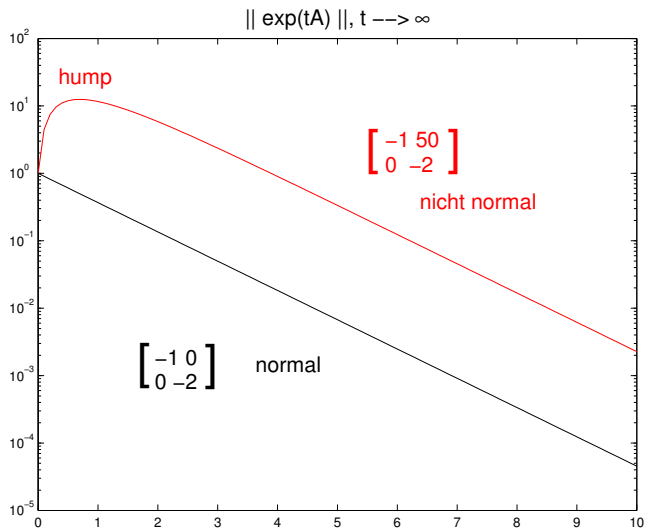
- (a) Es ist $\lim_{t \rightarrow \infty} \exp(tA) = 0$ genau dann, wenn $\alpha(A) < 0$ gilt.
- (b) Wenn $\alpha(A) > 0$ ist, so ist $\exp(tA)$ für $t \rightarrow \infty$ unbeschränkt.
Ist $\alpha(A) = 0$ und jeder Eigenwert λ von A mit $\operatorname{Re} \lambda = \alpha(A)$ halbeinfach, so ist $\exp(tA)$ für $t \rightarrow \infty$ beschränkt (aber i.A. nicht konvergent).
- (c) Es gilt $\|\exp(tA)\| \geq \exp(t\alpha(A))$ für jede Matrixnorm.
Ist A normal, dann gilt $\|\exp(tA)\|_2 = \exp(t\alpha(A))$.

Für normale Matrizen ist $\|\exp(tA)\|_2$ also ein streng monoton fallende Funktion von $t \geq 0$, wenn $\alpha(A) < 0$.

Ist A nicht normal, so beobachtet man die üblichen Nichtnormalitätseffekte (vollkommen analog zum Verhalten von $\|A^m\|_2$, $m \rightarrow \infty$, falls $\rho(A) < 1$).

Matrixfunktionen

Asymptotisches Verhalten der Matrix-Exponentialfunktion



Matrixfunktionen

Auswertung von Matrixfunktionen

Zum Abschluss soll noch ein Algorithmus zur Berechnung von $\exp(A)$ beschrieben werden.

Beachte: $\exp(A) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^m A^j/j!$ ist nur geeignet, wenn $\rho(A)$ sehr klein ist; die Bestimmung von $\exp(A)$ über die Jordansche Normalform von A ist numerisch instabil oder zu aufwendig.

Der Algorithmus verwendet rationale Approximationen $(k/\ell)_{\exp}(\zeta) = p_{k,\ell}(\zeta)/q_{k,\ell}(\zeta)$ vom Typ (k, ℓ) (d.h. $p_{k,\ell} \in \mathcal{P}_k$, $q_{k,\ell} \in \mathcal{P}_\ell$) an die Exponentialfunktion, sog. **Padé-Approximationen**⁸. Diese sind eindeutig bestimmt durch die Vorschrift

$$\exp(\zeta) - p_{k,\ell}(\zeta)/q_{k,\ell}(\zeta) = O(\zeta^{k+\ell+1}) \quad \text{für } \zeta \rightarrow 0.$$

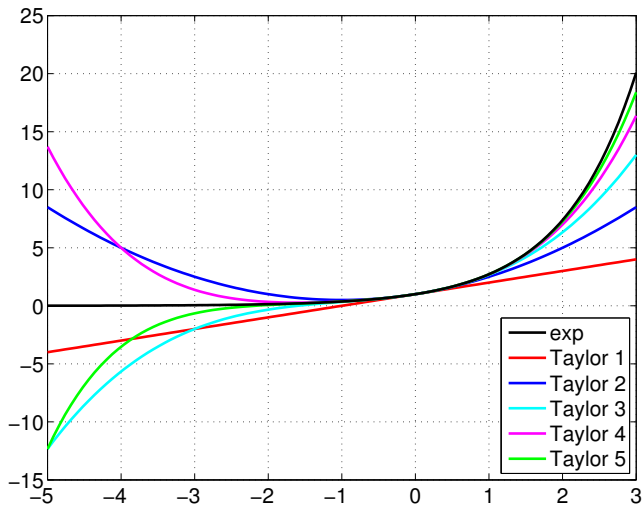
Beachte, dass hier die Taylor-Polynome für $\ell = 0$ als Spezialfall enthalten sind. Man kann die Padé-Approximationen im Fall der Exponentialfunktion explizit angeben:

$$p_{k,\ell}(\zeta) = \sum_{j=0}^k \frac{(k+\ell-j)!k!}{(k+\ell)!j!(k-j)!} \zeta^j, \quad q_{k,\ell}(\zeta) = \sum_{j=0}^{\ell} \frac{(k+\ell-j)! \ell!}{(k+\ell)!j!(\ell-j)!} \zeta^j.$$

⁸Henri Padé (1863–1953)

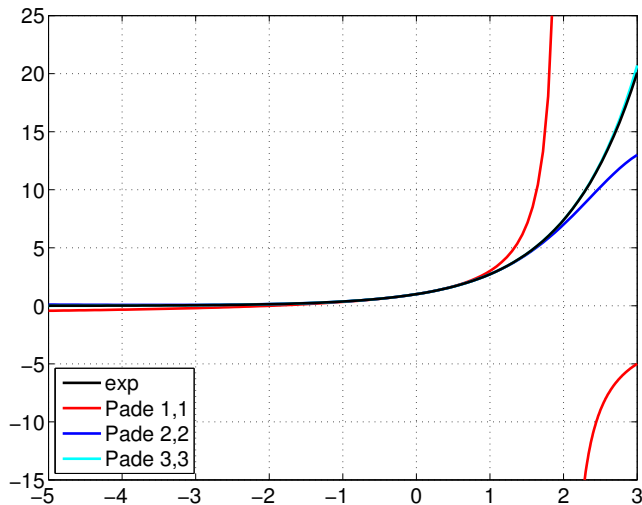
Matrixfunktionen

Taylorpolynome der Exponentialfunktion



Matrixfunktionen

Padé-Approximationen an die Exponentialfunktion



Satz 1.8 (Fehlerformel für Padé-Approximationen)

Für $k, \ell \in \mathbb{N}_0$ und $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ gilt

$$\begin{aligned} \exp(A) - (k, \ell)_{\exp(A)} \\ = \frac{(-1)^\ell}{(k + \ell)!} A^{k+\ell+1} [q_{k, \ell}(A)]^{-1} \int_0^1 u^k (1 - u)^\ell \exp((1 - u)A) du. \end{aligned}$$

Das bedeutet, dass $(k, \ell)_{\exp(A)}$

- sowohl für $k \rightarrow \infty$ bei festem ℓ ,
- als auch für $\ell \rightarrow \infty$ bei festem k ,
- als auch für $k \rightarrow \infty$ bei festem $k - \ell$

gegen $\exp(A)$ strebt.

Integrale über Matrizen $A = [a_{i,j}(u)]$ sind komponentenweise definiert:

$$\int A(u) du = \left[\int a_{i,j}(u) du \right].$$

Satz 1.8 zeigt, dass auch $(k, \ell)_{\exp(A)}$ nur dann eine akzeptable Näherung für $\exp(A)$ ist, wenn $\rho(A)$ nicht zu groß ist.

Daher verwendet man einen Trick: Kommutieren die Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$, so gilt

$$\exp(A + B) = \exp(A) \exp(B).$$

Insbesondere ist also

$$\exp(A) = \exp(A/m)^m \quad \text{für } m = 0, 1, 2, \dots$$

Das bedeutet, dass

$$E_{k,\ell} := [(k, \ell)_{\exp(A/2^j)}]^{2^j}$$

eine Approximation an $\exp(A)$ darstellt, bei der die Padé-Approximation an der Matrix $A/2^j$ ausgewertet wird, deren Spektralradius $\rho(A)/2^j$ man durch die Wahl von j steuern kann.

Die Berechnung von $E_{k,\ell}$ erfordert $j + \max\{k, \ell\}$ Multiplikationen mit A .

Lemma 1.9

Sei $\|A\|_\infty/2^j \leq 1/2$. Dann ist

$$\frac{\|\exp(A) - E_{k,\ell}\|_\infty}{\|\exp(A)\|_\infty} \leq \varepsilon(k, \ell) \|A\|_\infty \exp(\varepsilon(k, \ell) \|A\|_\infty)$$

mit

$$\varepsilon(k, \ell) = 2^{3-(k+\ell)} \frac{k! \ell!}{(k+\ell)! (k+\ell+1)!}.$$

Bei festem $d = \max\{k, \ell\}$ (Arbeitsaufwand zur Berechnung von $E_{k,\ell}$), wird $\varepsilon(k, \ell)$ durch die Wahl $k = \ell = d$ minimiert.

Algorithmus 1 : Berechnung von $\exp(A)$.

Gegeben : $A, \delta > 0$.

- 1 $j \leftarrow \max\{0, 1 + \text{floor}(\log_2 \|A\|_\infty)\}$.
 - 2 $A \leftarrow A/2^j$.
 - 3 Wähle ℓ minimal mit $\epsilon(\ell, \ell) \leq \delta$.
 - 4 $N \leftarrow I, Z \leftarrow I, X \leftarrow I, c \leftarrow 1$.
 - 5 **for** $m = 1$ **to** ℓ **do**
 - 6 $c \leftarrow c(\ell - m + 1)/((2\ell - m + 1)m)$.
 - 7 $X \leftarrow AX; Z \leftarrow Z + cX; N \leftarrow N + (-1)^m cX$.
 - 8 Bestimme LU-Zerlegung von N und löse damit $NE = Z$ nach E auf.
 - 9 **for** $m = 1$ **to** j **do**
 - 10 $E \leftarrow EE$
-

- Dieser Algorithmus liefert eine Approximation $E \approx \exp(A)$ derart, dass

$$E = \exp(A + \Delta A), \quad \text{wobei} \quad \|\Delta A\|_\infty \leq \delta \|A\|_\infty.$$

- Seine Komplexität beträgt etwa $2(\ell + j + 1/3)n^3$ flops, vgl. [Moler & Van Loan, 2003]⁹ und [Ward, 1977]¹⁰
- Für große dünnbesetzte Matrizen ist unser Algorithmus jedoch ungeeignet (er verwendet die LU-Zerlegung einer Matrix der Dimension von A).
- Ähnlich wie bei linearen Gleichungssystemen, wo man selten an A^{-1} sondern vielmehr an $A^{-1}\mathbf{b}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$, interessiert ist, steht auch hier die Berechnung von $\exp(A)\mathbf{b}$ im Vordergrund. Bei großen dünn besetzten Problemen muss man auch dazu iterative Verfahren verwenden.

⁹C.B. Moler und C.F. Van Loan. *Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later*. *SIAM Rev.* **45**, 3–49 (2003)

¹⁰R.C. Ward. *Numerical computation of the matrix exponential with accuracy estimate*. *SIAM J. Numer. Anal.* **14** (4) 600–610 (1977).

1 Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Nur wenige Systeme der Form (DG) bzw. AWPe der Form (AWP) kann man explizit lösen. Selbst **lineare Systeme erster Ordnung**,

$$\begin{aligned}y_1' &= a_{1,1}(t)y_1 + a_{1,2}(t)y_2 + \cdots + a_{1,n}(t)y_n + b_1(t), \\y_2' &= a_{2,1}(t)y_1 + a_{2,2}(t)y_2 + \cdots + a_{2,n}(t)y_n + b_2(t), \\&\vdots = \vdots \\y_n' &= a_{n,1}(t)y_1 + a_{n,2}(t)y_2 + \cdots + a_{n,n}(t)y_n + b_n(t)\end{aligned}$$

oder kürzer

$$\mathbf{y}' = A(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t) \quad \text{mit } A(t) = [a_{i,j}(t)] \text{ und } \mathbf{b}(t) = [b_j(t)], \quad (\text{Lin})$$

gehören nur unter weiteren Einschränkungen zu diesen Ausnahmefällen.

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Hinreichende Bedingung für Lösbarkeit

Sind die Funktionen $a_{i,j}(t)$, $b_j(t)$ stetig über einem Intervall I und ist $\|A(t)\| \leq L$ für alle $t \in I$ (was wir ab jetzt stets voraussetzen), so besitzt (Lin) nach Satz ?? für jede Wahl der Anfangsbedingungen

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0 \quad (t_0 \in I)$$

eine eindeutige Lösung.

Satz 1.10 (Lösungen linearer Systeme erster Ordnung)

Die Lösungen des **homogenen** Systems

$$\mathbf{y}' = A(t)\mathbf{y}$$

bilden einen n -dimensionalen Unterraum des $C^1(I)$. Die Differenz zweier Lösungen des **inhomogenen** Systems

$$\mathbf{y}' = A(t)\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$$

löst das zugehörige homogene System.

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Konstante Koeffizienten, homogener Fall

Im Spezialfall **konstanter Koeffizienten**

$$a_{i,j}(t) = a_{i,j} \quad \text{für alle } t$$

lassen sich diese Lösungen angeben. Dazu betrachten wir zunächst den homogenen Fall, $\mathbf{b}(t) \equiv \mathbf{0}$: Es seien $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ die Einheitsvektoren im \mathbb{R}^n . Für $j = 1, 2, \dots, n$ löst

$$\mathbf{x}_j(t) := \exp(tA)\mathbf{u}_j$$

das AWP

$$\mathbf{y}' = A\mathbf{y}, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{u}_j.$$

Darüber hinaus sind die Funktionen $\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_n(t)$ linear unabhängig und bilden deshalb eine Basis des Lösungsraums von $\mathbf{y}' = A\mathbf{y}$.

Schließlich ist die matrixwertige Funktion

$$X : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}, \quad X(t) := [\mathbf{x}_1(t) | \mathbf{x}_2(t) | \dots | \mathbf{x}_n(t)]$$

für alle $t \in \mathbb{R}$ invertierbar und löst das Anfangswertproblem

$$X'(t) = AX(t), \quad X(0) = I.$$

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Konstante Koeffizienten, inhomogener Fall

Um das inhomogene Anfangswertproblem $\mathbf{y}' = A\mathbf{y} + \mathbf{b}(t)$ (der Einfachheit halber nehmen wir an, dass die Komponenten $b_j(t)$ auf ganz \mathbb{R} stetig sind), $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$, zu lösen, bedient man sich einer Technik, die unter dem Namen **Variation der Konstanten** bekannt ist:

Die (eindeutige) Lösung ist gegeben durch

$$\mathbf{y}(t) = \sum_{j=1}^n \left[\int_{t_0}^t \frac{W_j(s)}{W(s)} ds + \mathbf{y}_{0,j} \right] \mathbf{x}_j(t),$$

mit den **Wronski-Determinanten**¹¹

$$\begin{aligned} W(t) &= \det [\mathbf{x}_1(t) \quad \mathbf{x}_2(t) \quad \cdots \quad \mathbf{x}_n(t)], \\ W_j(t) &= \det [\mathbf{x}_1(t) \quad \cdots \quad \mathbf{x}_{j-1}(t) \quad \mathbf{b}(t) \quad \mathbf{x}_{j+1}(t) \quad \cdots \quad \mathbf{x}_n(t)]. \end{aligned}$$

Bemerkung: Lautet die Anfangsbedingung $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$, so müssen anstelle der Funktionen \mathbf{x}_j die Funktionen $\tilde{\mathbf{x}}_j(t) := \exp((t - t_0)A)\mathbf{u}_j$ verwendet werden.

¹¹ Josef Wronski (1778–1853)

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Konstante Koeffizienten, inhomogener Fall

Eine weitere Lösungsdarstellung für inhomogene lineare Systeme mit konstanten Koeffizienten, ebenfalls unter der Bezeichnung **Variation der Konstanten** bekannt, lautet (mit Anfangsbedingung bei $t = t_0$)

$$\mathbf{y}(t) = \exp((t - t_0)A)\mathbf{y}_0 + \int_{t_0}^t \exp((t - \tau)A) \mathbf{b}(\tau) d\tau. \quad (1.1)$$

Beachte: Diese Formel gilt auch wenn \mathbf{b} neben t auch von \mathbf{y} abhängt, d.h.

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}(t, \mathbf{y}(t)).$$

Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

Linearisierung

Formel (1.1) gestattet auch die Lösung des **linearisierten Problems**: linearisiert man die Differentialgleichung $\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$ im Punkt (t_0, \mathbf{y}_0) , ergibt sich (multivariate Taylor-Entwicklung)

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \approx \underbrace{\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)}_{=: \mathbf{b}} + \underbrace{\mathbf{f}_t(t_0, \mathbf{y}_0)}_{=: \mathbf{a}}(t - t_0) + \underbrace{\mathbf{f}_y(t_0, \mathbf{y}_0)}_{=: A}(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0)$$

und, als Approximation in der Nähe des Linearisierungspunktes, das **linearisierte AWP**

$$\mathbf{y}'(t) = A(\mathbf{y} - \mathbf{y}_0) + (t - t_0)\mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0. \quad (1.2)$$

Formel (1.1) liefert als Lösung von (1.2)

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}_0 + (t - t_0)A^{-1}\mathbf{a} + \left(e^{(t-t_0)A} - I \right) (A^{-1}\mathbf{b} + A^{-2}\mathbf{a}).$$

1 Einleitung

1.1 Volterras Prinzip

1.2 Begriffe und theoretische Resultate

1.3 Lineare Differenzgleichungen

1.4 Matrixfunktionen

1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung

1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren

1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

(vgl. [\[Braun, 1994\]](#))

Im Mai 1945 entdeckten die Alliierten in der Kunstsammlung **Hermann Görings** ein bis dahin unbekanntes Gemälde von **Jan Vermeer van Delft** (1632–1675), nämlich „Christus und die Ehebrecherin“. Es dauerte nicht lange, bis der Maler **Han van Meegeren** als derjenige ermittelt wurde, der (über Mittelsmänner) dieses Bild an Göring verkauft hatte. Van Meegeren wurde wegen Kollaboration mit dem Feind verhaftet. Er behauptete daraufhin, dieses Bild sowie vier weitere mutmaßliche Vermeers, darunter „Christus und die Jünger in Emmaus“, selbst gemalt zu haben. Um diese Aussage zu bekräftigen, begann er im Gefängnis „Christus unter den Schriftgelehrten“ im Stil Vermeers zu malen. Er ging dabei sehr geschickt vor: Er kratzte von alten, wertlosen Gemälden die Farbe bis auf die Leinwand ab, vermischte die alte (und äußerst harte) Farbe mit Phenolformaldehyd, um mit ihr wieder malen zu können. Das fertige Bild wurde in einem Ofen erhitzt, wobei das Aldehyd zu Bakelit erstarrte.

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

Noch vor Vollendung seiner Arbeit erfuhr van Meegeren, dass die Anklage auf Kollaboration fallen gelassen wurde und er stattdessen ein Verfahren wegen Fälschung zu erwarten hatte. Er weigerte sich daraufhin, die Vermeer-Kopie zu vollenden. Weil u.A. in einigen der angeblichen Bilder Vermeers Phenolformaldehyd nachgewiesen werden konnte (eine Substanz, die bis zum Ende des 19. Jahrhunderts völlig unbekannt war), wurde van Meegeren trotzdem am 12.10.1947 zu einem Jahr Gefängnis wegen Fälschung verurteilt. Er starb kurz darauf in der Haft.

Dessen ungeachtet waren viele Experten immer noch der Meinung, dass es sich bei „Christus und die Jünger in Emmaus“ um einen echten Vermeer handelt (aufgrund der Expertise eines bekannten Kunsthistorikers erwarb die Rembrandt-Gesellschaft dieses Werk für 174.000 US-\$).

Der Streit um die Authentizität dieses Gemäldes sollte schließlich 1967 von einer Forschergruppe an der Carnegie Mellon Universität (Pittsburgh, PA) entschieden werden.

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Bleiweiß und radioaktiver Zerfall

Deren Analyse basierte auf der Tatsache, dass Künstler seit mehr als 2000 Jahren sog. Bleiweiß (Bleioxyd) verwenden, das kleine Bestandteile an radioaktivem Blei-210 und Radium-226 enthält. Um die Pittsburgher Analyse zu verstehen, sind elementare Kenntnisse über **radioaktiven Zerfall** erforderlich.

- Unter Radioaktivität versteht man den (ohne äußere Beeinflussung erfolgenden) Zerfall instabiler Atomkerne gewisser radioaktiver Substanzen.
- Für jede radioaktive Substanz gibt es eine charakteristische Übergangswahrscheinlichkeit λ (**Zerfallskonstante**), mit der im Mittel ein Atom pro Zeiteinheit zerfällt. Sind zur Zeit t also $N(t)$ radioaktive Atome vorhanden, so zerfallen im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ durchschnittlich $\lambda N(t)\Delta t$ Atome.
- Für $\Delta t \rightarrow 0$ erhalten wir das **Zerfallsgesetz**

$$N'(t) = -\lambda N(t).$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Halbwertszeit

Die Zahl der nach einer gewissen Zeit Δt , die seit dem Zeitpunkt t_0 verstrichen ist, noch vorhanden radioaktiven Atome ist deshalb

$$N(t_0 + \Delta t) = N(t_0) \exp(-\lambda \Delta t).$$

Die **Halbwertszeit**, d.h. die Zeitspanne, innerhalb der die Hälfte einer gegebenen Menge radioaktiver Atome zerfällt, ergibt sich damit [setze $N(t_0 + \Delta t)/N(t_0) = 1/2$] zu

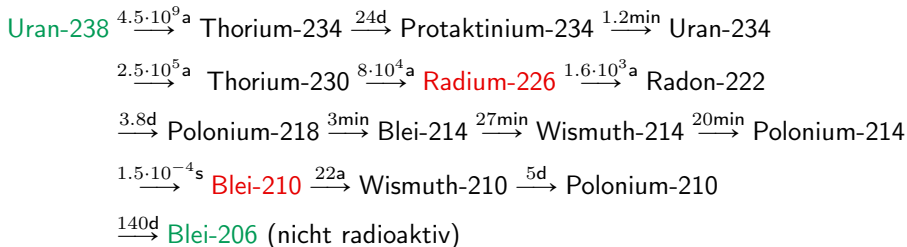
$$T_{1/2} = \Delta t = \log(2)/\lambda.$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Zerfallsreihe Uran-238

Da sich die Zerfallsprodukte radioaktiver Stoffe weiter umwandeln, bis ein stabiles Endglied gebildet ist, entstehen sog. **Zerfallsreihen**.

Für uns ist die Zerfallsreihe von Uran-238 relevant¹²:

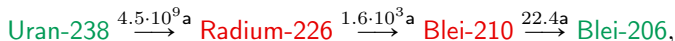


¹²Halbwertszeiten in Jahren [a], Tagen [d], Minuten [min] oder Sekunden [s]

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Radioaktives Gleichgewicht

Innerhalb einer Zerfallsreihe stellt sich für die Zwischensubstanzen im Laufe der Zeit ein Gleichgewichtszustand ein, das **radioaktive Gleichgewicht**. Voraussetzung dafür ist, dass das Ausgangselement so langsam zerfällt, dass seine Menge als konstant (oder seine Zerfallskonstante als 0) betrachtet werden kann. Um dies zu verdeutlichen, werden wir die Zerfallsreihe von Uran-238 etwas ökonomisieren,



so dass sie nur noch aus vier Elementen besteht. Wir bezeichnen mit $N_1(t)$, $N_2(t)$, $N_3(t)$ die Anzahl der Atome von Uran-238, Radium-226 bzw. Blei-210 zur Zeit t und berechnen aus den angegebenen Halbwertszeiten die zugehörigen Zerfallskonstanten,

$$\lambda_1 = 1.54 \cdot 10^{-10}, \quad \lambda_2 = 4.33 \cdot 10^{-4}, \quad \lambda_3 = 3.09 \cdot 10^{-2} \quad (\text{gemessen in } a^{-1}).$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Vereinfachtes Zerfallssystem

Zu lösen ist damit das System

$$N_1'(t) = -\lambda_1 N_1(t),$$

$$N_2'(t) = -\lambda_2 N_2(t) + \lambda_1 N_1(t),$$

$$N_3'(t) = -\lambda_3 N_3(t) + \lambda_2 N_2(t),$$

oder kürzer $\mathbf{N}'(t) = A\mathbf{N}(t)$ (mit Anfangsbedingungen $\mathbf{N}(t_0) = \mathbf{N}_0$), wobei

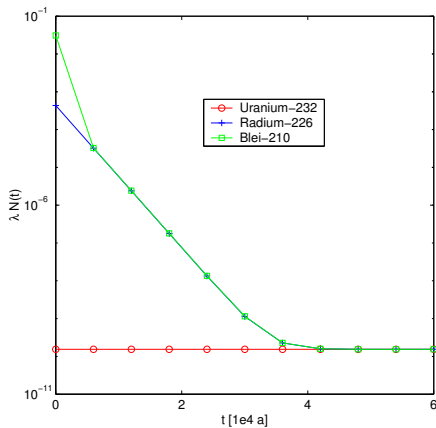
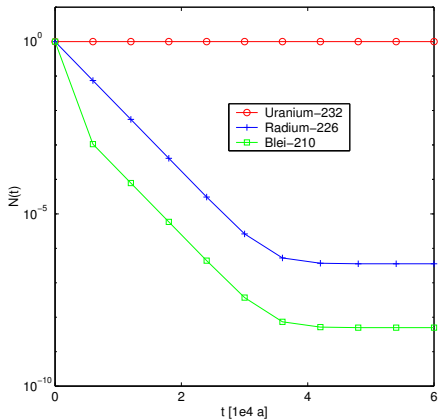
$$A = \begin{bmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 \end{bmatrix}.$$

Wir können die Lösung dieses AWP's explizit angeben:

$$\mathbf{N}(t) = \exp(tA)\mathbf{N}_0.$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Radioaktives Gleichgewicht des vereinfachten Zerfallssystems



Die Fälschungen des Han van Meegeren

Radioaktives Gleichgewicht des vereinfachten Zerfallssystems

t [a]	$N_1(t)$	$N_2(t)$	$N_3(t)$
0	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$
10^1	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$7 \cdot 10^{-1}$
10^3	$1 \cdot 10^0$	$6 \cdot 10^{-1}$	$9 \cdot 10^{-3}$
10^5	$1 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^{-7}$	$9 \cdot 10^{-9}$
10^6	$1 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$
10^7	$1 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$
10^8	$1 \cdot 10^0$	$4 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-9}$
10^9	$9 \cdot 10^{-1}$	$3 \cdot 10^{-7}$	$4 \cdot 10^{-9}$
10^{11}	$2 \cdot 10^{-7}$	$7 \cdot 10^{-14}$	$1 \cdot 10^{-15}$
10^{12}	$1 \cdot 10^{-67}$	$5 \cdot 10^{-74}$	$6 \cdot 10^{-76}$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Gleichgewichtswerte und Halbwertszeiten

Natürlich gilt $\lim_{t \rightarrow \infty} N_j(t) = 0$ ($j = 1, 2, 3$) (warum?), aber für eine sehr lange Periode (etwa $10^5 \leq t \leq 10^8$) scheint sich ein Gleichgewicht einzustellen. Die „Gleichgewichtswerte“ sind (ziemlich genau) proportional zu den Halbwertszeiten bzw. umgekehrt proportional zu den Zerfallskonstanten. Für $t = 10^7$ gilt in unserem Beispiel

$$N_1(t)/N_2(t) = 2.812499 \cdots 10^6 = \lambda_2/\lambda_1,$$

$$N_1(t)/N_3(t) = 2.008927847142 \cdots 10^8 = \lambda_3/\lambda_1,$$

$$N_2(t)/N_3(t) = 7.1428571 \cdots 10^1 = \lambda_3/\lambda_2.$$

Um diese Phänomene zu untersuchen, diagonalisieren wir A , $AT = TD$ mit $D = \text{diag}(-\lambda_1, -\lambda_2, -\lambda_3)$ und

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} & 1 & 0 \\ \frac{\lambda_1 \lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)} & \frac{\lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} & 1 \end{bmatrix}.$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Analyse in der Eigenbasis

Dann ergibt sich

$$\mathbf{N}(t) = \exp(tA)\mathbf{N}_0 = T \exp(tD)T^{-1}\mathbf{N}_0 = T \exp(tD)\tilde{\mathbf{N}}_0,$$

wobei wir $\tilde{\mathbf{N}}_0 = [\tilde{N}_1, \tilde{N}_2, \tilde{N}_3]^T := T^{-1}\mathbf{N}_0$ gesetzt haben. Entscheidend ist das Verhalten der einzigen Größe, die von t abhängt, nämlich von

$$\exp(tD) = \begin{bmatrix} \exp(-\lambda_1 t) & 0 & 0 \\ 0 & \exp(-\lambda_2 t) & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-\lambda_3 t) \end{bmatrix}.$$

Für $t \in [10^5, 10^8]$ gelten $\exp(-\lambda_1 t) \in [0.999984 \dots, 1]$ und $\exp(-\lambda_2 t), \exp(-\lambda_3 t) \in [0, 1.5 \dots 10^{-19}]$. In diesem Zeitintervall gilt also

$$\mathbf{N}(t) = T \exp(tD)\tilde{\mathbf{N}}_0 \approx T \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tilde{\mathbf{N}}_0 = \begin{bmatrix} \tilde{N}_1 \\ \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} \tilde{N}_1 \\ \frac{\lambda_1 \lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)} \tilde{N}_1 \end{bmatrix}.$$

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Radioaktives Gleichgewicht in Bleiweiß

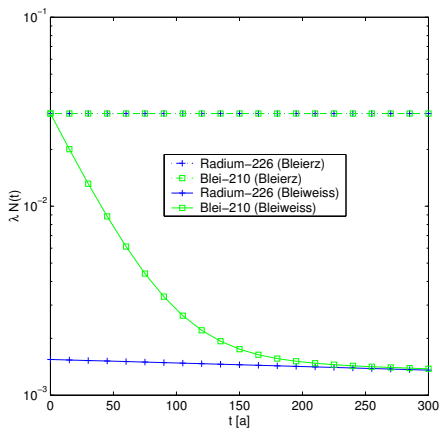
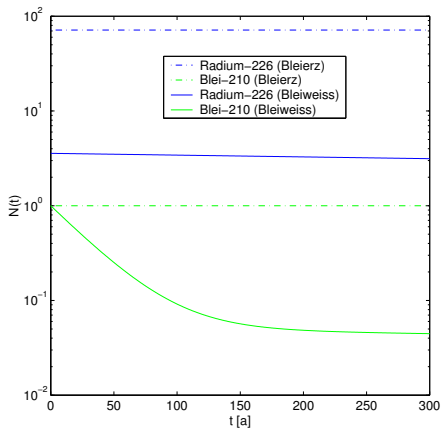
Beachtet man noch $\lambda_1 \ll \lambda_2 < \lambda_3$, so erhält man schließlich für $t \in [10^5, 10^8]$

$$[N_1(t), N_2(t), N_3(t)]^T \approx \tilde{N}_1[1, \lambda_1/\lambda_2, \lambda_1/\lambda_3]^T.$$

Zurück zur Altersbestimmung von Gemälden: Wie bereits erwähnt, enthalten fast alle Gemälde Bleiweiß und damit die radioaktiven Substanzen Radium-226 und Blei-210. Bleiweiß wird aus Blei gewonnen, welches wiederum durch Schmelzen von Bleierz entsteht. Bei diesem Schmelzvorgang werden 90–95% des Radiums und seiner Tochtersubstanzen mit der Schlacke entfernt, so dass Blei-210 von seinem Nachschub abgeschnitten ist und sich mit Radium-226 nicht mehr im radioaktiven Gleichgewicht befindet. Das Blei-210 zerfällt dann sehr schnell (da es eine kurze Halbwertszeit von $T_{1/2} = 22a$ besitzt), bis es mit den Resten von Radium-226 wieder im Gleichgewicht ist (nach ca. 200 Jahren).

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Bleierz/Bleiweiß mit und ohne radioaktives Gleichgewicht



Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

Seien jetzt t_0 der Zeitpunkt, an dem das Bleiweiß hergestellt wurde, und (wie oben) $N_2(t)$, $N_3(t)$ die Mengen von Radium-226 bzw. Blei-210 (pro g Bleiweiß). Es gilt $N_3'(t) = -\lambda_3 N_3(t) + \lambda_2 N_2(t)$. Da wir uns nur für eine Zeitspanne von 300 Jahren interessieren und Radium-226 eine Halbwertszeit von $T_{1/2} = 1600$ Jahren besitzt, können wir annehmen, dass seine **Zerfallsrate (Aktivität)** $\rho_2 := \lambda_2 N_2(t)$ konstant ist. Die GDG vereinfacht sich zu $N_3'(t) = -\lambda_3 N_3(t) + \rho_2$ bzw. zu $N_3'(t) + \lambda_3 N_3(t) = \rho_2$. Multiplizieren wir mit dem **integrierenden Faktor** $\exp(\lambda_3 t)$, so ergibt sich

$$\frac{d}{dt} [\exp(\lambda_3 t) N_3(t)] = \rho_2 \exp(\lambda_3 t),$$

was zu

$$N_3(t) = \frac{\rho_2}{\lambda_3} [1 - \exp(-\lambda_3(t - t_0))] + N_3(t_0) \exp(-\lambda_3(t - t_0)) \quad (*)$$

führt. $N_3(t)$, λ_3 und ρ_2 sind bekannt (bzw. leicht zu messen). Wüssten wir die Größe von $N_3(t_0)$, könnten wir $t - t_0$ (und damit das Alter des Gemäldes) bestimmen.

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

Natürlich ist es unmöglich, $N_3(t_0)$ ohne Kenntnis von t_0 zu ermitteln. Wir machen von der Tatsache Gebrauch, dass $N_3(t_0)$, also die Menge an Blei-210 zum Zeitpunkt der Herstellung des Bleiweißes, ein radioaktives Gleichgewicht mit dem Radium-226 im Bleierz bildete. Lösen wir also (*) nach der Zerfallsrate $\lambda_3 N_3(t_0)$ von Blei-210 zur Zeit t_0 auf,

$$\lambda_3 N_3(t_0) = \lambda_3 N_3(t) \exp(\lambda_3(t - t_0)) - \rho_2 [\exp(\lambda_3(t - t_0)) - 1],$$

und nehmen $t - t_0 = 300$ a an,

$$\begin{aligned} \lambda_3 N_3(t_0) &= \lambda_3 N(t) \exp(300\lambda_3) - \rho_2 [\exp(300\lambda_3) - 1] \\ &= \lambda_3 N(t) 2^{150/11} - \rho_2 [2^{150/11} - 1] \end{aligned}$$

$[\exp(300\lambda_3) = \exp(300 \log(2)/T_{1,2}) = \exp(300 \log(2)/22) = 2^{150/11}]$. Um $\lambda_3 N_3(t_0)$ zu berechnen, müssen wir die gegenwärtigen Zerfallsraten $\lambda_3 N_3(t)$ von Blei-210 bzw. ρ_2 von Radium-226 bestimmen, was für einige mutmaßliche Bilder Vermeers geschehen ist.

Die Fälschungen des Han van Meegeren

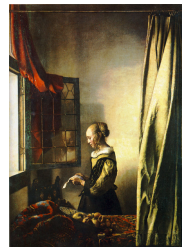
Hintergrund

	Zerfallsraten* von	
	Pb-210	Ra-226
„Christus und die Jünger in Emmaus“	8.5	0.80
„Fußwaschung“	12.6	0.26
„Die Notenleserin“	10.3	0.30
„Die Mandolinspielerin“	8.2	0.17
„Die Spitzenklöpplerin“	1.5	1.40
„Der Soldat und das lachende Mädchen“	5.2	6.00

(* pro Minute und pro g Bleiweiß)

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund



Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

Legende:

- (1,1) Han van Meegeren, „Christus und die Ehebrecherin“ (1941), ???
- (1,2) Han van Meegeren, „Christus und die Jünger in Emmaus“ (1936/37), Museum Boymans Van Beuningen, Rotterdam
- (1,3) Han van Meegeren, „Fußwaschung Christi“ (1941), Rijksmuseum, Amsterdam
- (1,4) Han van Meegeren, „Die Notenleserin“ (1935/36), Rijksmuseum, Amsterdam
- (2,1) Han van Meegeren, „Die Mandolinenspielerin“ (1935/36), Rijksmuseum, Amsterdam
- (2,2) Jan Vermeer, „Die Spitzenklöpplerin“ (ca. 1669/70), Louvre, Paris
- (2,3) Jan Vermeer, „Der Soldat und das lachende Mädchen“ (ca. 1658), Frick Collection, New York
- (2,4) Jan Vermeer, „Brieflesendes Mädchen am offenen Fenster“ (ca. 1659), Gemäldegalerie „Alte Meister“, Dresden

Quellen: <http://www.cacr.caltech.edu/roy/vermeer>, <http://www.mystudios.com/gallery/ha>

Die Fälschungen des Han van Meegeren

Hintergrund

Für „Christus und die Jünger in Emmaus“ ergibt sich

$$\lambda_3 N_3(t_0) = 8.5 \cdot 2^{150/11} - 0.8 \left[2^{150/11} - 1 \right] \approx 98050.$$

Es bleibt die Frage, ob dies ein akzeptabler Wert für die Zerfallsrate von Blei-210 im radioaktiven Gleichgewicht ist. Man kann nachrechnen, dass, wenn das Blei zur Zeit der Gewinnung mit einer Zerfallsrate von 100 pro Minute und g Bleiweiß zerfiel, das Erz, aus dem es stammt, einen Urananteil von 0.014 % hatte. Dies ist eine sehr hohe Urankonzentration. Andererseits gibt es (seltene) Erze, deren Urangehalt bei 2–3 % liegt. Um sicher zu gehen, nennen wir $\lambda_3 N_3(t_0)$ deshalb unakzeptabel hoch, wenn

$$\lambda_3 N_3(t_0) > 100 \cdot 3 / 0.014 \approx 22000$$

gilt, was bei „Christus und die Jünger in Emmaus“ offenbar der Fall ist (zum Vergleich beträgt der entsprechende Wert bei der „Spitzenklöpplerin“ $\lambda_3 N_3(t_0) \approx 1275$).

1 Einleitung

- 1.1 Volterras Prinzip
- 1.2 Begriffe und theoretische Resultate
- 1.3 Lineare Differenzgleichungen
- 1.4 Matrixfunktionen
- 1.5 Systeme linearer Differentialgleichungen erster Ordnung
- 1.6 Die Fälschungen des Han van Meegeren
- 1.7 Weitere Beispiele

2 Numerische Methoden für Anfangswertprobleme

3 Lineare Mehrschrittverfahren

4 Runge-Kutta-Verfahren

5 Steife Differentialgleichungen

Weitere Beispiele

Satellit im Kraftfeld von Erde und Mond

Wir betrachten die Bewegung eines Satelliten im Schwerefeld zweier großer Himmelskörper (z.B. Erde und Mond).

Annahmen:

- Die Bewegung aller drei Körper findet in einer Ebene statt; die beiden großen Körper rotieren in konstanter Entfernung und mit konstanter Winkelgeschwindigkeit um ihren gemeinsamen Schwerpunkt.
- Der Satellit hat somit keinen Einfluss auf die Bahnen von Erde und Mond.

Bezüglich eines mitrotierenden Koordinatensystems (in welchem Erde und Mond ruhen) mit Ursprung im gemeinsamen Schwerpunkt wird die Satellitenbahn $(x, y) = (x(t), y(t))$ beschrieben durch ein System zweier GDGen:

$$\begin{aligned}x'' &= x + 2y' - \mu' \frac{x + \mu}{[(x + \mu)^2 + y^2]^{3/2}} - \mu \frac{x - \mu'}{[(x - \mu')^2 + y^2]^{3/2}}, \\y'' &= y - 2x' - \mu' \frac{y}{[(x + \mu)^2 + y^2]^{3/2}} - \mu \frac{y}{[(x - \mu')^2 + y^2]^{3/2}}.\end{aligned}$$

Weitere Beispiele

Satellit im Kraftfeld von Erde und Mond

- $\mu = 1/82.45$ bezeichnet den Anteil der Mondmasse an der Gesamtmasse von Erde und Mond, $\mu' = 1 - \mu$ die der Erde.
- Als Längeneinheit wählen wir die Erde-Mond-Entfernung, wobei der Mond auf der positiven und die Erde auf der negativen reellen Achse platziert werden.
- Die Zeiteinheit ist gegeben durch die Winkelgeschwindigkeit der Rotation, genauer rotiert der Mond ein Mal um die Erde in 2π Zeiteinheiten.
- Bekannt als **restringiertes Dreikörperproblem**, da 3. Körper die ersten beiden nicht beeinflusst.
- Anfangsbedingung zur Zeit $t = 0$: Satellit in Position $(x(0), y(0)) = (1.2, 0)$ mit Geschwindigkeit $(x'(0), y'(0)) = (0, -1.05)$.

Umschreiben in System erster Ordnung:

$$y_1 = x, \quad y_2 = y, \quad y_3 = x', \quad y_4 = y',$$

führt auf

$$y_1' = y_3,$$

$$y_2' = y_4,$$

$$y_3' = y_1 + 2y_4 - \mu' \frac{y_1 + \mu}{[(y_1 + \mu)^2 + y_2^2]^{3/2}} - \mu \frac{y_1 - \mu'}{[(y_1 - \mu')^2 + y_2^2]^{3/2}},$$

$$y_4' = y_2 - 2y_3 - \mu' \frac{y_2}{[(y_1 + \mu)^2 + y_2^2]^{3/2}} - \mu \frac{y_2}{[(y_1 - \mu')^2 + y_2^2]^{3/2}},$$

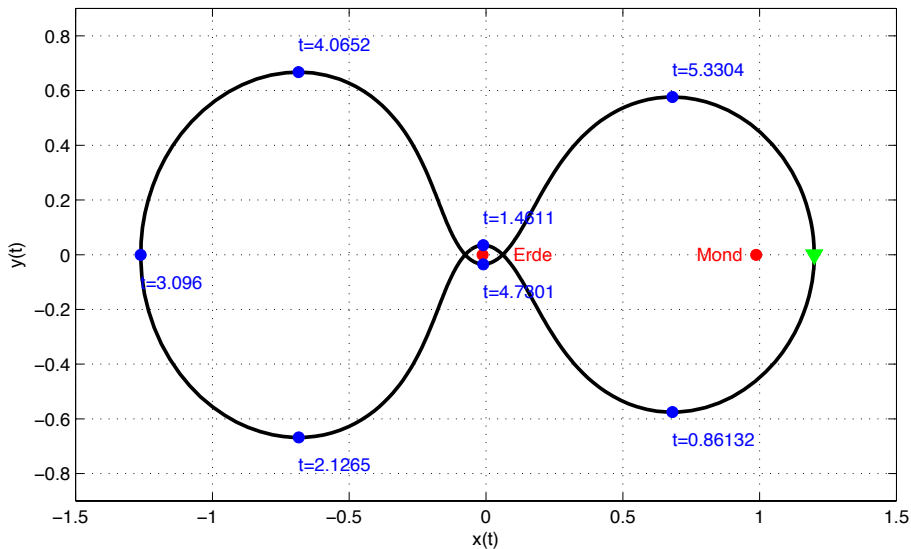
mit Anfangsbedingungen

$$y_1(0) = 1.2, \quad y_2(0) = y_3(0) = 0 \quad \text{and} \quad y_4(0) = -1.05.$$

Lösung $(x(t), y(t)) = (y_1(t), y_2(t))$: geschlossene Bahn mit Periode $T \approx 6.19$.

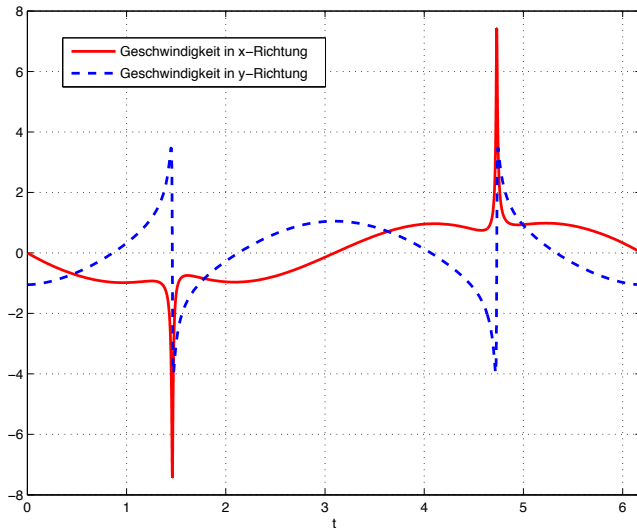
Weitere Beispiele

Satellit im Kraftfeld von Erde und Mond



Weitere Beispiele

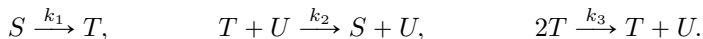
Satellit im Kraftfeld von Erde und Mond



Weitere Beispiele

Kinetik chemischer Reaktionsmechanismen

Drei Spezies S , T and U nehmen Teil an der autokatalytischen Reaktion



Zeitlicher Verlauf der Konzentrationen (Massenwirkungsgesetz) beschrieben durch System GDGen

$$\begin{aligned}y_1' &= -k_1 y_1 + k_2 y_2 y_3, \\y_2' &= k_1 y_1 - k_2 y_2 y_3 - 2k_3 y_2^2 + k_3 y_2^2 = k_1 y_1 - k_2 y_2 y_3 - k_3 y_2^2, \\y_3' &= k_3 y_2^2.\end{aligned}$$

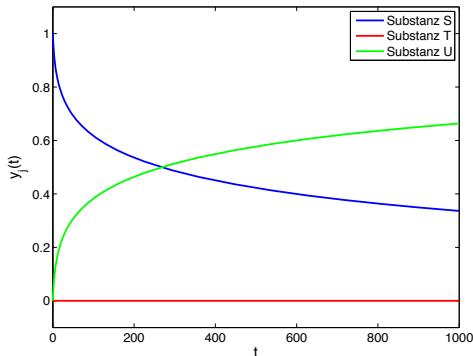
Reaktionsraten k_j sind ein Maß für die Geschwindigkeit mit denen die jeweilige Reaktion sich vollzieht. Sie differieren oft um mehrere Größenordnungen.

$$k_1 = 0.04, \quad k_2 = 10^4, \quad k_3 = 3 \cdot 10^7.$$

Weitere Beispiele

Kinetik chemischer Reaktionsmechanismen

Für die Anfangsbedingungen $y_1(0) = 1; y_2(0) = y_3(0) = 0$ erhalten wir:



Beachte: wegen $y_1'(t) + y_2'(t) + y_3'(t) = 0$ gilt für alle $t \geq t_0 = 0$, die **Erhaltungsgleichung**

$$y_1(t) + y_2(t) + y_3(t) = y_1(0) + y_2(0) + y_3(0) = 1.$$

Die Stabilitätsanalyse nichtlinearer dynamischer Systeme

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{f} : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n, \quad (1.3)$$

geschieht meist durch Linearisierung um den (einen) stationären Zustand $\bar{\mathbf{u}} := \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{u}(t)$. Sofern ein solcher existiert ist er Lösung der Gleichung $\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$.

Das dynamische System (1.3) heißt **lokal stabil** in $\bar{\mathbf{u}}$, falls $\epsilon > 0$ existiert mit

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{u}(t) = \bar{\mathbf{u}}, \quad \text{sofern } \|\mathbf{u}(0) - \bar{\mathbf{u}}\| < \epsilon.$$

In vielen Fällen lässt sich die Frage nach der lokalen Stabilität von (1.3) durch Analyse der Linearisierung

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) \approx \mathbf{f}(\bar{\mathbf{u}}) + \mathbf{A}(\mathbf{u} - \bar{\mathbf{u}}), \quad \mathbf{A} := \mathbf{f}'(\bar{\mathbf{u}})$$

klären, d.h. durch die Realteile der Eigenwerte von \mathbf{A} .

Weitere Beispiele

Chemische Reaktionskinetik: der Brusselator

Die Belousov-Zhabotinsky-Reaktion ist ein Beispiel für einen sog. **chemischen Oszillator**, bei dem sich zeitliche Oszillationen in einem chemischen Reaktionsmechanismus zeigen.



BZ-Reaktion in einer Petri-Schale, Wellenfront in gelb markiert.

Ein mathematisches Modell der BZ-Reaktion ist der sog. **Brusselator**¹³, einer Evolutionsgleichung der örtlichen Variation (in einer Raumkoordinate $r \in (0, 1)$) der Konzentration zweier miteinander reagierender Spezies x und y :

$$\partial_t x = D_1 \partial_{rr} x + A - (B + 1)x + x^2 y, \quad x(0, t) = x(1, t) = A.$$

$$\partial_t y = D_2 \partial_{rr} y + Bx - x^2 y, \quad y(0, t) = y(1, t) = \frac{B}{A},$$

$$x(r, 0) = x_0(r), \quad y(r, 0) = y_0(r).$$

¹³Brussels + Oszillator, Ilya Prigogine FU Brüssel

Ein stationärer Zustand ist gegeben durch

$$\bar{x} = A, \quad \bar{y} = \frac{B}{A}.$$

Die Jacobi-Matrix an dieser Stelle ist gegeben durch

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} D_1 \partial_{rr} + B - 1 & A^2 \\ -B & D_2 \partial_{rr} - A^2 \end{bmatrix},$$

was nach Ortsdiskretisierung eine große, dünn besetzte Matrix ergibt.

Bifurkationsproblem: Ab welchem Wert von B setzt periodisches Verhalten ein? Hierbei überqueren zwei konjugiert-komplexe Eigenwerte von \mathbf{J} die imaginäre Achse.