9. Übung zur Vorlesung Computerorientierte Mathematik II

Sommersemester 2011

C. Hartmann, S. Winkelmann

Abgabe bis Mittwoch, 29. Juni, 14.00 Uhr

Aufgabe 1 (Äquivalentes System 1. Ordnung, 3 Punkte)
Eine Differentialgleichung $x'(t) = f(x(t), t)$ wird *homogen* genannt, wenn f nicht explizit von der freien Variable t abhängt, d.h. wenn $f(x,t) = f(x)$ gilt. Geben Sie für das inhomogene Anfangswertproblem zweiter Ordnung

$$x'' = \lambda x + \mu e^t\,, \quad x(0) = x_0\,,\; x'(0) = v_0$$

ein äquivalentes lineares, homogenes Anfangswertproblem erster Ordnung

$$y' = Ay\,, \quad y(0) = y_0$$

mit konstanter Matrix $A \in \mathbf{R}^{3\times 3}$ an. (**Hinweis:** Setzen Sie z.B. $y_3 = \mu e^t$.)

Aufgabe 2 (Harmonischer Oszillator, 12 Punkte)
Das explizite Euler–Verfahren mit konstanter Schrittweite $\tau > 0$ wird auf das Anfangswertproblem

$$x' = Ax\,, \quad x(0) = x_0 \in \mathbf{R}^2\,, \qquad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

angewendet.

1. Plotten Sie das Phasenportrait der mit dem Euler–Verfahren berechneten Lösung in Matlab bis $T = 100$ für $x_0 = (1,0)^T$ und der Schrittweite $\tau = 0.02$. Vergleichen Sie die numerische mit der analytischen Lösung

   $$x(t) = \exp(At)x_0\,.$$

   (**Hinweis**: in Matlab liefert `expm(C)` die Matrix–Exponentielle einer quadratischen Matrix `C`.)

2. Mit x_k bezeichnen wir die numerische Approximation des expliziten Euler-Verfahrens zum Zeitpunkt $t_k = k\tau$. Wie schon im skalaren Fall hat das Verfahren die Konsistenzordnung $p = 1$. Zur Konvergenz der

Lösung für $\tau \to 0$ wird noch die Stabilität benötigt. Zeigen Sie, dass im vorliegenden Fall für die diskrete Kondition die Abschätzung

$$\max_{k=0,\dots,n} |x_k - \tilde{x}_k|_2 \leq e^T |x_0 - \tilde{x}_0|_2$$

gilt, wobei $T = n\tau$ und $\tilde{x}_k$ die Euler-Lösung zum Anfangswert $\tilde{x}_0$ bezeichnet; verwenden Sie dafür die Abschätzung $\|1 + \tau A\|_2 \leq 1 + \tau$.

3. Die diskrete Kondition lässt sich ebenso nach unten abschätzen, denn es gilt $\|(1+\tau A)^{-1}\|_2 < 1$ für alle festen Zeitschrittweiten $\tau > 0$. Beweisen Sie, dass daraus $|x_k|_2 < |x_{k+1}|_2$ folgt. Zeigen Sie außerdem, dass $|x_k|_2 \to \infty$ für $k \to \infty$. Entspricht das ihren Beobachtungen aus 1.?

4. Begründen Sie, warum sich 2. und 3. nicht widersprechen.

Aufgabe 3 (Alkoholabbau, 6 Punkte)
Der Alkoholabbau im menschlichen Körper kann durch ein 3-Kompartiment-Modell beschrieben werden (siehe [1]). Die grundlegende Annahme ist, dass der Alkohol im Magen nicht vollständig resorbiert wird, sondern zunächst mit einer konzentrationsabhängigen Rate k_e in den Darm und erst dann ins Blut gelangt. Der eigentliche Abbau folgt der Michaelis-Menten-Enzymkinetik. Insgesamt ergibt sich das folgende nichtlineare System von DGLn:

$$\begin{aligned} I'(t) &= -k_a I(t) + k_e \left(\frac{FD}{V}\right) e^{-k_e t} \\ B'(t) &= -\frac{v_{max} B(t)}{K_m + B(t)} + k_a I(t)\,. \end{aligned}$$

Dabei sind $I(t)$ und $B(t)$ die Alkoholkonzentrationen im Dünndarm und im Blut zur Zeit $t \geq 0$ in g/l. Die **Eingangsgrößen** des Systems sind:

- verabreichte Alkoholdosis D in g
- Alkoholkonzentration $I(0)$ im Dünndarm in g/l zur Zeit $t = 0$
- Alkoholkonzentration $B(0)$ im Blut in g/l zur Zeit $t = 0$

Für die **Parameter** können folgende Werte angenommen werden:

- Abbaurate im Magen $k_e = \frac{(k_e)_{max}}{1+aD^2}$
- maximale Abbaurate im Magen: $(k_e)_{max} = 10.21/h$
- Proportionalitätskonstante für Dosisabhängigkeit der Abbaurate im Magen $a = 0.001671/g^2$

- absobierter Anteil $F = 0.785$
- Blutvolumen $V = 44.1l$
- Abbaurate im Darm $k_a = 25.11/h$
- maximale Abbaugeschwindigkeit im Blut $v_{max} = 0.202g/(l \cdot h)$
- Michaelis-Menten-Konstante $K_m = 0.0818g/l$

Wir betrachten das AWP für $I(0) = B(0) = 0$ und eine Alkoholdosis von $D = 12g$ (etwa 1 doppelter Wodka zu 4cl).

1. Schreiben Sie ein Matlab–Programm, dass das explizite Euler–Verfahren auf dieses AWP anwendet. Finden Sie dazu geeignete (d.h. hinreichend kleine) Schrittweiten, bei denen sich die Lösung qualitativ richtig verhält, und begründen Sie Ihre Wahl.

2. Plotten Sie die Lösungskomponenten $I(t)$ und $B(t)$ bis zu einem Zeitpunkt T, bei dem die Konzentration $B(T)$ im Blut auf unter $0.01g/l$ gefallen ist.

Literatur:

[1] Wilkinson *et al.* (1977). Pharmacokinetics of ethanol after oral administration in the fasting state. *J. Pharmacokinet. Biopharm.* **5**, S. 207-224.