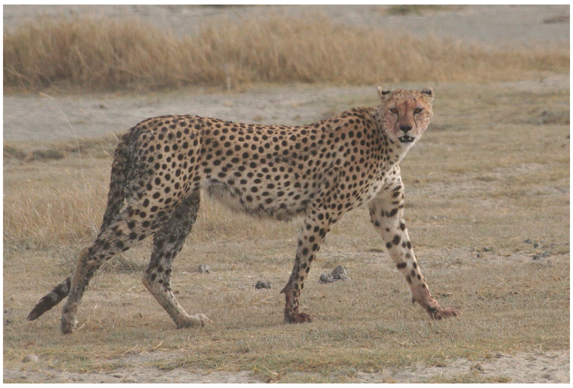
Universität Greifswald
Institut für Mathematik und Informatik
https://math-inf.uni-greifswald.de

Angebot für eine Bachelor-Arbeit

Thema: Lösungsverfahren für ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen mit Reaktion und Diffusion

Die Bildung von Mustern in Fellen oder Häuten von Tieren kann durch Reaktions-Diffusions-Gleichungen modelliert werden. Abbildung 1 zeigt Beispiele für Fleckenbildung. Die Unbekannten in diesem Modell sind die chemischen Konzentrationen eines Aktivators und eines Inhibitors.



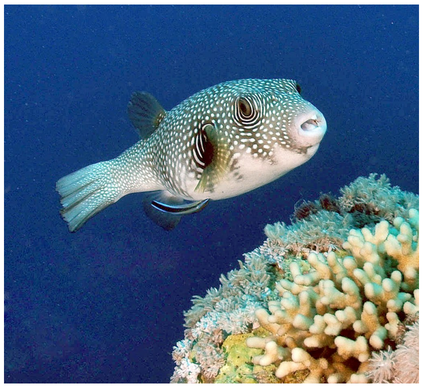


Abbildung 1: Musterbildung beim Gepard und beim Weißflecken-Kugelfisch.[1]

Der einfache Fall eines zweidimensionalen Gitters mit $N \times N$ Punkten wird verwendet. Dann bezeichnen $U(t), V(t) \in \mathbb{R}^{N^2}$ die Konzentrationen des Aktivators und des Inhibitors an den Gitterpunkten zur Zeit t. Ein Ansatz zur Lösung der Reaktions-Diffusions-Gleichungen führt auf ein hochdimensionales System gewöhnlicher Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} U'(t) &= A\,U(t) + F_1(U(t), V(t)) \\ V'(t) &= A\,V(t) + F_2(U(t), V(t)). \end{aligned} \tag{1}$$

Die rechte Seite dieses Systems besteht aus einer Summe mit zwei Termen. Der lineare Anteil beschreibt die Diffusion der chemischen Substanzen und enthält die konstante Matrix $A \in \mathbb{R}^{N^2 \times N^2}$. Der nichtlineare Anteil modelliert die chemischen Reaktionen zwischen den Substanzen und ist gegeben durch die Funktionen F_1, F_2. Anfangsbedingungen werden o.E.d.A. bei $t = 0$ vorgegeben durch

$$U(0) = U_0 \quad \text{und} \quad V(0) = V_0. \tag{2}$$

Das Anfangswertproblem (1),(2) wird über ein Zeitintervall $[0, T]$ mit Endzeitpunkt T gelöst. Dabei geht die Lösung mit der Zeit in einen stationären Zustand über. Eine Mindestgröße des Gitters ist $N = 100$, wodurch das Differentialgleichungssystem (1) eine Dimension $n \geq 20000$ besitzt. Dadurch liegt ein hochdimesionales Differentialgleichungssystem vor. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel für einen entstehenden stationären Zustand, berechnet mit Gittergröße $N = 100$. Die Fleckenbildung ist deutlich zu erkennen.

[1]Flickr user Rob Qld - Flickr here, CC BY 2.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=1611636
Albert kok - Own work, CC BY-SA 3.0, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=7748304

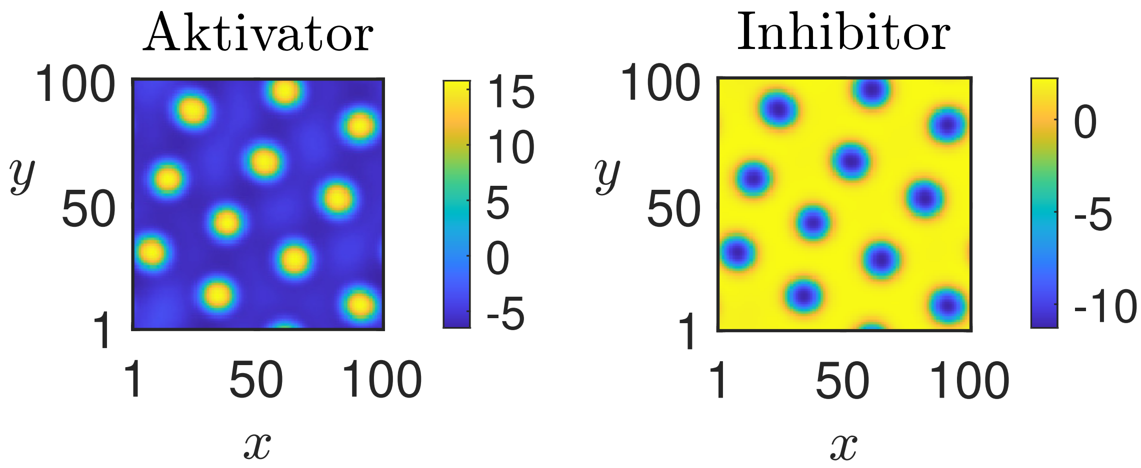


Abbildung 2: Konzentrationen des Aktivators und des Inhibitor am Endzeitpunkt.

Die Aufgabenstellung dieser Bachelor-Arbeit besteht in der Entwicklung und Programmierung eines numerischen Verfahrens zur Lösung des Anfangswertproblems (1),(2). Dabei soll die spezielle Struktur des Differentialgleichungssystems (1) verwendet werden, um ein effizientes Verfahren zu konstruieren. Der lineare Anteil bezüglich der Diffusion ist steif in diesem System, während der nichtlineare Anteil bezüglich der Reaktion nichtsteif ist.

Ein möglicher Ansatz für ein geeignetes Verfahren besteht darin, den steifen Anteil mit einem impliziten (IM) Schema und den nichtsteifen Anteil mit einem expliziten (EX) Schema zu lösen. Es enstehen IMEX-Verfahren, welche auf Grundlage von Runge-Kutta-Verfahren konstruiert werden können.

Das numerische Verfahren soll eine Schrittweitensteuerung zur Kontrolle des lokalen Fehlers enthalten. Dadurch sind in jedem Integrationsschritt zwei Näherungen mit unterschiedlicher Ordnung zu bestimmen. Ziel ist es, das Anfangswertproblems (1),(2) für hohe Dimensionen, z.B. $N = 100 - 1000$, effizienter zu Lösen als mit Standardmethoden. Hierzu kann versucht werden, im Zusammenhang mit linearen Gleichungssystemen die LR-Zerlegungen von Matrizen des Typs $I - \gamma h A$ mit Einheitsmatrix I, Konstante $\gamma \in \mathbb{R}$ und Schrittweite $h > 0$ mehrfach wieder zu verwenden.

Vorkenntnisse: Analysis I+II, Lineare Algebra I+II,
Numerik I, Numerik Grundpraktikum

Literatur:

K. Strehmel, R. Weiner, H. Podhaisky: Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen: Nichtsteife, steife und differential-algebraische Gleichungen. (2. Aufl.) Vieweg & Teubner, 2012.

T. Koto: IMEX Runge-Kutta schemes for reaction-diffusion equations. J. Comp. Appl. Math. 215 (2008), 182–195.

J.D. Murray: Mathematical Biology II. Spatial Models and Biomedical Applications. (3. Aufl.) Springer, 2003.

Ansprechpartner: Prof. Dr. Roland Pulch
Email: `pulchr@uni-greifswald.de`