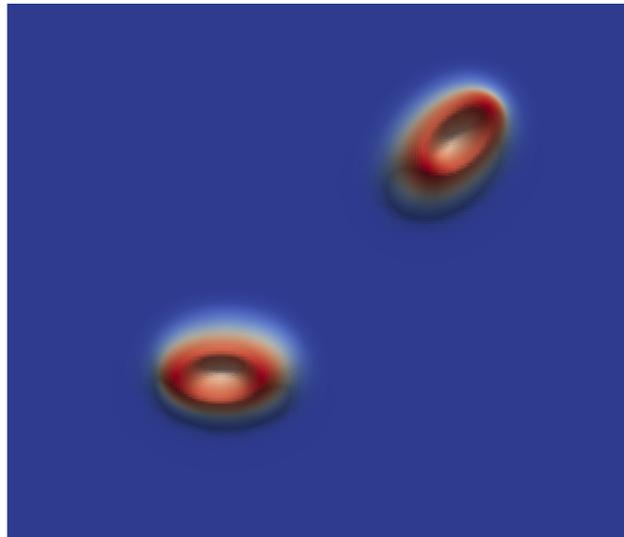


# Masterarbeit

in der Biomathematik AG  
der Fakultät für Mathematik  
an der TU Dortmund

## Ein mathematisches Modell für die chemotaktische Bewegung großer Zellen



vorgelegt von  
**Niklas Borg**

betreut durch  
**Prof. Dr. Matthias Röger**

März 2015

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Motivation und biologischer Hintergrund</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Mathematische Modelle</b>	<b>6</b>
3.1	Mathematisches Modell einer Zelle . . . . .	6
3.2	Mathematisches Modell zur Verteilung unseres Lockstoffes . . . . .	8
3.3	Mathematisches Modell des Evolutionsgesetzes unserer Zelle . . . . .	11
3.4	Gekoppeltes System . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>17</b>
4.1	Lösungstheorie der parabolischen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung . .	17
4.1.1	Schwache Lösung . . . . .	18
4.1.2	Regularität . . . . .	26
4.2	Lösungstheorie von Systemen gewöhnlicher Differtialgleichungen . . . . .	34
<b>5</b>	<b>Diskretisierung und Implementierung</b>	<b>37</b>
5.1	Diskretisierung . . . . .	37
5.2	Implementierung . . . . .	41
<b>6</b>	<b>Numerische Tests</b>	<b>43</b>
6.1	Validierung der Diffusionsgleichung . . . . .	43
6.2	Validierung des ODE-Systems für eine Zelle . . . . .	48
6.2.1	Numerische Stabilität . . . . .	48
6.2.2	Zellparameter Tests . . . . .	50
6.3	Validierung des ODE-Systems mittels einer analytischen Lösung . . . . .	61
6.4	Validierung des ODE-Systems für zwei Zellen . . . . .	62
<b>7</b>	<b>Fazit und Diskussion</b>	<b>64</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

In dieser Masterarbeit stellen wir ein mathematisches Modell zur Simulation der chemotaktischen Bewegung (*Chemotaxis*) großer Zellen vor. Bei einer chemotaktischen Bewegung handelt es sich um eine durch einen chemischen Reiz verursachte Bewegung, beispielsweise durch einen Lockstoff.

Ziel dieser Arbeit ist es somit, Zellen zu simulieren und den Einfluss von einem Lockstoff auf diese zu beobachten. Dazu betrachten wir ein festes Gebiet, in welchem sich unsere Zellen befinden und geben entweder initial eine Lockstoffverteilung an, oder aber wir untersuchen das Verhalten der Zellen, wenn durch Eigenproduktion des Lockstoffes der Zellen, diese sich gegenseitig anziehen.

Um ein solches Modell entwickeln zu können, benötigen wir das Verständnis des zugrunde liegenden biologischen Hintergrunds. In Kapitel 2 gehen wir auf diesen Punkt ein und geben zudem eine Motivation, warum wir uns mit der Umsetzung der Simulation chemotaktischer Bewegung in ein Computerprogramm auseinander setzen.

Nachdem wir die biologischen Abläufe erläutert haben, stellen wir in Kapitel 3 die nötigen mathematischen Modelle vor. In Abschnitt 3.1 führen wir ein stark vereinfachtes Modell einer Zelle ein, indem wir annehmen, dass die Zelle ellipsenförmig ist und diese Form auch während ihrer Bewegung nicht verändern kann. Jede Zelle kann somit über einen Mittelpunkt, eine Suchrichtung sowie einen Parameter, welcher die Größe bestimmt, eindeutig beschrieben werden. Anschließend erläutern wir in Abschnitt 3.2, wie wir simulieren können, dass sich der Lockstoff in unserem Gebiet durch Diffusion verteilt. Wir nutzen hier die Wärmeleitungsgleichung, welche auch Diffusionsgleichung genannt wird. Außerdem führen wir ein Verfahren ein, welches ermöglicht, dass die Zelle selber diesen Lockstoff produzieren kann, um andere Zellen dadurch anzulocken. Bevor wir im letzten Abschnitt dieses Kapitels eine Zusammenfassung der vorgestellten Modelle geben, widmen wir uns in Abschnitt 3.3 dem mathematischen Modell, welches die Fortbewegung der Zelle ermöglichen soll. Dazu führen wir eine Energie ein, die über den Rand der Zelle definiert ist, und bedienen uns dem Prinzip der Energieminimierung, um ein System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODE-System) für unsere Zellparameter aufzustellen.

Nachdem wir also in Kapitel 3 ein System hergeleitet haben, welches aus einer Kopplung von einer Diffusionsgleichung und einem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen besteht, werden wir in Kapitel 4 auf die Lösbarkeit und Eindeutigkeit der Lösungen des entkoppelten Systems eingehen. Wir betrachten dabei separat die Lösungstheorie der Diffusionsgleichung (vgl. Abschnitt 4.1) und die von Systemen von gewöhnlichen Differentialgleichungen (vgl. Abschnitt 4.2).

In dem folgenden Kapitel 5 gehen wir zuerst in Abschnitt 5.1 auf die zum Lösen unseres Problems benötigten Diskretisierungstechniken ein und beschreiben in Abschnitt 5.2 schematisch den Aufbau unserer Implementierung.

Anschließend unterziehen wir unser Programm in Kapitel 6 mehreren Tests, um die Richtigkeit der Implementierung nachzuweisen. Dafür untersuchen wir in Abschnitt 6.1 die numerische Lösung der Diffusionsgleichung bevor wir in Abschnitt 6.2 die des ODE-Systems validieren.

Im letzten Kapitel fassen wir die wesentlichen Erkenntnisse dieser Arbeit zusammen und geben einen Ausblick, wie unser Programm beziehungsweise unsere mathematischen Modelle weiter verbessert werden könnten.

## Kapitel 2

# Motivation und biologischer Hintergrund

In diesem Kapitel werden wir – bevor wir schließlich in Kapitel 3 auf unser mathematisches Modell eingehen – dieses motivieren und den biologischen Hintergrund erläutern. Da es sich hierbei um eine mathematische Arbeit handelt, werden wir jedoch nicht allzu tief in die biologischen Vorgänge eintauchen.

Jeder kennt das: Man schneidet sich und hofft, dass sich die frische Wunde nicht entzündet, denn dies würde zusätzliche Schmerzen und einen lästigen Gang zum Arzt bedeuten, der einem dann ein Antibiotikum verschreibt. Ein Mittel also, welches das Wachstum schädlicher Mikroorganismen, wie zum Beispiel Bakterien, hemmt oder sie sogar abtötet. In den meisten Fällen jedoch schafft es unser Körper von alleine, sich gegen schädliche Mikroorganismen zu wehren. Doch wie tut er das?

Um dies zu klären, bleiben wir bei unserem Beispiel mit der offenen Wunde. Für den Heilungsprozess werden sogenannte *Neutrophile* benötigt. Neutrophile sind vom Körper gebildete Immunzellen und bilden mit einem Anteil von über 50% den größten Teil der weißen Blutkörperchen. Sie sorgen dafür, dass keine Fremdkörper in unseren Körper gelangen, indem sie beispielsweise schädliche Bakterien aufnehmen und zersetzen. Diese Form der Neutrophile nennt man *Phagozyten*. Ein anderer Weg um die Mikroorganismen zu töten, ist das Ausscheiden von verschiedenen Substanzen, welche den Mikroorganismen zusetzen. Doch auch hier stellt sich die Frage, woher wissen die Neutrophile, wo die Bakterien sind? Und wie bewegen sie sich dort hin?

Um dies zu beantworten, verlassen wir unser Beispiel und kommen nun zu dem Begriff der *chemotaktischen Bewegung*, das heißt Bewegung, welche durch chemische Reize verursacht wird. Dabei gibt es zwei verschiedene Fortbewegungsrichtungen. Wird die Bewegung in Richtung des positiven *Stoffkonzentrationsgradienten* eines chemischen Stoffes ausgerichtet, so sprechen wir von einem *Lockstoff* oder *Attractanten* und einer *positiven Chemotaxis*. „Flieht“ hingegen die Zelle vor dem *Schreckstoff* oder *Repellent*, so bezeichnen wir dies als *negative Chemotaxis*. Wir werden uns hier auf den Fall der positiven Chemotaxis beschränken.

Dazu betrachten wir auf der einen Seite Eukaryoten, also Lebewesen mit einem Zellkern, und auf der anderen Seite Prokaryoten, Lebewesen ohne einen Zellkern, da von beiden verschiedene Mechanismen genutzt werden, um einen solchen Stoffkonzentrationsgradienten zu messen. Die Eukaryoten und Prokaryoten unterscheiden sich nicht nur aufgrund des Vorhandenseins beziehungsweise nicht Vorhandenseins

eines Zellkerns, sondern auch, und das ist in unserem Fall von großer Bedeutung, in ihrer Größe. Sind Eukaryoten im Durchschnitt etwa  $10 - 100\mu m$  groß, so sind Prokaryoten nur  $0.1 - 10\mu m$  klein. Untersuchen wir nun beide Zelltypen auf den von ihnen genutzten Mechanismus zur Bewegungssteuerung, so stellen wir schnell fest, dass sie sich grundlegend unterscheiden.

Prokaryoten bewegen sich, sehr vereinfacht dargestellt, zufällig umher und nehmen in zeitlichen Abständen eine Art Probe ihrer Umgebung auf. Auf dieser Grundlage richten sich die Prokaryoten über die Änderung der Konzentration in den über die Zeit genommenen Proben neu aus. Steigt die Konzentration des Lockstoffes, so behält die Zelle ihre Bewegungsrichtung, nimmt sie ab, so ändert die Zelle diese. Anders ist es bei Eukaryoten. Hier wollen wir genauer auf den genutzten Mechanismus eingehen, da er den Grundbaustein unseres späteren Modells bildet.

Eukaryoten nehmen nicht über die Zeit hinweg verschiedene Proben auf und „werten diese aus“, sondern messen über ihre Membran die unterschiedlich hohen Konzentrationen der angrenzenden Flüssigkeiten. Bei Prokaryoten ist dies aufgrund ihres deutlich kleineren Umfangs/Volumens nicht möglich.

Solange keinerlei Lockstoffe vorhanden sind, besitzt ein Eukaryot kein *Vorne* und *Hinten* und die Zelle hat ein relativ symmetrisches Innenleben. Wird sie jedoch auf einen Lockstoff aufmerksam, so ändert sich dies. Betrachten wir dazu Abbildung 2.1:

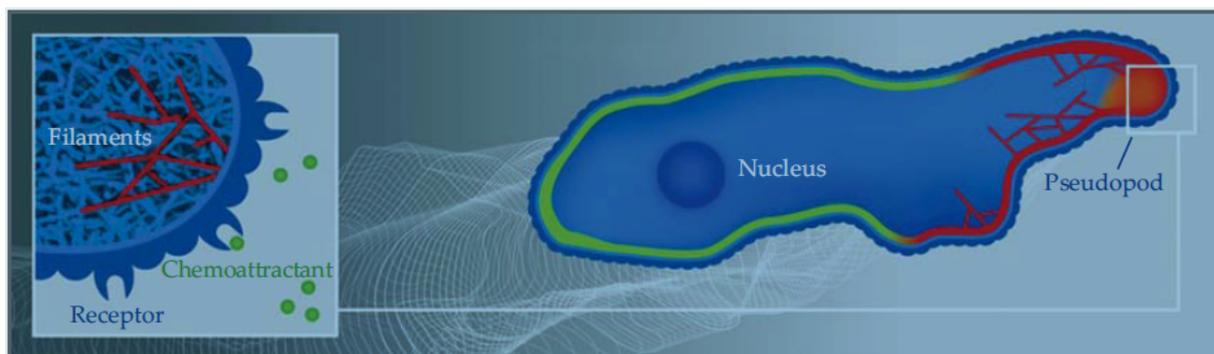


Abbildung 2.1: Darstellung eines Eukaryoten während der Bewegung (vgl. [Levine])

Zu sehen ist auf der rechten Seite ein Eukaryot mit seinem Zellkern, auch *Nucleus* genannt, und auf der linken Seite der Abbildung eine Vergrößerung der Membran an der Stelle des Lockstoffes, hier als *Chemoattractant* bezeichnet. Über die in der Vergrößerung gezeigten *Rezeptoren* nimmt die Zelle wahr, ob und wie viel Lockstoff an der jeweiligen Stelle der Membran vorliegt und bindet Teile des Lockstoffs vorläufig. Bis zum Wahrnehmen von Lockstoffen sind die Rezeptoren gleichmäßig und symmetrisch über die Membran verteilt. Dies ist in Abbildung 2.1 als grüne Membran dargestellt. Wenn die Zelle in eine Substanz mit einem Lockstoffgradienten gerät, verteilen sich die Rezeptoren und ihre Anordnung wird asymmetrisch, mit mehr Rezeptoren an Stellen der Membran mit einer höheren Konzentration des Lockstoffes, hier rot gekennzeichnet. Von nun an können wir somit von einem vorderen (Stelle der Membran mit viele Rezeptoren) und hinteren (Stelle der Membran mit wenigen Rezeptoren) Teil der Zelle sprechen. Durch die Veränderung der Anordnung der Rezeptoren kommt es zu einer Reizung der inneren Signalwege, was wiederum in der gerichteten Polymerisation von *Aktinfilamenten* am vorderen Teil der Zelle resultiert. Diese bewirken in den entsprechenden Bereichen der Zelle eine Deformation

der Membran. Die Filamente drücken gegen die Membran, wodurch sich Plasmaausstülpungen, auch *Pseudopodien* genannt, bilden (siehe hierfür auch Abbildung 2.1). Offensichtlich muss durch die Bewegung im vorderen Teil der Zelle eine entsprechende Reaktion im hinteren Teil der Zelle stattfinden. Dieses „Mitziehen“ des hinteren Teiles der Zelle geschieht durch das Motorprotein *Myosin*, welches auch für unsere Muskelkontraktion zuständig ist. Wie genau Myosin mit Aktin reagiert, werden wir anhand folgender vereinfachter Abbildung 2.2 erläutern.

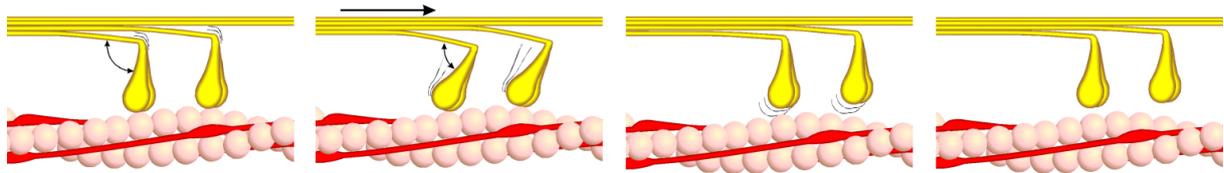


Abbildung 2.2: Darstellung der vier Phasen des sogenannten *Querbrückenzyklus* zur Reaktion von Myosin mit Aktin (vgl. [Wiki])

Im ersten Bild von Abbildung 2.2 ist die orthogonale Bindung von Myosin (gelb) an Aktin (rosa) zu sehen. Anschließend klappt das Myosin ein und führt so eine Bewegung nach rechts aus, dargestellt durch den Pfeil (Bild 2). Nun löst sich das Myosin von dem Aktin (Bild 3) und befindet sich schließlich ein Stück weiter links am Aktinstrang wieder im Ruhezustand (Bild 4).

Durch mehrfache Wiederholung dieses Mechanismus wird somit ein Nachziehen des hinteren Teils der Zelle bewirkt. Doch nicht nur das Zusammenspiel von Myosin mit Aktin spielt bei der Bewegung eine Rolle, auch die entstandene Oberflächenspannung und Biegesteifigkeit der Membran, sowie die Reibung mit dem externen chemischen Substanzen haben hier einen großen Einfluss.

Durch das Bilden von Pseudopodien im vorderen Teil, sowie das Nachziehen des hinteren Teils der Zelle bewegt sich die Zelle schließlich vorwärts. Sie tut dies solange in eine Richtung, bis die Membran an einer anderen Stelle eine erhöhte Konzentration des Lockstoffes wahrnimmt und dann die Pseudopodien in diesem Bereich der Zelle gebildet werden.

Mit diesem Wissen können wir jetzt in Kapitel 3 unser mathematisches Modell aufstellen und erklären.

## Kapitel 3

# Mathematische Modelle

In diesem Kapitel werden wir ein stark vereinfachtes mathematisches Modell einer durch einen Lockstoff bewegten idealisierten Zelle darstellen. Dazu werden wir zuerst in Abschnitt 3.1 erläutern, wie wir eine Zelle möglichst einfach mathematisch beschreiben können. Anschließend stellen wir in 3.2 ein Modell vor, welches dafür sorgt, dass sich unser Lockstoff innerhalb unseres betrachteten Gebietes realistisch ausbreitet, bevor wir schließlich in 3.3 zu dem Modell kommen, welches für unsere Zellbewegung zuständig ist. Abschließend fassen wir in 3.4 die wichtigsten Gleichungen zusammen und stellen unser gekoppeltes System, bestehend aus Gleichungen aus den vorherigen Kapiteln, dar.

Wir nehmen von nun an an, dass wir ein beschränktes Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  vorgegeben haben, in welchem sich unsere Zelle befinden soll.

### 3.1 Mathematisches Modell einer Zelle

Wie in Abschnitt 2 beschrieben, können sich an jeder Stelle der Membran einer Zelle sogenannten Pseudopodien bilden, abhängig von entsprechenden Faktoren, wodurch es mathematisch nahezu unmöglich ist, eine Zelle realistisch korrekt darzustellen, da sich ihre Form ständig ändert und zu keinem Zeitpunkt eine bekannte geometrische Form annimmt. Darum verwenden wir ein vereinfachtes Modell einer Zelle und nehmen an, dass unsere Zelle ellipsenförmig ist und keinerlei Pseudopodien ausbilden kann. Die Zelle wird also über die Zeit hinweg immer einen glatten Rand besitzen. Die gewählte Darstellung erlaubt immer noch eine gleichförmige Verschiebung, eine Veränderung der Form (Länge der Hauptachse) und eine Veränderung der Orientierung. Außerdem vernachlässigen wir den inneren Aufbau einer Zelle. Betrachten wir dazu Abbildung 3.1.

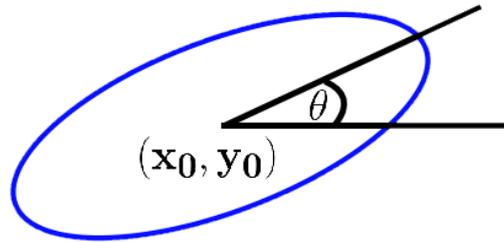


Abbildung 3.1: Vereinfachte Darstellung einer Zelle mit Mittelpunkt  $(x_0, y_0)$  und Suchrichtung  $\theta$

In Abbildung 3.1 ist in blau die ellipsenförmige Zelle mit Mittelpunkt  $(x_0, y_0)$  dargestellt. Weiter benötigen wir noch einen Parameter für die Größe einer Zelle. Dazu wählen wir  $2R, R > 0$ , als Länge der ersten Hauptachse, welche in Richtung von  $\theta \in [0, 2\pi]$  zeigt. Die dazu orthogonale Achsenlänge, bezeichnet mit  $2r, r > 0$ , ergibt sich schließlich durch die Annahme, dass unsere Zelle während des gesamten Prozesses keine Volumenänderung erfahren soll. Durch eine kurze Rechnung erhalten wir so

$$\text{Gegebenes Volumen einer Zelle : } V = \pi R r \Leftrightarrow r = \frac{V}{\pi R}.$$

Der eingeführte Winkel  $\theta$  wird im Folgenden mit „Suchrichtung“ bezeichnet und entspricht der Häufung von Rezeptoren beziehungsweise der Ausbildung der Pseudopodien. Wo sich in der Realität die Form der Zelle verändert, um eine Richtungsänderung vorzunehmen, passen wir den Winkel  $\theta$  der ersten Hauptachse an.

Somit haben wir nun alles zusammen, um eine Parametrisierung des Randes unserer Zelle anzugeben:

$$\psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi) = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + R \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \cos \varphi + r \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \sin \varphi \quad \text{für } 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \quad (3.1)$$

Hierbei wollen wir darauf aufmerksam machen, dass unsere Parameter  $R, r, x_0, y_0, \theta$  von der Zeit abhängig sind, d.h. wir haben  $R = R(t), r = r(t), \theta = \theta(t)$  und  $x_0 = x_0(t), y_0 = y_0(t)$  für ein  $t \in [0, T]$  mit  $T > 0$  als Ende unseres Zeitintervalls, da sich unsere Zelle mit der Zeit  $t$  bewegen soll.

Weiter werden wir an dieser Stelle das Lienienelement  $|\partial_\varphi \psi(\varphi)|$  berechnen, da wir diesen Term in den Abschnitten 3.2 und 3.3 mehrfach benutzen werden. Dazu betrachten wir zuerst  $\partial_\varphi \psi(\varphi)$

$$\partial_\varphi \psi(\varphi) = -R \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \sin \varphi + r \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \cos \varphi$$

und berechnen nun den Betrag. Hier ergibt sich nach einiger Rechnung und Ausnutzen, dass  $\sin^2(\varphi) + \cos^2(\varphi) = 1$  gilt, folgender Ausdruck für  $|\partial_\varphi \psi(\varphi)|$

$$|\partial_\varphi \psi(\varphi)| = \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Abschließend in diesem Abschnitt sei erwähnt, dass – wenn wir  $N \in \mathbb{N}$  mit  $N > 1$  Zellen untersuchen – wir für jede der eingeführten  $N$  Zellen eine eigene Parametrisierung  $\psi_{x_{0j}, y_{0j}, R_j, \theta_j}$  mit  $j = 1, 2, \dots, N$  erhalten.

### 3.2 Mathematisches Modell zur Verteilung unseres Lockstoffes

Als nächstes werden wir uns überlegen, wie wir mathematisch beschreiben können, wie sich unser Lockstoff auf unserem Gebiet  $\Omega \in \mathbb{R}^2$  mit der Zeit verteilt. Dazu müssen wir uns zuerst Gedanken darüber machen, was unser Modell leisten soll. Wir wollen in unserem einfachen Fall eine Beschreibung für die ungerichtete Diffusion sowie für den kontinuierlichen Verfall des Stoffes erhalten. Außerdem wollen wir, dass unsere Zelle selber Lockstoff produzieren kann, um andere Zellen anzulocken.

Wir bedienen uns als Basis unseres Modells der *Diffusionsgleichung* für unsere Konzentration  $S = S(\mathbf{x}, t)$  für  $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$  und  $t \in [0, T]$  unseres Lockstoffes, da diese genau den ersten Punkt unserer Forderung erfüllt, die ungerichtete Diffusion. Im weiteren Verlauf werden wir die Diffusionsgleichung für unseren Zweck modifizieren. Betrachten wir zuerst aber die herkömmliche homogene Diffusionsgleichung

$$\begin{aligned}\partial_t S &= D\Delta S \quad \text{in } \Omega \times ]0, T] \\ S(\mathbf{x}, 0) &= S_0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ S(\mathbf{x}, t) &= g \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times [0, T]\end{aligned}$$

Dabei sind  $S_0(\mathbf{x})$  und  $g(\mathbf{x}, t)$  gegeben glatte Anfangs- beziehungsweise Randwerte.  $\partial_t S$  beschreibt die partielle Ableitung der Konzentration nach  $t$ , also die Änderung der Konzentration über die Zeit,  $\Delta S$  den Laplace-Operator von  $S$ , also  $\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2}$  und  $D > 0$  ist die sogenannte Diffusionskonstante, welche angibt, wie schnell die betrachtete Substanz im Raum diffundiert.

Die erste Änderung, die wir einbauen wollen, ist der *kontinuierliche Verfall*, da wir davon ausgehen wollen, dass sich unser Lockstoff mit der Zeit „auflöst“. Dazu subtrahieren wir  $aS$  auf der rechten Seite, mit  $a > 0$  als Gewichtung. Wir erhalten so

$$\partial_t S = D\Delta S - aS.$$

Als nächstes fügen wir, wieder mit einer Gewichtung  $b > 0$ , die Produktion des Lockstoffes durch die Zelle selber ein. Es ergibt sich

$$\partial_t S = D\Delta S - aS + bf \tag{3.2}$$

mit einer Funktion  $f$ , welche wir nun näher charakterisieren werden.

Ziel ist es, zu erreichen, dass wir auf dem Rand unserer Zelle neuen Lockstoff produzieren. Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst nur eine Zelle und definieren folgende Funktion  $f_{x_0, y_0, R, \theta}(\mathbf{x}): \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$f_{x_0, y_0, R, \theta}(\mathbf{x}) := \int_{\Gamma} \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) \tag{3.3}$$

mit  $\delta_\varepsilon$  als glatte Approximation der *Dirac-Distribution*,  $\Gamma$  Rand der Zelle und  $\sigma$  Linienelement. Mittels der Parametrisierung  $\psi$  der Zelle erhalten wir so

$$f_{x_0, y_0, R, \theta}(\mathbf{x}) := \int_0^{2\pi} \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi. \tag{3.4}$$

Wir werden im Folgenden anhand eines eindimensionalen Beispiels näher erklären, wie wir auf diese spezielle Gestalt von  $f$  gekommen sind.

Durch den eindimensionalen Fall können wir  $\Omega = [-2.0, 2.0] \in \mathbb{R}$  wählen und unsere Zelle reduziert sich durch die Wahl von  $R = 0.5$  und  $x_0 = 0.5$  ebenfalls auf ein Intervall  $[0.0, 1.0]$  mit einer Parametrisierung des Randes bestehend aus lediglich den Anfangs- und Endstellen  $\bar{x}_1 = 0.0 \in \Omega$  und  $\bar{x}_2 = 1.0 \in \Omega$ . Wir haben hier also keine stetige Randkurve  $\psi$  mehr. Damit fällt unser Randintegral in Gleichung (3.4) zu einer Summe mit zwei Summanden, einer für jede Randstelle, zusammen.

Betrachten wir nun die Dirac-Approximation  $\delta_\varepsilon$  im ersten Teil des Integrals von Gleichung (3.4).

Dazu sei  $\varepsilon > 0$  und wir setzen als Approximation der Dirac-Approximation die etwas modifizierte *Gaußglocke* in 1D, sowie für später auch die in 2D.

**Definition 3.2.1. (Gaußkurve)**

1D) Sei  $\bar{x} \in \mathbb{R}$ . Dann definieren wir  $\delta_\varepsilon: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  durch  $\delta_\varepsilon(x - \bar{x}) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} e^{-\frac{1}{\varepsilon}(x-\bar{x})^2}$

2D) Sei  $(\bar{x}, \bar{y}) \in \mathbb{R}^2$ . Dann definieren wir  $\delta_\varepsilon: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  durch  $\delta_\varepsilon(x - \bar{x}, y - \bar{y}) = \frac{1}{\varepsilon} e^{-\frac{1}{\varepsilon}((x-\bar{x})^2 + (y-\bar{y})^2)}$

Kommen wir zurück zu unserem Beispiel. Wir betrachten erneut Gleichung (3.4), welche sich nach Berücksichtigung aller genannten Spezifikationen zu

$$f_{x_0, R}(x) := \delta_\varepsilon(x - \bar{x}_1) + \delta_\varepsilon(x - \bar{x}_2) \quad (3.5)$$

ergibt. Wählen wir  $\varepsilon = \frac{1}{500}$ , so erhalten wir folgende Abbildung 3.2.

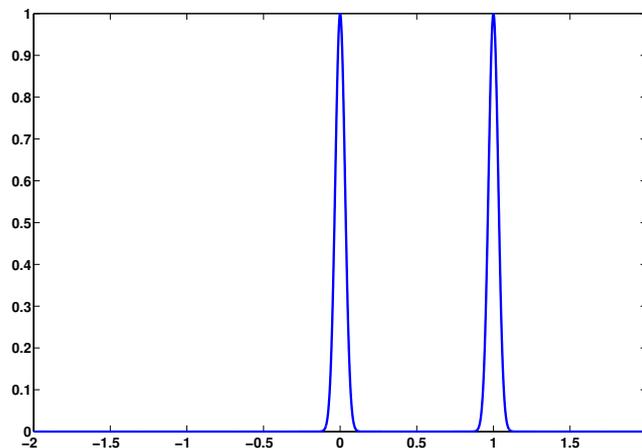


Abbildung 3.2: Menge der Eigenproduktion des Lockstoffes einer Zelle in 1D mit den Randstellen 0.0 und 1.0

Deutlich zu erkennen ist in Abbildung 3.2, dass mit der gewählten Konfiguration genau zwei Peaks an den gewünschten Stellen entstehen. Für  $\varepsilon \rightarrow 0$  würde die Breite der beiden Peaks gegen Null konvergieren.

In 2D ergibt sich so in jedem der unendlich vielen Punkte auf der Randkurve  $\psi$  ein Peak, wie er in Abbildung 3.3 beispielhaft für den Punkt  $(0.5, 0.5)$  und  $\varepsilon = \frac{1}{2000}$  abgebildet ist, wodurch eine stetige Verteilung des Lockstoffes entlang des Randes der Zelle entsteht.

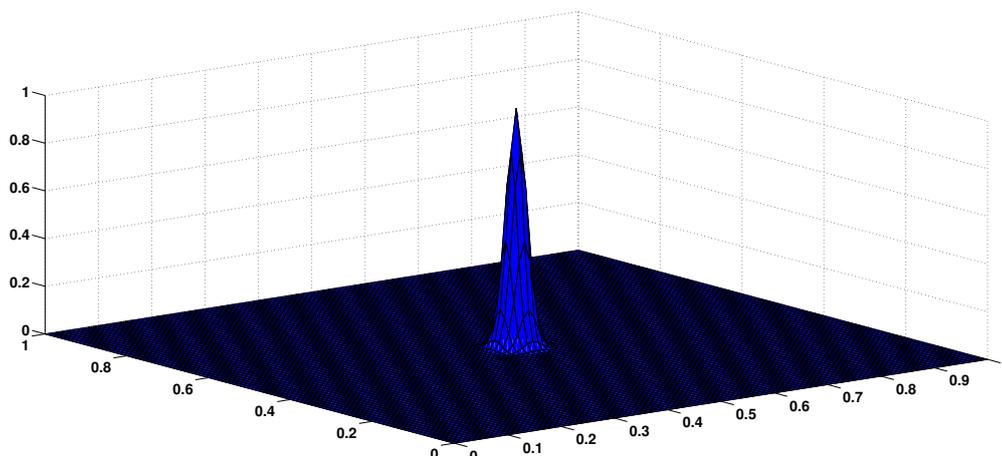


Abbildung 3.3: Gaußglocke  $\delta_\varepsilon$  in 2D mit dem Peak bei  $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$  und  $\varepsilon = \frac{1}{2000}$

Auch hier gilt wieder, dass für  $\varepsilon \rightarrow 0$  der Peak immer schmaler wird und die Gaußglocke eine immer bessere Approximation an die  $\delta$ -Distribution liefert.

Abschließend werden wir in diesem Abschnitt eine Umformulierung der Gleichung (3.2) vornehmen. Multiplizieren wir dafür diese mit  $e^{at}$ . Es ergibt sich

$$\begin{aligned} 2\partial_t S e^{at} &= D\Delta S e^{at} - a S e^{at} + b f e^{at} \\ \Leftrightarrow \partial_t S e^{at} + a S e^{at} &= D\Delta S e^{at} + b f e^{at} \\ \Leftrightarrow \partial_t (S e^{at}) &= D\Delta S e^{at} + b f e^{at}. \end{aligned}$$

Setzen wir nun  $D = 1$  und  $\tilde{S} = S e^{at}$ ,  $\tilde{f} = f e^{at}$ , so erhalten wir

$$\partial_t \tilde{S} = \Delta \tilde{S} + b \tilde{f}. \quad (3.6)$$

Wir haben somit unsere modifizierte Diffusionsgleichung wieder in eine „normale“ Diffusionsgleichung umgeformt und können für diese in Abschnitt 4.1 die gewöhnliche Theorie zur Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen von Wärme- beziehungsweise Diffusionsgleichungen anwenden, da das Multiplizieren der Gleichung mit  $e^{at}$  an der Lösbarkeit nichts ändert.

### 3.3 Mathematisches Modell des Evolutionsgesetzes unserer Zelle

Nachdem wir in den vorherigen Abschnitten die Parametrisierung der Zelle und das Verhalten unseres Lockstoffes mathematisch beschrieben haben, ist der nächste Schritt, ein Gesetz zu finden, dem die Bewegung unserer Zelle folgt.

In Abschnitt 2 haben wir erklärt, dass die Zelle über Rezeptoren in der Membran wahrnimmt, wo der Lockstoff ist und wie viel davon an der jeweiligen Stelle der Membran vorhanden ist. Dies wollen wir nun mathematisch umsetzen und überlegen uns dazu eine Funktion, in Zukunft mit *Energie* bezeichnet, welche die Stoffmittelkonzentration am Rand misst und anschließend bewertet. Mit „bewerten“ meinen wir hier Folgendes: Nehmen wir an, dass unsere Zelle waagrecht in unserem Gebiet  $\Omega$  liegt und es eine ungleiche Verteilung der Lockstoffkonzentrationen in  $\Omega$  gibt. Auf der rechten Seite der Zelle herrscht eine hohe Konzentration und auf der linken Seite eine niedrige. Die Zelle sollte sich nun nach rechts bewegen, hin zur hohen Konzentration und weg von der niedrigen. Um dies zu erreichen, ordnen wir Stellen auf dem Rand mit hoher Konzentration eine niedrige Energie zu und Stellen niedriger Konzentration eine hohe Energie.

Über das Prinzip der Energieminimierung erhalten wir dann unser gewünschtes Ergebnis: Die Zelle wandert nach rechts. Hierzu im Verlaufe dieses Abschnitts mehr.

Kommen wir nun zu der konkreten Beschreibung der Energie  $E$ .

Unsere Energie  $E$  ergibt sich über den oben erläuterten Ansatz und mit  $\psi$  als Parametrisierung des Randes der Zelle (vgl. Gleichung (3.1)) sowie  $S$  als Lockstoffkonzentration in  $\Omega$  zu

$$\tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta; S) = \int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)) \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi. \quad (3.7)$$

Hier gilt  $\alpha \in C^\infty(\mathbb{R})$  mit  $\alpha: \mathbb{R} \rightarrow ]0, \infty[$  beliebige monoton fallende Funktion. Außerdem definieren wir  $\sigma(\varphi)$  wie folgt mit  $\sigma_0 > 0$

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} \sigma_0, & \varphi \in [a, b] \subset [0, 2\pi] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.8)$$

und setzen  $\sigma$   $2\pi$ -periodisch fort. Wir führen Definition 3.8 ein, da wir so unserer Zelle einen „Suchkopf“ geben können. Das heißt, wenn wir beispielsweise  $[a, b] = [-\frac{\pi}{16}, \frac{\pi}{16}]$  einführen, so reduzieren sich die Grenzen von dem Integral in (3.7) auf eben genau dieses Intervall, wodurch die Energie nur in diesem Bereich des Randes der Zelle ausgewertet wird. Biologisch können wir dies so interpretieren, dass die Zelle nur in diesem Bereich Rezeptoren zur Wahrnehmung des Lockstoffes besitzt.

Für eine bessere Anschauung setzen wir  $\sigma(\varphi) = 1$ . Dann ergibt Gleichung (3.7) mit  $\psi(\varphi) = \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)$

$$\tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) = \int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi(\varphi)) |\partial_\varphi \psi(\varphi)| d\varphi. \quad (3.9)$$

Die rechte Seite in (3.9) ist ein Kurvenintegral, welches über den kompletten Rand unsere Zelle integriert und somit die ganze Zelle erfasst. Die Konzentration am Rand der Zelle wird über den Term  $S \circ \psi(\varphi)$  berechnet und anschließend in  $\alpha$  ausgewertet. Da wir  $\alpha$  als positive, stetige und vor allem monoton fallende Funktion gewählt haben, wird hier einem hohen Wert  $S \circ \psi(\varphi)$  (hohe Konzentration am

Rand) ein kleiner Wert zugeordnet und dementsprechend ein großer Wert für eine kleine Konzentration. Gleichung (3.9) erfüllt somit genau unsere oben beschriebenen Forderungen.

Entscheidend für unsere spätere Simulation ist die Wahl von  $\alpha$ . Wir haben uns für die Funktion  $\alpha(s) = e^{-s}$  entschieden, da diese Funktion alle gewünschten Eigenschaften erfüllt, vergleiche hierfür Abbildung 3.4.

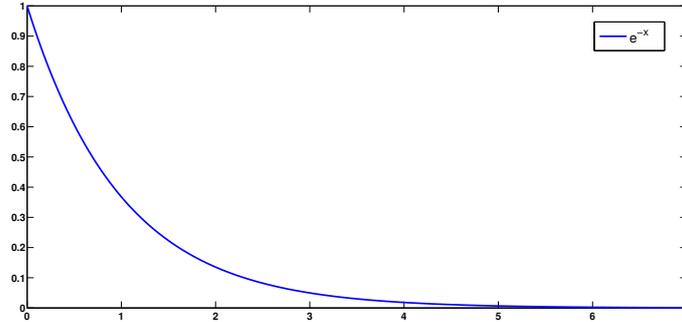


Abbildung 3.4: Graphische Darstellung von  $\alpha(s) = e^{-s}$

Da wir  $E$  als eine Art Energie auffassen, können wir über das Prinzip der Energieminimierung die entscheidenden Bewegungsgleichungen aufstellen. Dazu überlegen wir uns, dass  $\nabla_{(x_0, y_0, R, \theta)} E(x_0, y_0, R, \theta)$  gerade in Richtung des steilsten Anstieges der Energie zeigt und somit  $-\nabla_{(x_0, y_0, R, \theta)} E(x_0, y_0, R, \theta)$  in Richtung des steilsten Abstieges. Setzen wir die zeitliche Änderung unserer Zellparameter  $x_0, y_0, R$  und  $\theta$  als eben genau diese negativen Ableitungen, so erhalten wir mit den neuen Werten von  $x_0, y_0, R$  und  $\theta$  eine niedrigere Energie  $E$ .

Es ergibt sich folgendes Gleichungssystem mit vier gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{\partial}{\partial t} x_0 = -\nabla_{x_0} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \tag{3.10}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} y_0 = -\nabla_{y_0} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \theta = -\nabla_{\theta} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \tag{3.12}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} R = -\nabla_R \left( \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \right). \tag{3.13}$$

Hier fällt Gleichung (3.13) direkt ins Auge, da ihre Struktur von der der anderen abweicht. Das hat einen einfachen Grund: In den Gleichungen (3.10) bis (3.12) ändert sich nur die Position (Gleichungen (3.10) und (3.11)) und die Ausrichtung (Gleichung (3.12)) der Zelle, nicht jedoch ihre Gestalt. In Gleichung (3.13) ist dies anders. Hier ändert sich der Hauptachsenradius der Zelle und damit das Bogenmaß der Parametrisierung. Um dies zu kompensieren, ermitteln wir über  $\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi$  die Länge unserer für die Energie relevante Randkurve und skalieren die Energie hiermit. Der Grund für diese Skalierung lässt sich noch deutlicher erkennen, wenn wir uns die genaue Darstellung von  $\nabla_R \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta)$  anschauen.

Rufen wir uns dazu  $\tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta)$  in Erinnerung und setzen unsere konkrete Darstellung von  $|\partial_\varphi \psi(\varphi)|$

(vgl. Abschnitt 3.1) ein

$$\tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) = \int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} d\varphi. \quad (3.14)$$

Differenzieren wir Gleichung (3.14) nach  $R$ , so erhalten wir

$$\begin{aligned} \nabla_R \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) &= \int_0^{2\pi} \alpha'(S \circ \psi(\varphi)) \nabla_{\mathbf{x}} S \cdot \left[ \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \cos \varphi - \frac{V}{\pi R^2} \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \sin \varphi \right] \\ &\quad \cdot \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} + \alpha(S \circ \psi) \sigma(\varphi) \\ &\quad \cdot \frac{1}{2} \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] d\varphi. \end{aligned}$$

Setzen wir jetzt unsere Konzentration  $S \equiv 0$ , so verschwindet der erste Summand wegen  $\nabla_{\mathbf{x}} S \equiv 0$  und es bleibt mit  $\alpha(S \circ \psi) = \alpha(0) = e^0 = 1$  übrig

$$\nabla_R \tilde{E} = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] d\varphi.$$

Dies sollte in der Vorstellung jedoch Null sein, da bei keinem Lockstoff auch keine Änderung des Radius geschehen sollte. Hier erhalten wir jedoch einen Term ungleich Null. Betrachten wir den Term genauer, so stellen wir fest, dass dies genau der Ableitung von  $\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi(\varphi)| d\varphi$  nach  $R$  entspricht.

Betrachten wir hingegen Gleichung (3.13), berechnen hier die Ableitung nach  $R$  und setzen  $S \equiv 0$  ein, so erhalten wir nach einer kleiner Rechnung

$$\begin{aligned} \nabla_R \left( \frac{1}{\int_a^b \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \right) &= \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] \sigma(\varphi) d\varphi \\ &\quad + (-1) \left( \frac{1}{\int_a^b \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \right)^2 \int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi(\varphi)| d\varphi \\ &\quad \cdot \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] \sigma(\varphi) d\varphi = 0. \end{aligned}$$

Somit ist gezeigt, dass unsere Modifikation der Gleichung (3.13) den gewünschten Effekt erzielt.

Wir definieren nach diesen Resultaten

$$E(x_0, y_0, R, \theta) = \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi.$$

In Zukunft beziehen wir uns immer auf diese Definition, sollten wir von der Energie der Zelle sprechen. Ausgehend von den Gleichungen (3.10) bis (3.13) können wir nun mittels Lemma 3.3.1 beweisen, dass durch die Wahl der rechten Seite in der Tat unsere Energie  $E$  reduziert wird.

**Lemma 3.3.1. (Reduzierung der Energie)**

Sei  $S$  gegeben und unabhängig von der Zeit. Dann gilt unter den Bedingungen (3.10) - (3.13) für hinreichend reguläre Lösungen  $x_0(t), y_0(t), R(t)$  und  $\theta(t)$

$$\frac{d}{dt}E(x_0, y_0, R, \theta) \leq 0 \quad \forall t > 0$$

und „=“ genau dann, wenn  $x_0(t), y_0(t), R(t)$  und  $\theta(t)$  unabhängig von  $t$  sind.

**Beweis:** Betrachte mit  $E(x_0, y_0, R, \theta) = E$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E &= \nabla_{x_0}E \cdot \dot{x}_0 + \nabla_{y_0}E \cdot \dot{y}_0 + \nabla_{R}E \cdot \dot{R} + \nabla_{\theta}E \cdot \dot{\theta} \\ &= \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_{\varphi}\psi| d\varphi} \left( \nabla_{x_0}\tilde{E} \cdot \dot{x}_0 + \nabla_{y_0}\tilde{E} \cdot \dot{y}_0 + \nabla_{\theta}\tilde{E} \cdot \dot{\theta} \right) + \nabla_{R}E \cdot \dot{R}. \end{aligned}$$

Hier sehen wir direkt, dass  $\frac{d}{dt}E = 0$  bei stationären Punkten  $x_0, y_0, R$  und  $\theta$  gilt. Womit die zweite Aussage des Lemmas bewiesen wäre.

Setzen wir nun die Identitäten aus den Gleichungen (3.10) bis (3.13) für  $\dot{x}_0, \dot{y}_0, \dot{R}$  und  $\dot{\theta}$  ein, so erhalten wir schließlich mit  $\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_{\varphi}\psi| d\varphi > 0$  unsere erste Behauptung

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E &= \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_{\varphi}\psi| d\varphi} \left( \nabla_{x_0}\tilde{E} \cdot \nabla_{x_0}\tilde{E} - \nabla_{y_0}\tilde{E} \cdot \nabla_{y_0}\tilde{E} - \nabla_{\theta}\tilde{E} \cdot \nabla_{\theta}\tilde{E} \right) - \nabla_{R}E \cdot \nabla_{R}E. \\ &= \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_{\varphi}\psi| d\varphi} \left( \left( \nabla_{x_0}\tilde{E} \right)^2 - \left( \nabla_{y_0}\tilde{E} \right)^2 - \left( \nabla_{\theta}\tilde{E} \right)^2 \right) - \left( \nabla_{R}E \right)^2 \leq 0. \end{aligned}$$

□

Wir erhalten also für eine Zelle ein System von vier gewöhnlichen Differentialgleichungen. Betrachten wir  $N \in \mathbb{N}$  Zellen, erhöht sich dies auf  $4N$  gewöhnliche Differentialgleichungen.

Der Vollständigkeit halber werden wir noch die genauen Darstellungen der rechten Seiten der Gleichungen (3.10) bis (3.13) angeben, da wir sie für die spätere Implementierung benötigen. Sie sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \nabla_{x_0}\tilde{E} &= \int_0^{2\pi} \alpha'(S \circ \psi(\varphi)) \partial_x S(\psi(\varphi)) \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} d\varphi \\ \nabla_{y_0}\tilde{E} &= \int_0^{2\pi} \alpha'(S \circ \psi(\varphi)) \partial_y S(\psi(\varphi)) \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} d\varphi \\ \nabla_{\theta}\tilde{E} &= \int_0^{2\pi} \alpha'(S \circ \psi(\varphi)) \begin{pmatrix} \partial_x S(\psi(\varphi)) \\ \partial_y S(\psi(\varphi)) \end{pmatrix} \cdot \left[ R \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \cos \varphi + \frac{V}{\pi R} \begin{pmatrix} -\cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \sin \varphi \right] \\ &\quad \cdot \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} d\varphi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\nabla_R E &= \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \cdot \int_0^{2\pi} \alpha'(S \circ \psi(\varphi)) \begin{pmatrix} \partial_x S(\psi(\varphi)) \\ \partial_y S(\psi(\varphi)) \end{pmatrix} \\
&\cdot \left[ \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \cos \varphi - \frac{V}{\pi R^2} \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix} \sin \varphi \right] \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} \\
&+ \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma(\varphi) \frac{1}{2} \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \\
&\cdot \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] d\varphi - \left( \frac{1}{\int_0^{2\pi} \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi| d\varphi} \right)^2 \\
&\cdot \int_0^{2\pi} \frac{1}{2} \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{-\frac{1}{2}} \left[ 2R \sin^2(\varphi) - 2 \frac{V^2}{\pi^2 R^3} \cos^2(\varphi) \right] d\varphi \\
&\cdot \int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma(\varphi) \left( R^2 \sin^2(\varphi) + \frac{V^2}{\pi^2 R^2} \cos^2(\varphi) \right)^{\frac{1}{2}} d\varphi.
\end{aligned}$$

### 3.4 Gekoppeltes System

Wie bereits in der Einleitung von diesem Kapitel beschrieben, werden wir nun die Resultate aus den vorherigen Abschnitten 3.1, 3.2 und 3.3 zusammenfassen und schließlich unser endgültiges gekoppeltes System zur Beschreibung von durch einen Lockstoff induzierte chemotaktische Bewegung einer oder mehrerer Zellen angeben.

In Abschnitt 3.1 haben wir die Parametrisierung  $\psi$  zur Beschreibung einer Ellipse als vereinfachtes Modell einer Zelle eingeführt. Dies wollen wir nun für  $N \in \mathbb{N}$  tun. Sei dazu  $\Omega \in \mathbb{R}^2$  ein beschränktes Gebiet und  $t \in [0, T]$  unser betrachtetes Zeitintervall mit  $T > 0$ . Dann gilt für die Parametrisierung des Randes der  $j$ -ten Zelle mit  $j = 1, 2, \dots, N$

$$\psi_{x_{0_j}, y_{0_j}, R_j, \theta_j}(\varphi) = \psi_j(\varphi) = \begin{pmatrix} x_{0_j} \\ y_{0_j} \end{pmatrix} + R_j \begin{pmatrix} \cos \theta_j \\ \sin \theta_j \end{pmatrix} \cos \varphi + r_j \begin{pmatrix} -\sin \theta_j \\ \cos \theta_j \end{pmatrix} \sin \varphi$$

für  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Weiter gelte die in Abschnitt 3.2 hergeleitete Diffusionsgleichung

$$\partial_t \tilde{S} = \Delta \tilde{S} + b\tilde{f} \quad (3.15)$$

mit den dort eingeführten Definitionen für  $\tilde{S}$  und  $\tilde{f}$ . Hier muss jedoch beachtet werden, dass die Funktion  $f$  für mehr als eine Zelle wie folgt definiert ist

$$f(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^N \int_0^{2\pi} \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_j(\varphi)) |\partial_\varphi \psi_j(\varphi)| d\varphi.$$

Schließlich haben wir in 3.3 unser ODE-System hergeleitet. Dies ergibt für den Fall von  $N$  Zellen ein System mit  $4N$  Gleichungen. Für  $j = 1, 2, \dots, N$  erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} x_{0_j} &= -\nabla_{x_{0_j}} \tilde{E}(x_{0_j}, y_{0_j}, R_j, \theta_j) \\ \frac{\partial}{\partial t} y_{0_j} &= -\nabla_{y_{0_j}} \tilde{E}(x_{0_j}, y_{0_j}, R_j, \theta_j) \\ \frac{\partial}{\partial t} \theta_j &= -\nabla_{\theta_j} \tilde{E}(x_{0_j}, y_{0_j}, R_j, \theta_j) \\ \frac{\partial}{\partial t} R_j &= -\nabla_{R_j} E(x_{0_j}, y_{0_j}, R_j, \theta_j). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Zur Lösung dieser Gleichungen ((3.15) sowie (3.16)) entkoppeln wir die Gleichungen wieder und nehmen in Gleichung (3.15) an, dass die Zellparameter  $x_0, y_0, R$  und  $\theta$  gegeben und konstant sind, also unabhängig von  $t$ , sowie in Gleichungen (3.16), dass  $S(\mathbf{x}, t) = S(\mathbf{x})$  gilt.

# Kapitel 4

## Theoretische Grundlagen

Nachdem wir in Kapitel 2 den biologischen Hintergrund unseres mathematischen Modells erklärt haben und anschließend dieses in Kapitel 3 genau beschrieben haben, kommen wir in diesem Kapitel zu der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der entkoppelten Probleme. Dazu werden wir zuerst in Abschnitt 4.1 die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Diffusions-/Wärmeleitungsgleichung untersuchen bevor wir dann in Abschnitt 4.2 unser in 3.3 vorgestelltes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen betrachten.

### 4.1 Lösungstheorie der parabolischen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung

In diesem Abschnitt befassen wir uns mit der Lösungstheorie von parabolischen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Im Besonderen werden wir auf Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen der Diffusions-/Wärmeleitungsgleichung eingehen.

Bevor wir uns mit der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen befassen, werden wir zuerst kurz unser Problem vorstellen und eine Definition eines parabolischen Operators einführen.

Im Folgenden wird angenommen, dass  $\Omega \in \mathbb{R}^n$  offen und  $\Omega_T := \Omega \times (0, T]$  für ein festes  $T > 0$  gilt. Alle gemachten Aussagen in diesem Abschnitt beziehen sich auf [Evans].

#### Definition 4.1.1. (Anfangs-Randwertproblem)

Seien  $\Omega$  und  $\Omega_T$  wie oben, dann definieren wir für unsere unbekannte Funktion  $u: \bar{\Omega}_T \rightarrow \mathbb{R}$

$$u_t + Lu = f \quad \text{in } \Omega_T \tag{4.1}$$

$$u = 0 \quad \text{auf } \partial\Omega \times [0, T] \tag{4.2}$$

$$u = g \quad \text{auf } \Omega \times 0 \tag{4.3}$$

als Anfangs-Randwertproblem (ARWP), wobei es sich bei  $f: \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$  und  $g: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  um gegebene Funktionen handelt. Weiter beschreibt  $L$  einen Differentialoperator zweiter Ordnung und hat die Gestalt

$$Lu = - \sum_{i,j=1}^n a^{ij}(x, t) u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n b^i(x, t) u_{x_i} + c(x, t) u, \tag{4.4}$$

mit gegebenen Koeffizienten  $a^{ij}, b^i, c$  für  $i, j = 1, \dots, n$ . Mit  $u_{x_i}$  und  $u_{x_i x_j}$  werden hier die erste beziehungsweise zweite Ableitung nach der  $i$ -ten beziehungsweise  $j$ -ten Komponente bezeichnet.

Für die Diffusionsgleichung in Abschnitt 3.2 Gleichung (3.6) hier mit  $u$  anstelle von  $S$

$$u_t - \Delta u = f \quad \text{in } \Omega_T \quad (4.5)$$

ergeben sich als Koeffizienten für  $L$

$$a^{ij} = \delta_{ij}, b^i = 0, c = 0 \quad \text{für } i, j = 1, \dots, n, \quad (4.6)$$

wobei  $\delta_{ij}$  das Kronecker-Delta für  $i, j$  beschreiben soll.

Bevor wir mit den Existenzbeweisen anfangen, wollen wir noch eine Definition eines parabolischen Operators angeben und zeigen, dass es sich bei einer Diffusionsgleichung um genau solch einen Operator handelt.

**Definition 4.1.2. (Parabolischer Operator)**

Ein Operator der Form  $\frac{\partial}{\partial t} + L$  heißt parabolisch, falls

$$\sum_{i,j=1}^n a^{ij}(x, t) \zeta_i \zeta_j \geq \theta |\zeta|^2$$

für alle  $(x, t) \in \Omega_T$  und  $\zeta \in \mathbb{R}^n$  gilt.

Es lässt sich schnell erkennen, dass die Diffusionsgleichung (4.5) mit den Koeffizienten in Formel (4.6), Definition 4.1.2 erfüllt und es sich somit um eine parabolische Gleichung handelt.

### 4.1.1 Schwache Lösung

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der Fragestellung auseinander setzen, unter welchen Voraussetzungen unser AWRP in (4.1) bis (4.3) eine schwache Lösung besitzt und ob diese eindeutig definiert ist.

Dazu nehmen wir zuerst folgende Voraussetzungen an unsere in Gleichung (4.4) eingeführten Koeffizienten  $a^{ij}, b^i$  und  $c$  sowie in (4.1) und (4.3) eingeführten Funktionen  $f$  und  $g$  an:

$$a^{ij} = a^{ji} \text{ und } a^{ij}, b^i, c \in L^\infty(\Omega_T) \text{ für } i, j = 1, \dots, n \quad (4.7)$$

$$f \in L^2(\Omega_T) \quad (4.8)$$

$$g \in L^2(\Omega) \quad (4.9)$$

Bevor wir zu einer Definition für die schwache Lösung kommen, wollen wir zur Vereinfachung eine Bilinearform herleiten. Dazu betrachten wir Gleichung (4.1)

$$u_t + Lu = f$$

und setzen die Definition von  $L$  aus (4.4) ein. Wir erhalten so

$$u_t - \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n b^i u_{x_i} + cu = f.$$

Nun multiplizieren wir diese Gleichung mit einer beliebigen Testfunktion  $\varphi \in H_0^1(\Omega)$  und integrieren über unser Gebiet  $\Omega$

$$\int_{\Omega} u_t \varphi dx - \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i x_j} \varphi dx + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n b^i u_{x_i} \varphi dx + \int_{\Omega} c u \varphi dx = \int_{\Omega} f \varphi dx.$$

Nutzen wir aus, dass  $\varphi \in H_0^1(\Omega)$  ist und somit Nullrand besitzt, können wir nach partieller Integration in der ersten Summe

$$- \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i x_j} \varphi = \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i} \varphi_{x_j}$$

folgendes Resultat festhalten:

$$\int_{\Omega} u_t \varphi dx + \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i} \varphi_{x_j} + \sum_{i=1}^n b^i u_{x_i} \varphi + c u \varphi dx = \int_{\Omega} f \varphi dx.$$

Dadurch motiviert definieren wir uns

$$B[u, \varphi; t] := \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i} \varphi_{x_j} + \sum_{i=1}^n b^i u_{x_i} \varphi + c u \varphi dx \quad (4.10)$$

sowie als abkürzende Schreibweise für das  $L^2$ -Standardskalarprodukt

$$(u_t, \varphi) = \int_{\Omega} u_t \varphi dx \quad \text{und analog} \quad (f, \varphi) = \int_{\Omega} f \varphi dx.$$

Darüber hinaus führen wir eine Uminterpretation für unsere Funktion  $u = u(x, t)$  durch. Anstelle  $u: \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$  zu schreiben, definieren wir

$$\mathbf{u}: [0, T] \rightarrow H_0^1(\Omega) \quad \text{mit} \quad [\mathbf{u}(t)](x) := u(x, t).$$

Das heißt, wir fassen  $\mathbf{u}(t)$  als Funktion im Raum  $H_0^1(\Omega)$  in der Variablen  $x$  auf. Analoges führen wir mit der Funktion  $f$  durch und erhalten so

$$\mathbf{f}: [0, T] \rightarrow L^2(\Omega) \quad \text{mit} \quad [\mathbf{f}(t)](x) := f(x, t).$$

Somit erhalten wir aus Gleichung (4.1) folgendes Resultat

$$\left( \frac{d\mathbf{u}}{dt}, \varphi \right) + B[\mathbf{u}, \varphi; t] = (\mathbf{f}, \varphi).$$

Nun können wir mithilfe dieser Herleitungen eine Definition für eine schwache Lösung geben.

**Definition 4.1.3. (Schwache Lösung)**

Eine Funktion  $\mathbf{u} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$  mit  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega))$  heißt *schwache Lösung* unseres ARWP aus (4.1) bis (4.3), falls

$$(\mathbf{u}', \varphi) + B[\mathbf{u}, \varphi; t] = (\mathbf{f}, \varphi) \quad \forall \varphi \in H_0^1(\Omega) \quad \text{f.f.a. } t \in [0, T]$$

und  $\mathbf{u}(0) = g$  gilt.

Wir können zeigen, dass diese Voraussetzungen an  $\mathbf{u}$  ausreichen, so dass unsere schwache Lösung  $\mathbf{u}$  sogar aus  $C^0([0, T]; L^2(\Omega))$  ist.

Nachdem wir eine Definition einer schwachen Lösung hergeleitet haben, werden wir nun untersuchen, ob eine schwache Lösung für unser Problem existiert.

Dazu verfahren wir nach der *Galerkin-Methode* und betrachten zuerst glatte Funktionen  $w_k = w_k(x)$ ,  $k = 1, \dots$ , für die gilt:

1.  $\{w_k\}_{k=1}^\infty$  bilden eine orthogonal Basis von  $H_0^1(\Omega)$
2.  $\{w_k\}_{k=1}^\infty$  bilden eine orthonormal Basis von  $L^2(\Omega)$

Nun wählen wir ein  $m \in \mathbb{N}$  fest und untersuchen  $\mathbf{u}_m: [0, T] \rightarrow H_0^1(\Omega)$  als Approximation unserer eigentlichen Funktion  $\mathbf{u}$  mit der Darstellung

$$\mathbf{u}_m := \sum_{k=1}^m d_m^k(t) w_k \quad (4.11)$$

mit Koeffizienten  $d_m^k$ , die wir hoffentlich so wählen können, dass

$$(\mathbf{u}'_m, w_k) + B[\mathbf{u}_m, w_k; t] = (\mathbf{f}, w_k) \quad (4.12)$$

$$d_m^k(0) = (g, w_k) \quad k = 1, \dots, m \quad (4.13)$$

gilt.

Also ist unser nächstes Ziel eine approximierte Lösung für unser endlich dimensionales Problem in Gleichung (4.12) zu konstruieren. Dies halten wir im folgenden Satz fest.

**Satz 4.1.4. (Konstruktion einer approximierten Lösung)**

Für alle  $m \in \mathbb{N}$  existiert eine eindeutige Funktion  $\mathbf{u}_m$  mit der Darstellung aus Gleichung (4.11), welche (4.12) erfüllt.

**Beweis:** Aus den Annahmen, dass  $\mathbf{u}_m$  die Darstellung aus Gleichung (4.11) besitzt und die Funktionen  $\{w_k\}_{k=1}^\infty$  eine orthonormal Basis von  $L^2(\Omega)$  bilden, lässt sich schnell herleiten, dass

$$(\mathbf{u}'(t), w_k) = \int_{\Omega} \sum_{l=1}^m (d_m^l)'(t) w_l w_k dx = \sum_{l=1}^m (d_m^l)'(t) \underbrace{\int_{\Omega} w_l w_k dx}_{=\delta_{lk}} = (d_m^k)'(t)$$

gilt. Setzen wir einerseits  $\mathbf{u}_m$  in  $B[\mathbf{u}_m, w_k; t]$  ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} B[\mathbf{u}_m, w_k; t] &= \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} \sum_{l=1}^m d_m^l w_l' w_k' + \sum_{i=1}^n b^i \sum_{l=1}^m d_m^l w_l' w_k + c \sum_{l=1}^m d_m^l w_l w_k dx \\ &= \sum_{l=1}^m \left[ \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} w_l' w_l' + \sum_{i=1}^n b^i w_l' w_k + c w_l w_k dx \right] d_m^l \\ &= \sum_{l=1}^m B[w_l, w_k; t] d_m^l. \end{aligned}$$

Setzen wir nun andererseits diese Resultate in (4.12) ein, so wird aus einer partiellen Differentialgleichung ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen unter der Anfangsbedingung (4.13) der folgenden Gestalt

$$\left(d_m^k\right)'(t) = -\sum_{l=1}^m B[w_l, w_k; t] d_m^l + (\mathbf{f}, w_k) \quad k = 1, \dots, m$$

mit den unbekanntenen Funktionen  $(d_m^1(t), \dots, d_m^m(t))$ . Wir können mittels Standard ODE-Theorie zeigen, dass dieses System eine eindeutige Lösung hat, betrachte dafür Kapitel 4.2.

Somit haben wir mittels der  $d_m^k$  für  $k = 1, \dots, m$  eine eindeutige Darstellung für  $\mathbf{u}_m$  gefunden, welche (4.13) und (4.12) erfüllt.

□

Um die Existenz einer schwachen Lösung zu beweisen, reicht es also aus, zu zeigen, dass  $\mathbf{u}_m$  gegen eine schwache Lösung von (4.1) bis (4.3) für  $m \rightarrow \infty$  konvergiert. Hierfür benötigen wir aber zuvor noch eine wichtige Energie Abschätzung, die wir in Satz 4.1.5 festhalten.

**Satz 4.1.5. (Energie Abschätzung)**

Es existiert ein  $C \in \mathbb{R}$  abhängig nur von  $\Omega, T$  und den Koeffizienten von  $L$ , so dass

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}_m(t)\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))} + \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega))} \quad (4.14)$$

$$\leq C (\|\mathbf{f}\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} + \|g\|_{L^2(\Omega)}) \quad (4.15)$$

mit  $m = 1, 2, \dots$

**Beweis:** Als Erstes betrachten wir unser endlichdimensionales Problem aus Gleichung (4.12)

$$(\mathbf{u}'_m, w_k) + B[\mathbf{u}_m, w_k; t] = (\mathbf{f}, w_k)$$

und multiplizieren die Gleichung mit  $d_m^k(t)$ , summieren anschließend über  $k = 1, \dots, m$  und erhalten so

$$\sum_{k=1}^m (\mathbf{u}'_m, w_k) d_m^k(t) + \sum_{k=1}^m B[\mathbf{u}_m, w_k; t] d_m^k(t) = \sum_{k=1}^m (\mathbf{f}, w_k) d_m^k(t). \quad (4.16)$$

Wenden wir jetzt unsere Definition für  $\mathbf{u}_m := \sum_{k=1}^m d_m^k(t) w_k$  aus (4.11) an, so können wir (4.16) zusammenfassen zu

$$(\mathbf{u}'_m, \mathbf{u}_m) + B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m; t] = (\mathbf{f}, \mathbf{u}_m) \quad (4.17)$$

für fast alle  $t \in [0, T]$ . Weiter können wir zeigen, dass es Konstanten  $\beta > 0$  und  $\gamma \geq 0$  gibt, sodass

$$\begin{aligned} \beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 &\leq B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m; t] + \gamma \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \Leftrightarrow B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m; t] &\geq \beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 - \gamma \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned} \quad (4.18)$$

für fast alle  $t \in [0, T]$  und  $m = 1, 2, \dots$  gilt. Auf einen Beweis verzichten wir hier.

Mithilfe der Hölder- und Cauchy-Ungleichung für  $a, b \in \mathbb{R}$

$$0 \leq (a - b)^2 = a^2 - 2ab + b^2 \Leftrightarrow 2ab \leq a^2 + b^2 \Leftrightarrow ab \leq \frac{1}{2}a^2 + \frac{1}{2}b^2$$

können wir zeigen, dass

$$|(\mathbf{u}_m, \mathbf{f})| = \left| \int_{\Omega} \mathbf{u}_m \mathbf{f} dx \right| \leq \int_{\Omega} |\mathbf{u}_m \mathbf{f}| dx \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad (4.19)$$

gilt. Außerdem können wir bei  $(\mathbf{u}'_m, \mathbf{u}_m)$  Integration und Differenzieren vertauschen und erhalten

$$(\mathbf{u}'_m, \mathbf{u}_m) = \int_{\Omega} \frac{d}{dt} \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m dx = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \mathbf{u}_m^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \mathbf{u}_m^2 dx = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right). \quad (4.20)$$

Setzen wir zuerst Gleichung (4.20) in Gleichung (4.17) ein

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m; t] = (\mathbf{f}, \mathbf{u}_m).$$

und nutzen Ungleichung (4.18) aus, so ergibt sich

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + \beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 - \gamma \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq (\mathbf{f}, \mathbf{u}_m) \leq |(\mathbf{f}, \mathbf{u}_m)|. \quad (4.21)$$

Wenn wir jetzt Ungleichung (4.19) für die rechte Seite verwenden, alles mit 2 multiplizieren und entsprechende Terme zusammenfassen, so erhalten wir abschließend

$$\frac{d}{dt} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + 2\beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq C_1 \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + C_2 \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad (4.22)$$

f.f.a.  $t \in [0, T]$  und mit passenden Konstanten  $C_1$  und  $C_2$ .

Wenn wir abkürzend  $\eta(t) := \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2$  und  $\zeta(t) := \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2$  schreiben und ausnutzen, dass  $2\beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \geq 0$  ist, können wir (4.22) umschreiben zu

$$\frac{d}{dt} (\eta(t)) \leq C_1 \eta(t) + C_2 \zeta(t).$$

Nun sind alle Voraussetzungen für die Gronwall-Ungleichung erfüllt und es gilt die Abschätzung

$$\eta(t) \leq e^{C_1 t} \left( \eta(0) + C_2 \int_0^t \zeta(s) ds \right) \quad (4.23)$$

für  $t \in [0, T]$ .

Da weiter

$$\eta(0) = \|\mathbf{u}_m(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 = \left\| \sum_{k=1}^m d_m^k(0) w_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 = \left\| \sum_{k=1}^m (g, w_k) w_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|g\|_{L^2(\Omega)}^2$$

nach (4.13) gilt, können wir, wenn wir die Definitionen für  $\eta$  und  $\zeta$  in (4.23) einsetzen, folgende Abschätzung festhalten:

$$\max_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}_m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C \left( \|g\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right) \quad (4.24)$$

Somit haben wir den ersten Summanden aus (4.14) erfolgreich abgeschätzt.

Die Abschätzung für den zweiten Summanden erhalten wir, wenn wir Gleichung (4.22) über  $[0, T]$  integrieren

$$\int_0^T \frac{d}{dt} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) dt + \int_0^T 2\beta \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 dt \leq C_1 \int_0^T \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 dt + C_2 \int_0^T \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 dt$$

dies nun umschreiben

$$\|\mathbf{u}_m(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|\mathbf{u}_m(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\beta \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}^2 \leq C \max_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}_m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2$$

und (4.24) darauf anwenden

$$\|\mathbf{u}_m\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}^2 \leq C \left( \|\mathbf{g}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right). \quad (4.25)$$

Damit sind wir mit den ersten beiden Summanden fertig und wir müssen nur noch  $\|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(0,T;H_0^{-1}(\Omega))}$  behandeln.

Dazu wählen wir ein festes  $v \in H_0^1(\Omega)$  mit  $\|v\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 1$  und nehmen an, dass sich  $v$  schreiben lässt als  $v = v_1 + v_2$ , wobei  $v_1 \in \text{span}\{w_k\}_{k=1}^m$  und  $(v_2, w_k) = 0$  für alle  $k = 1, \dots, m$  gelten soll. Mithilfe von Gleichung (4.12), welche für alle  $w_k$  gilt und somit insbesondere für  $v_1$ , erhalten wir so

$$(\mathbf{u}'_m, v_1) + B[\mathbf{u}_m, v_1; t] = (\mathbf{f}, v_1).$$

Nutzen wir nun weiter aus, dass  $(v_2, w_k) = 0$  für alle  $k = 1, \dots, m$  gilt, in Verbindung mit der Definition von  $\mathbf{u}_m$  aus (4.11), so bekommen wir

$$(\mathbf{u}'_m, v) = (\mathbf{u}'_m, v_1 + v_2) = (\mathbf{u}'_m, v_1) = (\mathbf{f}, v_1) - B[\mathbf{u}_m, v_1; t].$$

Schließlich erhalten wir mit  $\|v_1\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \|v\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 1$  zunächst

$$|(\mathbf{u}'_m, v)| = |(\mathbf{f}, v_1) - B[\mathbf{u}_m, v_1; t]| \leq |(\mathbf{f}, v_1)| + |B[\mathbf{u}_m, v_1; t]| \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)} \right)$$

und weiter

$$\|\mathbf{u}'_m\|_{H_0^{-1}(\Omega)} \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)} \right).$$

Quadrieren wir nun beide Seiten

$$\|\mathbf{u}'_m\|_{H_0^{-1}(\Omega)}^2 dt \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)} \right)^2 \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \right),$$

integrieren anschließend über  $[0, T]$  und wenden Ungleichung (4.25) an

$$\int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{H_0^{-1}(\Omega)}^2 dt \leq C \int_0^T \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \right) dt \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \|\mathbf{g}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right),$$

folgt die gewünschte Abschätzung für den dritten und letzten Summanden

$$\|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(0,T;H_0^{-1}(\Omega))}^2 \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \|\mathbf{g}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right).$$

□

Nun haben wir alles beisammen, um die Existenz einer schwachen Lösung zu zeigen. Dazu betrachten wir nachfolgenden Satz.

**Satz 4.1.6. (Existenz einer schwachen Lösung)**

Es existiert eine schwache Lösung von unserem Problem (4.1) bis (4.3).

**Beweis:** Nach Satz 4.1.5 wissen wir, dass  $\{\mathbf{u}_m\}_{m=1}^\infty$  beschränkt ist in  $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ ,  $\{\mathbf{u}'_m\}_{m=1}^\infty$  in  $L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega))$  und somit existiert eine Teilfolge  $\{\mathbf{u}_{m_l}\}_{l=1}^\infty \subset \{\mathbf{u}_m\}_{m=1}^\infty$  und ein  $\mathbf{u} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$  mit  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega))$ , sodass

$$\mathbf{u}_{m_l} \rightharpoonup \mathbf{u} \text{ in } L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \quad (4.26)$$

$$\mathbf{u}'_{m_l} \rightharpoonup \mathbf{u}' \text{ in } L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega)) \quad (4.27)$$

gilt.

Für den nächsten Schritt wählen wir ein  $\mathbf{v} \in C([0, T]; H_0^1(\Omega))$  mit der Darstellung

$$\mathbf{v}(t) = \sum_{k=1}^N d^k(t) w_k$$

wobei  $N \in \mathbb{N}$  fest gewählt wurde und  $\{d^k\}_{k=1}^N$  gegebene glatte Funktionen sind. Nun multiplizieren wir wieder Gleichung (4.12) mit  $d^k(t)$ , summieren über  $k = 1, \dots, N$  und integrieren nach  $t$  und erhalten so für ein  $m \geq N$

$$\int_0^T (\mathbf{u}'_m, \mathbf{v}) + B[\mathbf{u}_m, \mathbf{v}; t] dt = \int_0^T (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dt. \quad (4.28)$$

Nach Übergang von  $m$  zu  $m_l$  und Anwenden von (4.26) bzw. (4.27) ergibt sich

$$\int_0^T (\mathbf{u}', \mathbf{v}) + B[\mathbf{u}, \mathbf{v}; t] dt = \int_0^T (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dt \quad \forall \mathbf{v} \in C(0, T; H_0^1(\Omega)). \quad (4.29)$$

Diese Gleichung gilt nicht nur für alle Funktionen  $\mathbf{v} \in C(0, T; H_0^1(\Omega))$ , sondern auch für alle  $\mathbf{v} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ , da  $C(0, T; H_0^1(\Omega))$  dicht in  $L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$  liegt. Somit kommen wir folglich auf diese Gleichung

$$(\mathbf{u}', v) + B[\mathbf{u}, v; t] = (\mathbf{f}, v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega), f.f.a. t \in [0, T]. \quad (4.30)$$

Da  $\mathbf{u} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$  und  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; H_0^{-1}(\Omega))$  können wir zeigen, dass dann auch gilt  $\mathbf{u} \in C(0, T; L^2(\Omega))$ .

Somit haben wir (4.1) gezeigt und es bleibt noch nachzuvollziehen, ob  $\mathbf{u}(0) = g$  gilt.

Dazu betrachten wir erneut Gleichung (4.29) und halten nach einmaliger partieller Integration im ersten Integral fest, dass

$$\int_0^T -(\mathbf{u}, \mathbf{v}') + B[\mathbf{u}, \mathbf{v}; t] dt = \int_0^T (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dt + (\mathbf{u}(0), \mathbf{v}(0)) \quad \forall \mathbf{v} \in C(0, T; H_0^1(\Omega)) \quad (4.31)$$

gilt, falls wir zusätzlich  $\mathbf{v}(T) = 0$  annehmen. Analog erhalten wir aus Gleichung (4.28)

$$\int_0^T -(\mathbf{u}_m, \mathbf{v}') + B[\mathbf{u}_m, \mathbf{v}; t] dt = \int_0^T (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dt + (\mathbf{u}_m(0), \mathbf{v}(0)).$$

Gehen wir nun, wie schon oben, zu  $m_l$  über, nutzen aus, dass  $u_{m_l}(0) \rightarrow g$  in  $L^2(\Omega)$  und wenden (4.26) und (4.27) an, ergibt sich

$$\int_0^T -(\mathbf{v}', \mathbf{u}) + B[\mathbf{u}, \mathbf{v}; t] dt = \int_0^T (\mathbf{f}, \mathbf{v}) dt + (g, \mathbf{v}(0)). \quad (4.32)$$

Vergleichen wir jetzt (4.31) mit (4.32), so folgt schließlich  $\mathbf{u}(0) = g$ .

□

Nachdem wir die Existenz einer schwachen Lösung gezeigt haben, müssen wir noch die Eindeutigkeit dieser Lösung zeigen.

**Satz 4.1.7. (Eindeutigkeit der schwachen Lösung)**

*Es existiert genau eine schwache Lösung von unserem Problem (4.1) bis (4.3).*

**Beweis:** Wir nehmen an, dass es zwei Lösungen  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{v}$  gibt und betrachten die Differenz  $\mathbf{d} = \mathbf{u} - \mathbf{v}$ .

Es gilt also

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + L\mathbf{u} &= \mathbf{f}, \mathbf{v}_t + L\mathbf{v} = \mathbf{f} \text{ in } \Omega_T \Rightarrow \mathbf{d}_t + L\mathbf{d} = 0 \text{ in } \Omega_T \\ \mathbf{u} &= 0, \mathbf{v} = 0 \text{ auf } \partial\Omega \times [0, T] \quad \Rightarrow \mathbf{d} = 0 \text{ auf } \partial\Omega \times [0, T] \\ \mathbf{u} &= g, \mathbf{v} = g \text{ auf } \Omega \times \{t = 0\} \quad \Rightarrow \mathbf{d} = 0 \text{ auf } \Omega \times \{t = 0\}. \end{aligned}$$

Es bleibt somit zu zeigen, dass  $\mathbf{d} = 0$  die einzige Lösung von dem neuen Problem mit  $\mathbf{f} = 0$  und  $g = 0$  ist.

Dazu testen wir Gleichung (4.30) mit der Lösung selbst und erhalten so mit  $\mathbf{f} = 0$  und dem Wissen, dass  $\mathbf{d}$  wie schon oft benutzt eine Funktion aus  $C(0, T; L^2(\Omega))$  ist

$$0 = (\mathbf{d}', \mathbf{d}) + B[\mathbf{d}, \mathbf{d}; t] = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \|\mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + B[\mathbf{d}, \mathbf{d}; t]. \quad (4.33)$$

Weiter wissen wir, dass, wie schon in Gleichung (4.18), Konstanten  $\beta > 0$  und  $\gamma \geq 0$  existieren, sodass

$$B[\mathbf{d}, \mathbf{d}; t] \geq \beta \|\mathbf{d}\|_{H_0^1}^2 - \gamma \|\mathbf{d}\|_{L^2}^2 \geq -\gamma \|\mathbf{d}\|_{L^2}^2$$

gilt. Somit erfüllen wir mit  $\mathbf{d}(0) = 0$  und

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \|\mathbf{d}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = -B[\mathbf{d}, \mathbf{d}; t] \leq \gamma \|\mathbf{d}\|_{L^2}^2$$

die Voraussetzungen der Gronwall-Ungleichung und erhalten direkt  $\|\mathbf{d}\| = 0$ , was unsere Behauptung beweist.

□

Damit haben wir nicht nur die Existenz einer schwachen Lösung gezeigt, sondern auch ihre Eindeutigkeit.

### 4.1.2 Regularität

In diesem Kapitel wollen wir uns mit der Frage beschäftigen, welche Voraussetzungen wir für unser Problem ändern müssen, um eine höhere Regularität bei unserer Lösung  $\mathbf{u}$  zu erhalten. Wir führen den Beweis wieder mit der Galerikin-Approximation durch und nehmen dazu im Folgenden an, dass  $\{w_k\}_{k=1}^{\infty}$  alle Eigenfunktionen von  $-\Delta$  auf  $H_0^1(\Omega)$  beschreibt, und dass  $\Omega$  beschränkt, offen mit glatten Rand  $\partial\Omega$  ist. Weiter seien die Koeffizienten  $a^{ij}, b^i, c$  für  $i, j = 1, \dots, n$  glatt in  $\bar{\Omega}$  und unabhängig von  $t$ .

Bisher hatten wir stets angenommen, dass  $g \in L^2(\Omega)$  und  $\mathbf{f} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ . Dies wollen wir jetzt ändern und nehmen an, dass  $g \in H_0^1(\Omega)$  ist. Wir zeigen nun im ersten Teil von Satz 4.1.8, dass dies ausreicht, um eine höhere Regularität zu erzeugen und gehen im zweiten Teil noch einen Schritt weiter, in dem wir  $g \in H^2(\Omega)$  und  $\mathbf{f}' \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$  annehmen, was wiederum eine Verbesserung der Regularität unserer Lösung  $\mathbf{u}$  zur Folge hat.

#### Satz 4.1.8. (Erweiterte Regularität)

- (i) Sei  $g \in H_0^1(\Omega)$ ,  $\mathbf{f} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$  und  $\mathbf{u} \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$  mit  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$  die schwache Lösung von Problem (4.1) bis (4.3).

Dann ist

$$\mathbf{u} \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^\infty(0, T; H_0^1(\Omega)) \text{ und } \mathbf{u}' \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$$

und es gilt die Abschätzung mit einer Konstanten  $C$  abhängig nur von  $\Omega, T$  und den Koeffizienten von  $L$

$$\begin{aligned} \operatorname{ess\,sup}_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}(t)\|_{H_0^1(\Omega)} + \|\mathbf{u}\|_{L^2(0, T; H^2(\Omega))} + \|\mathbf{u}'\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} \\ \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))} + \|g\|_{H_0^1(\Omega)} \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

- (ii) Gilt zusätzlich, dass  $g \in H^2(\Omega)$  und  $\mathbf{f}' \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ , dann gilt für unsere schwache Lösung sogar

$$\mathbf{u} \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega)), \mathbf{u}' \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H_0^1(\Omega)) \text{ und } \mathbf{u}'' \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$$

mit der Abschätzung

$$\begin{aligned} \operatorname{ess\,sup}_{0 \leq t \leq T} \left( \|\mathbf{u}(t)\|_{H^2(\Omega)} + \|\mathbf{u}'(t)\|_{L^2(\Omega)} \right) + \|\mathbf{u}'\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))} + \|\mathbf{u}''\|_{L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))} \\ \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{H^1(0, T; L^2(\Omega))} + \|g\|_{H_0^2(\Omega)} \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

**Beweis:** Da der Beweis sehr lang ist, wollen wir ihn in mehrere Abschnitte aufteilen, um Übersichtlichkeit zu gewährleisten.

1. Wähle  $m \geq 1$  fest. Wir erinnern an unser endlichdimensionales Problem in Gleichung (4.12)

$$(\mathbf{u}'_m, w_k) + B[\mathbf{u}_m, w_k; t] = (\mathbf{f}, w_k).$$

Multiplizieren wir diese Gleichung mit  $(d_m^k)'(t)$  und summieren über  $k = 1, \dots, m$  so erhalten wir

$$(\mathbf{u}'_m, \mathbf{u}'_m) + B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}'_m; t] = (\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m) \quad \text{mit } \mathbf{u}'_m = \sum_{k=1}^m w_k \left( d_m^k \right)'(t) \quad (4.36)$$

f.f.a.  $0 \leq t \leq T$ .

Betrachten wir erneut die Definition von  $B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}'_m; t]$ :

$$\begin{aligned} B[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}'_m; t] &= \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} \mathbf{u}_{m,x_i} \mathbf{u}'_{m,x_j} dx + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n b^i \mathbf{u}_{m,x_i} \mathbf{u}'_m + c \mathbf{u}_m \mathbf{u}'_m dx \\ &:= A + B. \end{aligned}$$

Da  $a^{ij}$  symmetrisch und die Koeffizienten  $a^{ij}, b^i, c$  unabhängig von  $t$  sind, können wir alternativ  $A = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} A[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m] \right)$  mit

$$A[u, v] := \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^n a^{ij} u_{x_i} v_{x_j} dx$$

als symmetrische Bilinearform für  $u, v \in H_0^1(\Omega)$  auffassen. Weiter gilt

$$\begin{aligned} |B| &= \left| \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n b^i \mathbf{u}_{m,x_i} \mathbf{u}'_m + c \mathbf{u}_m \mathbf{u}'_m dx \right| \leq C \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} |\mathbf{u}'_m| (\mathbf{u}_{m,x_i} + \mathbf{u}_m) dx \\ &\leq C \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} |\mathbf{u}'_m| |\mathbf{u}_{m,x_i} + \mathbf{u}_m| dx \\ &\leq C \sum_{i=1}^n \left( \int_{\Omega} |\mathbf{u}'_m|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} |\mathbf{u}_{m,x_i} + \mathbf{u}_m|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq C \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \varepsilon \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad \forall \varepsilon > 0. \end{aligned}$$

Also erhalten wir für  $|B|$  und mit analogem Vorgehen für  $|(\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m)|$  folgende Abschätzungen

$$|B| \leq \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \varepsilon \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad |(\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m)| \leq \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \varepsilon \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \quad \forall \varepsilon > 0.$$

2. Setzen wir diese Ungleichungen beziehungsweise Definitionen in (4.36) ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}'_m, \mathbf{u}'_m) + A + B &= (\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m) \\ \Leftrightarrow \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + A &= -B + (\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m) \\ \Rightarrow \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + A &\leq |B| + |(\mathbf{f}, \mathbf{u}'_m)| \\ \Rightarrow \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + A &\leq \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + 2\varepsilon \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \Rightarrow \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} A[\mathbf{u}_m, \mathbf{u}_m] \right) &\leq \frac{C}{\varepsilon} \left( \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) + 2\varepsilon \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

Da die Abschätzungen für alle  $\varepsilon > 0$  gelten, können wir  $\varepsilon = \frac{1}{4}$  wählen und bekommen nach dem Integrieren über unser Zeitintervall

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \frac{1}{2} \sup_{0 \leq t \leq T} A[\mathbf{u}_m(t), \mathbf{u}_m(t)] - \frac{1}{2} A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] \\
 & \leq C \int_0^T \left( \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) dt + \int_0^T \frac{1}{2} \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \\
 \Leftrightarrow & \frac{1}{2} \int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \sup_{0 \leq t \leq T} \frac{1}{2} A[\mathbf{u}_m(t), \mathbf{u}_m(t)] \\
 & \leq C \left( A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] + \int_0^T \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right) \\
 \Leftrightarrow & \int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \sup_{0 \leq t \leq T} A[\mathbf{u}_m(t), \mathbf{u}_m(t)] \\
 & \leq C \left( A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] + \int_0^T \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 dt \right).
 \end{aligned}$$

Wenden wir nun Satz 4.1.5 auf  $\int_0^T \|\mathbf{u}_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 dt = \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2$  an, erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & \int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \sup_{0 \leq t \leq T} A[\mathbf{u}_m(t), \mathbf{u}_m(t)] \\
 & \leq C \left( A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] + \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right). \quad (4.37)
 \end{aligned}$$

Bleibt noch der Term  $A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)]$  auf der rechten Seite, welchen wir möglichst nach  $\|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2$  abschätzen wollen. Dafür erinnern wir uns zuerst, wie genau dieser Ausdruck definiert war:

Mit  $\mathbf{u}_m(0) = \sum_{k=0}^m (g, w_k) w_k$  und  $\nabla \mathbf{u}_m(0) = \sum_{k=0}^m (g, w_k) \nabla w_k$  ergibt sich

$$\begin{aligned}
 A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] &= \int_{\Omega} \sum_{i,j} a^{ij} \mathbf{u}_{m,x_i}(0) \mathbf{u}_{m,x_j}(0) \leq C \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{u}_m(0)|^2 dx \\
 &= C \sum_{k,l=1}^m (g, w_k)(g, w_l) \int_{\Omega} \nabla w_k \nabla w_l dx \\
 &= C \sum_{k=1}^m (g, w_k)^2 \int_{\Omega} |\nabla w_k|^2 dx \\
 &\leq C \sum_{k=1}^{\infty} (g, w_k)^2 \int_{\Omega} |\nabla w_k|^2 dx \\
 &= C \sum_{k,l=0}^{\infty} (g, w_k)(g, w_l) \int_{\Omega} \nabla w_k \nabla w_l dx.
 \end{aligned}$$

Benutzen wir außerdem, dass  $g = \sum_{k=0}^{\infty} (g, w_k) w_k$  und damit  $\nabla g = \sum_{k=0}^{\infty} (g, w_k) \nabla w_k$  gilt, so erhalten wir die gewünschte Abschätzung

$$A[\mathbf{u}_m(0), \mathbf{u}_m(0)] \leq C \int_{\Omega} |\nabla g|^2 dx \leq C \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2.$$

Setzen wir dies nun wiederum in Gleichung (4.37) ein, so bekommen wir

$$\int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \sup_{0 \leq t \leq T} A[\mathbf{u}_m(t), \mathbf{u}_m(t)] \leq C \left( \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right).$$

Da weiter

$$A[u, u] \geq \theta \int_{\Omega} |Du|^2 dx \quad \text{für alle } u \in H_0^1(\Omega)$$

gilt, können wir Folgendes festhalten

$$\int_0^T \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)} dt + \sup_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}_m(t)\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq C \left( \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right). \quad (4.38)$$

Nehmen wir  $m = m_l$  als Teilfolge und betrachten  $l \rightarrow \infty$ , so können wir folgern, dass  $\mathbf{u} \in L^\infty(0, T; H_0^1(\Omega))$  und  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ .

3. Da  $\mathbf{u}$  unsere schwache Lösung ist, gilt weiterhin die Gleichung

$$(\mathbf{u}', v) + B[\mathbf{u}, v] = (\mathbf{f}, v) \quad \text{für alle } v \in H_0^1(\Omega),$$

welche wir folgendermaßen umschreiben wollen:

$$B[\mathbf{u}, v] = (\mathbf{h}, v) \quad \text{für } \mathbf{h} := \mathbf{f} - \mathbf{u}'. \quad (4.39)$$

Da wir in 2. gezeigt haben, dass  $\mathbf{u}' \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$  gilt und wir annehmen, dass  $\mathbf{f} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$  ist, gilt auch  $\mathbf{h} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$  und insbesondere  $\mathbf{h}(t) \in L^2(\Omega)$ . Wir haben somit in Gleichung (4.39) eine elliptische Differentialgleichung (DGL) und wissen nach der Regularitätstheorie für elliptische DGL, dass  $\mathbf{u} \in H^2(\Omega)$  für fast alle  $0 \leq t \leq T$  gilt und folgende Ungleichung erfüllt wird

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}\|_{H^2(\Omega)}^2 &\leq C \left( \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{h}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \\ &\leq C \left( \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'\|_{L^2(\Omega)}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Fassen wir also zusammen, welche Abschätzungen wir gezeigt haben:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}\|_{H^2(\Omega)}^2 &\leq C \left( \|\mathbf{u}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \\ \sup_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}(t)\|_{H_0^1(\Omega)}^2 &\leq C \left( \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right) \\ \|\mathbf{u}'\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} &\leq C \left( \|g\|_{H_0^1(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))}^2 \right) \end{aligned}$$

Integrieren wir die erste Ungleichung über  $[0, T]$  und wenden die beiden unteren Abschätzungen auf die rechte Seite an, erhalten wir schließlich die gewünschte Ungleichung

$$\begin{aligned} \operatorname{ess\,sup}_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}(t)\|_{H_0^1(\Omega)} + \|\mathbf{u}\|_{L^2(0,T;H^2(\Omega))} + \|\mathbf{u}'\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} \\ \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \|g\|_{H_0^1(\Omega)} \right). \end{aligned}$$

Somit haben wir Teil (i) gezeigt.

4. Um noch höhere Regularität zu zeigen, nehmen wir im Folgenden an, dass  $g \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  und  $\mathbf{f} \in H^1(0, T; L^2(\Omega))$  gilt.

Wir wählen wieder als ersten Schritt ein  $m \geq 1$  fest. Als nächstes werden wir Gleichung (4.12)

$$(\mathbf{u}'_m, w_k) + B[\mathbf{u}_m, w_k] = (\mathbf{f}, w_k)$$

nach  $t$  differenzieren und erhalten mit  $\tilde{\mathbf{u}} := \mathbf{u}'$

$$(\tilde{\mathbf{u}}'_m, w_k) + B[\tilde{\mathbf{u}}_m, w_k] = (\mathbf{f}', w_k). \quad (4.41)$$

Wie schon in vorherigen Beweisen multiplizieren wir diese Gleichung mit  $(d_m^k)'(t)$  und summieren wieder über  $k = 1, \dots, m$  und bekommen

$$(\tilde{\mathbf{u}}'_m, \tilde{\mathbf{u}}_m) + B[\tilde{\mathbf{u}}_m, \tilde{\mathbf{u}}_m] = (\mathbf{f}', \tilde{\mathbf{u}}_m).$$

Nutzen wir nun die Gronwall-Ungleichung (analog zum Beweis von Satz 4.1.5, nur eine Ableitungsstufe höher), so können wir festhalten, dass

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 &\leq C \left( \|\mathbf{u}'_m(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}'\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right) \\ &\leq C \left( \|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{H^1(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.42)$$

und weiter, ebenfalls analog zu Beweis 4.1.5 (vgl. Abschätzung (4.25))

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))}^2 &\leq C \left( \|\mathbf{u}'_m(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}'\|_{L^2(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right) \\ &\leq C \left( \|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{H^1(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.43)$$

gilt.

5. Der nächste Schritt ist, den ersten Term in Gleichung (4.42) beziehungsweise (4.43) abzuschätzen. Da die  $\{w_k\}_{k=1}^\infty$  alle Eigenfunktionen von  $-\Delta$  auf  $H_0^1(\Omega)$  beschreiben, gilt insbesondere  $\Delta \mathbf{u}_m = 0$  auf  $\partial\Omega$ . Daher können wir mittels partieller Integration folgern, dass

$$\|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq C \|\Delta \mathbf{u}_m(0)\|_{L^2(\Omega)}^2 = C (\mathbf{u}_m(0), \Delta^2 \mathbf{u}_m(0))$$

mit dem Operator  $\Delta^2 \mathbf{u}_m = \Delta(\Delta \mathbf{u}_m)$  gilt und mit dem Wissen, dass  $\Delta^2 \mathbf{u}_m(0) \in \text{span}\{w_k\}_{k=1}^\infty$ , sowie dass  $(\mathbf{u}_m(0), w_k) = (g, w_k)$  gilt, erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 &\leq C (g, \Delta^2 \mathbf{u}_m(0)) = C (\Delta g, \Delta \mathbf{u}_m(0)) \leq C \|\Delta g\|_{L^2(\Omega)} \|\Delta \mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C \|\Delta g\|_{H^2(\Omega)} \|\Delta \mathbf{u}_m\|_{H^2(\Omega)} \leq \frac{C}{\varepsilon} \|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 + C\varepsilon \|g\|_{H^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

$\forall \varepsilon > 0$ . Wählen wir nun  $\varepsilon > 0$  mit  $\frac{C}{\varepsilon} = \frac{1}{2}$ , ergibt sich

$$\|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq \frac{1}{2} \|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 + C \|g\|_{H^2(\Omega)}^2.$$

Somit liefert diese Ungleichung  $\|\mathbf{u}_m(0)\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq C \|g\|_{H^2(\Omega)}^2$  und wir können Gleichungen (4.42) und (4.43) zusammenfassen und umschreiben zu

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(0, T; H_0^1(\Omega))}^2 \leq C \left( \|g\|_{H^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{f}\|_{H^1(0, T; L^2(\Omega))}^2 \right). \quad (4.44)$$

6. Betrachten wir, wie schon in 3.,

$$B[\mathbf{u}_m, w_k] = (\mathbf{f} - \mathbf{u}'_m, w_k) \quad (k = 1, \dots, m)$$

und multiplizieren diese Gleichung mit  $\lambda_k d_m^k(t)$  mit  $\lambda_k$  als  $k$ -ten Eigenwert von  $-\Delta$  auf  $H_0^1$  und summieren über  $k = 1, \dots, m$ , so erhalten wir

$$B[\mathbf{u}_m, -\Delta \mathbf{u}_m] = (\mathbf{f} - \mathbf{u}'_m, -\Delta \mathbf{u}_m). \quad (4.45)$$

Schreiben wir den ersten Term aus und nutzen erneut, dass  $\Delta \mathbf{u}_m = 0$  auf  $\partial\Omega$ , so fällt auf, dass folgende Identität gilt

$$B[\mathbf{u}_m, -\Delta \mathbf{u}_m] = (L\mathbf{u}_m, -\Delta \mathbf{u}_m).$$

Analog zu dem Beweis von Satz 4.1.5 folgt nun

$$\beta \|u\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq B[u, -\Delta u] + \gamma \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 = (Lu, -\Delta u) + \gamma \|u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

für  $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$  und Konstanten  $\beta > 0, \gamma \geq 0$ . Weiter gilt nach (4.45) (vgl. auch Gleichung (4.40)),

$$\|\mathbf{u}_m\|_{H^2(\Omega)}^2 \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'_m\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}_m\|_{L^2(\Omega)}^2 \right). \quad (4.46)$$

Nun können wir abschließend in diesem Teil des Beweises folgende Abschätzung festhalten

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq t \leq T} \left( \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}_m(t)\|_{H^2(\Omega)}^2 \right) + \|\mathbf{u}'_m(t)\|_{L^2(0,T;H_0^1(\Omega))}^2 \\ \leq C \left( \|\mathbf{f}\|_{H^1(0,T;L^2(\Omega))}^2 + \|g\|_{H^2(\Omega)}^2 \right) \end{aligned}$$

Diese Abschätzung ergibt sich, wenn wir Gleichungen (4.46) und (4.44) kombinieren. Betrachten wir nun  $m = m_l \rightarrow \infty$ , so erhalten wir dieselbe Abschätzung für unser  $\mathbf{u}$ .

7. Im letzten Schritt unseres Beweises müssen wir noch zeigen, dass  $\mathbf{u}'' \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ . Dazu gehen wir ähnlich zu dem Beweis von Satz 4.1.5 vor. Wir wählen ein  $v \in H_0^1(\Omega)$  mit  $\|v\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 1$  und schreiben  $v = v^1 + v^2$ . Hier gilt wieder, dass  $v^1 \in \text{span}\{w_k\}_{k=1}^m$  und  $(v^2, w_k) = 0$  für  $k = 1, \dots, m$  erfüllt sein soll. Dann gilt für fast alle Zeiten  $0 \leq t \leq T$ :

$$(\mathbf{u}''_m, v) = (\mathbf{u}''_m, v^1) = (\mathbf{f}', v^1) - B[\mathbf{u}'_m, v^1].$$

Bei dem hinteren "=" haben wir (5.1) ausgenutzt. Da  $\|v\|_{H_0^1(\Omega)} \leq 1$  gilt, erhalten wir somit

$$|(\mathbf{u}''_m, v)| \leq C \left( \|\mathbf{f}'\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \right).$$

Demnach gilt also

$$\|\mathbf{u}''_m\|_{H^{-1}(\Omega)} \leq C \left( \|\mathbf{f}'\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mathbf{u}'_m\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \right)$$

und somit auch  $\mathbf{u}_m \in L^2(0, T; H^{-1}(\Omega))$ . Betrachten wir wieder  $m = m_l \rightarrow \infty$ , so erhalten wir die gewünschte Abschätzung und wir haben damit alle Behauptungen des Satzes gezeigt.

□

Im nächsten Satz 4.1.9 gehen wir noch einen Schritt weiter und formulieren Satz 4.1.8 ganz allgemein, um noch weitere Regularitätsaussagen treffen zu können.

**Satz 4.1.9. (Höhere Regularität)**

Seien folgende Voraussetzungen erfüllt

$$g \in H^{2m+1}(\Omega), \frac{d^k \mathbf{f}}{dt^k} \in L^2(0, T; H^{2m-2k}(\Omega))$$

für  $k = 0, \dots, m$ .

Weiter gelte die Kompatibilitätsbedingung der Ordnung  $m$ :

$$g_0 := g \in H_0^1(\Omega), g_1 := f(0) - Lg_0 \in H_0^1(\Omega), \dots, g_m := \frac{d^{m-1} \mathbf{f}}{dt^{m-1}}(0) - Lg_{m-1} \in H_0^1(\Omega).$$

Dann gilt

$$\frac{d^k \mathbf{u}}{dt^k} \in L^2(0, T; H^{2m+2-2k}(\Omega)) \quad (k = 0, \dots, m+1)$$

und die Abschätzung

$$\sum_{k=0}^{m+1} \left\| \frac{d^k \mathbf{u}}{dt^k} \right\|_{L^2(0, T; H^{2m+2-2k}(\Omega))} \leq C \left( \sum_{k=0}^m \left\| \frac{d^k \mathbf{f}}{dt^k} \right\|_{L^2(0, T; H^{2m-2k}(\Omega))} + \|g\|_{H^{2m+1}(\Omega)} \right)$$

mit einer Konstanten  $C$  abhängig nur von  $m, \Omega, T$  und den Koeffizienten von  $L$ .

**Beweis:** Dieser Satz lässt sich über Induktion nach  $m$  beweisen. Der Induktionsanfang ergibt sich aus Satz 4.1.8 und der Schritt  $m \rightarrow m+1$  ähnelt sehr dem Beweis des zweiten Teils von Satz 4.1.8. Wir verzichten auf eine genaue Ausführung, da hierbei kein neuer Erkenntnisgewinn entsteht.

□

Kommen wir nun zu der entscheidenden Aussage in diesem Kapitel, dass wir bei glatter rechten Seite  $f$  und glatten Anfangswerten  $g$  auch eine glatte Lösung  $u$  erhalten. Dieses Resultat werden wir in Satz 4.1.10 festhalten.

**Satz 4.1.10. (Beliebige Differenzierbarkeit)**

Sei

$$g \in C^\infty(\bar{\Omega}), f \in C^\infty(\bar{\Omega}_T)$$

und es gelte die Kompatibilitätsbedingung der Ordnung  $m$  aus Satz 4.1.9 für  $m = 0, 1, 2, \dots$

Dann hat das Anfangs-Randwertproblem eine eindeutige Lösung  $u$  und es gilt

$$u \in C^\infty(\bar{\Omega}_T)$$

**Beweis:** Nach Satz 4.1.9 gilt diese Behauptung für  $g \in H^{2m+1}(\Omega)$ ,  $\frac{d^k f}{dt^k} \in L^2(0, T; H^{2m-2k}(\Omega))$  mit  $k = 0, \dots, m$ . Wenden wir nun diesen Satz sukzessive für  $m = 0, 1, \dots$  an, so erhalten wir schlussendlich die gewünschte Behauptung. □

Nun haben wir alles zusammen, um die Resultate aus diesem Kapitel auf unsere Diffusionsgleichung aus Kapitel 3.2 anzuwenden. Dort hatten wir folgende Gleichung hergeleitet:

$$\partial_t \tilde{S} - \Delta \tilde{S} = \tilde{f}$$

mit der rechten Seite

$$\tilde{f}_{x_0, y_0, R, \theta}(\mathbf{x}, t) = e^{at} \int_0^{2\pi} \eta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi.$$

Im Folgenden werden wir zur Vereinfachung  $S = \tilde{S}$  und  $f = \tilde{f}$  schreiben.

Um Satz 4.1.10 anwenden zu können, müssen wir also zeigen, dass  $g \in C^\infty(\bar{\Omega})$  und  $f \in C^\infty(\bar{\Omega}_T)$  gilt. Da wir die Anfangsbedingung  $g$  beliebig wählen können und wir in den meisten Fällen hier die konstante Nullfunktion vorschreiben, können wir  $g \in C^\infty(\bar{\Omega})$  als gegeben ansehen. Auch in den späteren Testkonfigurationen werden wir immer darauf achten, dass wir diese Bedingung erfüllen. Bleibt zu zeigen, dass  $f \in C^\infty(\bar{\Omega}_T)$  ist.

Trivial zu zeigen ist, dass  $f$  unendlich oft in der Zeit differenzierbar ist, da wir voraussetzen, dass die Zellparameter  $x_0, y_0, R, \theta$  konstant und gegeben sind (vgl. Kapitel 3.4). Nicht großartig schwieriger ist es bei der Differenzierbarkeit im Ort. Vernachlässigen wir dafür den Termin  $e^{at}$ , da er hierfür keine Rolle spielt. Nach Abschnitt 3.2 handelt es sich bei  $\eta_\varepsilon$  um eine glatte Approximation einer Dirac-Distribution. Das heißt im Besonderen, dass der Termin  $\eta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi))$  glatt ist, da  $\psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)$  ebenfalls  $C^\infty$  ist. Weiter ist  $|\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)|$  unabhängig von unserem  $\mathbf{x}$  und auch  $C^\infty$ , vergleiche hierzu die Ausführungen aus Abschnitt 3.1. Somit greift der Satz über parameterabhängige Integrale und wir können schreiben

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} f_{x_0, y_0, R, \theta}(\mathbf{x}) &= \nabla_{\mathbf{x}} \int_0^{2\pi} \eta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} \nabla_{\mathbf{x}} (\eta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi))) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi. \end{aligned}$$

Dies können wir für beliebig höhere Ableitungen wiederholen und erhalten so durch  $\eta_\varepsilon \in C^\infty(\Omega)$  auch  $f \in C^\infty(\Omega)$  und damit  $f \in C^\infty(\bar{\Omega})$ .

Somit haben wir die Voraussetzungen aus 4.1.10 gezeigt und können im Folgenden davon ausgehen, dass unsere Diffusionsgleichung eine eindeutige Lösung  $u \in C^\infty(\bar{\Omega}_T)$  besitzt.

Kommen wir nun in Kapitel 4.2 zu der Lösbarkeit unseres ODE-Systems.

## 4.2 Lösungstheorie von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen

In diesem Abschnitt werden wir uns mit der Lösbarkeit von Systemen von gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODEs) beschäftigen. Weiter werden wir untersuchen unter welchen Voraussetzungen unsere Lösung eindeutig ist. Dazu werden wir zuerst eine Definition eines solchen Systemes angeben. Wir haben uns hier an [Amann] orientiert.

### Definition 4.2.1. (System von gewöhnlichen Differentialgleichungen)

Bei einem System von gewöhnlichen Differentialgleichungen handelt es sich um ein Gleichungssystem der Art

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

Hierbei sind  $f_1, \dots, f_n$  gegebene Funktionen mit  $f_i : D \subset \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$  stetig und  $y_1, \dots, y_n$  die gesuchten Funktionen für  $t \in [0, T]$ . Alternativ können wir das System auch in Vektorschreibweise aufschreiben und erhalten so

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}). \quad (4.47)$$

Dabei werden mit fetten Buchstaben  $n$ -dimensionale Spaltenvektoren mit entsprechenden Einträgen dargestellt.

Als nächstes werden wir eine Definition eines Anfangswertproblems und ein äquivalentes Problem angeben.

### Definition 4.2.2. (Anfangswertproblem)

Bei einem Anfangswertproblem wird zusätzlich zu dem Gleichungssystem  $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y})$  noch ein Punkt  $(t_0, \mathbf{g})$  gefordert, durch den die Lösung gehen soll. Es soll also gelten, dass folgenden Gleichung erfüllt ist

$$\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{g}. \quad (4.48)$$

Nun sind wir in der Lage unser ODE-System umzuformulieren. Ist  $\mathbf{f}$  stetig,  $\mathbf{y}$  differentierbar und  $\mathbf{y}$  erfüllt die Anfangsbedingung in Gleichung (4.48), so können wir unsere Differentialsystem in (4.47) auf beiden Seiten über  $[t_0, t]$  integrieren und erhalten so ein zu (4.47) äquivalentes System von Integralgleichungen der Gestalt

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \mathbf{y}'(s) ds &= \int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds. \\ \Leftrightarrow \mathbf{y}(t) - \mathbf{y}(t_0) &= \int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds \quad \text{mit } \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{g} \text{ ergibt sich} \\ \Leftrightarrow \mathbf{y}(t) &= \mathbf{g} + \int_{t_0}^t \mathbf{f}(s, \mathbf{y}(s)) ds. \end{aligned}$$

Um später einen Aussage zu Existenz bzw. Eindeutigkeit von Lösung treffen zu können, benötigen wir noch die Definition der *Lipschitzbedingung*.

**Definition 4.2.3. (Lipschitzbedingung)**

Sei  $D \subset \mathbb{R}^{n+1}$ , dann erfüllt  $\mathbf{f}$  die *Lipschitzbedingung* bezüglich  $\mathbf{y}$  mit der Lipschitzkonstanten  $L$ , falls

$$|\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(t, \bar{\mathbf{y}})| \leq L|\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}|$$

für alle  $(t, \mathbf{y}), (t, \bar{\mathbf{y}}) \in D$  erfüllt ist.

Man spricht von einer lokalen Lipschitzbedingung, falls es zu jedem  $(\bar{t}, \bar{\mathbf{y}}) \in D$  eine Umgebung  $U := \{(t, \mathbf{y}) \in D : |t - \bar{t}| < \delta, |\mathbf{y} - \bar{\mathbf{y}}| < \delta \text{ mit } \delta > 0\}$  gibt, sodass  $\mathbf{f}$  in  $D \cap U$  einer Lipschitzbedingung genügt.

Da sich diese Definitionen nicht sonderlich für die praktische Anwendung eignen, geben wir zwei Sätze an, welche dieses Problem beheben.

**Satz 4.2.4.**

$\mathbf{f}$  genügt einer Lipschitzbedingung in  $D$  bezüglich  $\mathbf{y}$ , falls  $D$  konvex ist und in  $D$  alle Ableitung  $\frac{\partial f_k}{\partial y_l}$  stetig und beschränkt sind für  $l, k = 1, \dots, n$ .

**Satz 4.2.5.**

$\mathbf{f}$  genügt einer lokalen Lipschitzbedingung in  $D$  bezüglich  $\mathbf{y}$ , falls  $D$  ein Gebiet ist und in  $D$   $\mathbf{f}$  und  $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}$  stetig sind.

Nun haben wir alles zusammen, um den Existenz- und Eindeutigkeitssatz für Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen zu formulieren.

**Satz 4.2.6. (Existenz- und Eindeutigkeit)**

$\mathbf{f}(t, \mathbf{y})$  genüge einer lokalen Lipschitzbedingung in dem Gebiet  $D \subset \mathbb{R}^{n+1}$  bezüglich  $\mathbf{y}$  und sei stetig in  $D$ . Weiter sei  $(t_0, \mathbf{g}) \in D$ . Dann existiert genau eine Lösung von unserem Anfangswertproblem

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

Wir verzichten hier auf einen Beweis und verweisen auf entsprechende Fachliteratur, siehe [Amann].

Betrachten wir von nun an  $S$  als konstant in der Zeit  $t$  und als gegeben an. Erinnern wir uns an unser System von gewöhnlichen Differentialgleichungen aus Kapitel 3

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x_0(t) &= -\nabla_{x_0}\tilde{E}(x_0(t), y_0(t), R(t), \theta(t)) \\ \frac{d}{dt}y_0(t) &= -\nabla_{y_0}\tilde{E}(x_0(t), y_0(t), R(t), \theta(t)) \\ \frac{d}{dt}\theta(t) &= -\nabla_{\theta}\tilde{E}(x_0(t), y_0(t), R(t), \theta(t)) \\ \frac{d}{dt}R(t) &= -\nabla_R E(x_0(t), y_0(t), R(t), \theta(t)) \end{aligned}$$

und formulieren dies um, damit es zu der Schreibweise aus Satz 4.2.6 passt.

Sei dazu

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \\ y_4(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0(t) \\ y_0(t) \\ R(t) \\ \theta(t) \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{f}(t, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(t, y_1, y_2, y_3, y_4) = \begin{pmatrix} -\nabla_{y_1} \tilde{E}(y_1, y_2, y_3, y_4) \\ -\nabla_{y_2} \tilde{E}(y_1, y_2, y_3, y_4) \\ -\nabla_{y_3} \tilde{E}(y_1, y_2, y_3, y_4) \\ -\nabla_{y_4} E(y_1, y_2, y_3, y_4) \end{pmatrix}.$$

Damit erhalten wir genau

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

Nun müssen wir noch unsere Menge  $D \subset \mathbb{R}^{4+1}$  definieren. Als Erstes definieren wir  $t \in [0, T]$  für  $T > 0$  und betrachten einzeln die Funktionen  $y_i$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$ .

$(y_1(t), y_2(t)) = (x_0(t), y_0(t))$  ist der Mittelpunkt unserer Zelle und wir nehmen daher an, dass  $(x_0, y_0) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ , mit  $\Omega$  beschränktes Gebiet, gilt. Zwar sollte die Zelle immer etwas Abstand zum Rand besitzen, dies spielt hierbei jedoch keine Rolle.  $y_3(t) = \theta(t)$  ist unsere Suchrichtung und kann daher beliebige Werte aus  $[0, 2\pi]$  annehmen, theoretisch sogar aus ganz  $\mathbb{R}$ . Der Radius  $y_4(t) = R(t)$  schließlich ist durch die Größe von  $\Omega$  beschränkt. Nehmen wir hier an, dass wir eine untere und obere Schranke vorgeben und wir schreiben können  $R(t) \in [R_{min}, R_{max}]$  mit  $0 < R_{min} < R_{max}$ . Alle Grenzen gelten jeweils für alle  $t \in [0, T]$ .

Es ergibt sich somit  $D = \{[0, T], \Omega, [0, 2\pi], [R_{min}, R_{max}]\}$ . Alle Teilintervalle aus  $D$  können so modifiziert werden, dass wir die Anfangs- und Endpunkte aus dem Definitionsbereich nehmen können und dadurch offene Intervalle erhalten (Beispiel: Wähle  $R_{max} = R_{max} + \varepsilon$  mit  $\varepsilon > 0$  klein) und wir erhalten somit eine offene, nichtleere und zusammenhängende Menge  $D$ , also ein Gebiet.

Noch zu zeigen ist, dass  $\mathbf{f}$  auf  $D$  stetig ist. Dies sehen wir aber sofort, wenn wir uns daran erinnern, dass unsere Energie  $E$  aus Gleichung (3.7) aus einer Verkettung von glatten Funktionen besteht.

Somit haben wir alle Voraussetzungen aus Satz 4.2.6 gezeigt und können im Folgenden von der eindeutigen Lösbarkeit unseres ODE-Systems ausgehen.

# Kapitel 5

## Diskretisierung und Implementierung

In diesem Kapitel werden wir uns damit beschäftigen, wie wir unsere mathematischen Modelle aus Kapitel 3 numerisch umsetzen können. Dazu werden wir in dem ersten Abschnitt 5.1 auf die Diskretisierung in Ort und Zeit eingehen, bevor wir schließlich in Abschnitt 5.2 zu der eigentlichen Implementierung kommen.

### 5.1 Diskretisierung

Nachdem wir in Kapitel 3 die verschiedenen Gleichungen zur Modellierung unseres Problems vorgestellt haben, stellt sich jetzt natürlich die Frage, wie wir diese numerisch lösen können.

Dazu betrachten wir zuerst unsere in Abschnitt 3.2 eingeführte Diffusionsgleichung mit  $b = 1$  und vernachlässigen die „ $\sim$ “-Notation

$$\partial_t S - \Delta S = f. \quad (5.1)$$

Hier ist  $S = S(\mathbf{x}, t)$  mit  $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$  und  $t \in [0, T] =: I_T$  mit  $T > 0$ . Da unsere gesuchte Funktion  $S$  von  $\mathbf{x}$  und  $t$  abhängig ist, benötigen wir eine Diskretisierung in Ort und Zeit. Durch unser entkoppeltes System nehmen wir an, dass  $x_0, y_0, R, \theta$  gegeben und unabhängig von  $t$  sind, wie in Abschnitt 3.4 erläutert.

Für die Zeitdiskretisierung wählen wir eine äquidistante Zerlegung des Zeitintervalls  $[0, T]$  in  $M \in \mathbb{N}$  Teilintervalle der Form

$$I_T = [0, T] = \bigcup_{m=1}^M [t^{m-1}, t^m].$$

Hierbei sei  $t^m = m \cdot dt$  mit  $t^0 = 0$ ,  $t^M = M \cdot dt$  für ein  $dt > 0$ . Wir werden uns also im Folgenden nur Operationen innerhalb eines Zeitschritts ansehen. Das bedeutet, dass wir uns auf den Übergang von  $t^m$  nach  $t^{m+1} = t^m + dt$  beschränken.

Betrachten wir nun unser konkretes Gebiet  $\Omega = ]0, 1[^2 \subset \mathbb{R}^2$ , in dem sich unser Lockstoff ausbreiten soll. Wir definieren uns davon ausgehend ein diskretes Gebiet  $\Omega_h$  mit einer Schrittweite  $h > 0$ . Somit ergibt sich, da wir in  $x$ - und  $y$ -Richtung die gleiche Schrittweite  $h$  nehmen, ein Gitter mit den Gitterpunkten

$\mathbf{x}_{i,j} = (0 + ih, 0 + jh)$  für  $i, j = 1, \dots, n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  Anzahl der Gitterpunkte pro Zeile beziehungsweise pro Spalte und wir können schreiben, dass  $S(\mathbf{x}_{i,j}, t^m)$  die Auswertung der Funktion  $S$  zum Zeitpunkt  $t^m$  an dem Gitterpunkt  $\mathbf{x}_{i,j} = (0 + ih, 0 + jh)$  bedeuten soll. Ist  $h$  vorgegeben und 1 die Intervallbreite für die  $x$ - und  $y$ -Richtung, können wir die Anzahl der Gitterpunkte errechnen zu  $n = \frac{1}{h+1}$ . Unser Gitter besitzt folglich  $n^2$  Gitterpunkte.

Weiter geben wir für unser Anfangs-Randwertproblem eine glatte Anfangslösung  $S_0(\mathbf{x})$  mit  $\mathbf{x} \in \Omega$ , sowie bestimmte Randbedingungen vor. Auf der einen Seite betrachten wir *Dirichlet-Randbedingungen*, was bedeutet, dass wir auf dem Rand von  $\Omega$  über unser Zeitintervall  $I_T$  eine feste Funktion  $g \in C^\infty(\partial\Omega)$  vorschreiben. Als homogene Dirichlet-Randbedingungen bezeichnen wir hier Randwerte, die konstant über das Zeitintervall Null sind. Auf der anderen Seite sprechen wir von homogenen *Neumann-Rändern*, wenn zusätzlich zu der Diffusionsgleichung und dem Anfangswert noch folgende Gleichung gelten soll:  $\frac{\partial S}{\partial \nu}(\mathbf{x}, t) = 0$  mit  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ ,  $t \in [0, T]$  und  $\nu$  als äußerer Normalenvektor von  $\Omega$ .

Kommen wir jetzt zu der Frage, wie wir Gleichung in (5.1) in Ort und Zeit diskretisieren. Als Erstes werden wir auf den Term  $\partial_t S$  eingehen, also der Ableitung von  $S$  nach der Zeit  $t$ . Die Ableitung von  $S$  zum Zeitpunkt  $t^m$  ist über den Vorwärts-Differenzenquotienten wie folgt definiert:

$$\partial_t S(\mathbf{x}, t^m) = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{S(\mathbf{x}, t^{m+1}) - S(\mathbf{x}, t^m)}{dt}.$$

Wählen wir nun  $dt$  klein, aber fest, dann können wir approximativ sagen, dass

$$\partial_t S(\mathbf{x}, t^m) \approx \frac{S(\mathbf{x}, t^{m+1}) - S(\mathbf{x}, t^m)}{dt}$$

gilt. Offensichtlich erhalten wir für  $dt \rightarrow 0$  immer bessere Approximationen. Setzen wir dies in Gleichung (5.1) ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} & \frac{S(\mathbf{x}, t^{m+1}) - S(\mathbf{x}, t^m)}{dt} - \Delta S(\mathbf{x}, t^{m+1}) = f(\mathbf{x}, t^{m+1}) \\ \Leftrightarrow & S(\mathbf{x}, t^{m+1}) - dt \Delta S(\mathbf{x}, t^{m+1}) = S(\mathbf{x}, t^m) + dt f(\mathbf{x}, t^{m+1}). \end{aligned} \quad (5.2)$$

Hätten wir  $\Delta S$  und  $f$  in  $t^m$  und nicht in  $t^{m+1}$  ausgewertet, hätten wir unsere Lösung  $S(\mathbf{x}, t^{m+1})$  direkt hinschreiben können, wenn wir davon ausgehen, dass  $S(\mathbf{x}, t^m)$  bekannt ist. Da wir aber beide Terme in  $t^{m+1}$  auswerten, sprechen wir von dem *impliziten Euler-Zeitschrittverfahren* und nicht von dem expliziten. Das Verwenden von impliziten Verfahren hat in der numerischen Mathematik mehrere Vorteile, auf die wir hier aber nicht weiter eingehen werden, siehe [Harrach].

Bleibt offen, wie wir  $\Delta S$  diskretisieren. Wir verfahren hier nach der *Finite Elemente Methode*. Für Details zu dieser Methode verweisen wir auf Fachliteratur, siehe [Braack]. Wir werden hier lediglich die wichtigsten Gleichungen vorstellen.

Sei dafür  $\eta \in H_0^1(\Omega)$  eine beliebige Testfunktion. Multiplizieren wir Gleichung (5.2) mit  $\eta$ , integrieren anschließend über  $\Omega$  und nutzen aus, dass  $\eta = 0$  auf  $\partial\Omega$ , so erhalten wir durch partielle Integration folgende *schwache Formulierung*:

$$\int_{\Omega} S(\mathbf{x}, t^{m+1}) \eta dx + dt \int_{\Omega} \nabla S(\mathbf{x}, t^{m+1}) \nabla \eta dx = \int_{\Omega} S(\mathbf{x}, t^m) \eta dx + \int_{\Omega} dt f(\mathbf{x}, t^{m+1}) \eta dx.$$

Über den Raum der finiten Elemente ergibt sich so ein Gleichungssystem der Gestalt

$$(M + dtA) S(\mathbf{x}_{i,j}, t^{m+1}) = MS(\mathbf{x}_{i,j}, t^m) + dtf(\mathbf{x}_{i,j}, t^{m+1}), \quad (5.3)$$

welches pro Zeitschritt für  $i, j = 1, \dots, n$  gelöst werden muss. Hier handelt es sich bei  $A$  um die *Laplace-Matrix* und bei  $M$  um die *Masse-Matrix*. Auf deren genaue Gestalt werden wir hier nicht eingehen. Diese Gleichung liefert dann unsere Lösung  $S(\mathbf{x}_{i,j}, t^{m+1})$  für alle  $i, j = 1, \dots, n$  und wir können über die Funktionswerte in den Gitterpunkten eine Funktion interpolieren, welche für alle  $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$  definiert ist. Im Gegensatz zu den vorherigen Gleichungen existiert hier eine Abhängigkeit von  $t^{m+1}$  nur auf der linken Seite und alle anderen Terme sind aus dem vorherigen Zeitschritt bekannt, beziehungsweise im Fall von  $f(\mathbf{x}_{i,j}, t^{m+1})$  initial gegeben.

Lösen wir also iterativ mit der Anfangsbedingung  $S(\mathbf{x}, t_0 = 0) = S_0$  und einer der beiden genannten Randbedingungen, so erhalten wir schließlich Lösungen für alle Zeitschritte  $t_0 = 0, \dots, t_M = T$ .

Nachdem wir gezeigt haben, wie wir die Diffusionsgleichung diskretisieren und lösen können, widmen wir uns nun dem System der gewöhnlichen Differentialgleichungen. Diese waren in Abschnitt 3.3 wie folgt definiert worden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} x_0 &= -\nabla_{x_0} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \\ \frac{\partial}{\partial t} y_0 &= -\nabla_{y_0} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \\ \frac{\partial}{\partial t} \theta &= -\nabla_{\theta} \tilde{E}(x_0, y_0, R, \theta) \\ \frac{\partial}{\partial t} R &= -\nabla_R E(x_0, y_0, R, \theta). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Außerdem rufen wir erneut in Erinnerung, dass die Funktionen  $x_0, y_0, R$  und  $\theta$  in diesem Fall von  $t$  abhängig sind, da sich die Zelle bewegt und sich mit ihr ihre Parameter über die Zeit ändern. Da unsere Energie  $E$  eine Abhängigkeit von dem Lockstoff  $S$  aufweist, muss hier erwähnt werden, dass wir durch unser entkoppeltes System davon ausgehen, dass  $S(\mathbf{x})$  gegeben und konstant in der Zeit ist.

Wenden wir die oben eingeführte Zeiddiskretisierung an und ersetzen wieder die Ableitung nach  $t$  (linke Seite von (5.4)) durch den Differenzenquotienten, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \frac{x_0(t^{m+1}) - x_0(t^m)}{dt} &= -\nabla_{x_0} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\ \frac{y_0(t^{m+1}) - y_0(t^m)}{dt} &= -\nabla_{y_0} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\ \frac{\theta(t^{m+1}) - \theta(t^m)}{dt} &= -\nabla_{\theta} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\ \frac{R(t^{m+1}) - R(t^m)}{dt} &= -\nabla_R E(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Da wir hier auf der rechten Seite den aktuellen Zeitschritt verwenden, können wir die Energie und damit ihren Gradienten explizit angeben und brauchen nicht, wie bei der Diskretisierung der Diffusionsgleichung ein Gleichungssystem lösen. Daher sprechen wir hier vom *expliziten Euler-Zeitschrittverfahren*.

Auflösen nach dem kommenden Zeitschritt ergibt folgendes System von Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 x_0(t^{m+1}) &= x_0(t^m) - dt \nabla_{x_0} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\
 y_0(t^{m+1}) &= y_0(t^m) - dt \nabla_{y_0} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\
 \theta(t^{m+1}) &= \theta(t^m) - dt \nabla_{\theta} \tilde{E}(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)) \\
 R(t^{m+1}) &= R(t^m) - dt \nabla_R E(x_0(t^m), y_0(t^m), R(t^m), \theta(t^m)).
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Wenn wir nun zuerst die Diffusionsgleichung lösen, die Lösung in unser ODE-System einsetzen und dieses dann lösen und wiederum deren Lösungen in die Diffusionsgleichung einsetzen, so erhalten wir iterativ für alle Zeitschritte eine Lösung für unser Problem.

Bevor wir im nächsten Abschnitt auf die Implementierung eingehen, muss jedoch noch geklärt werden, wie wir die rechte Seite  $f$  diskretisieren, da hier in beiden Fällen ein Randintegral berechnet werden muss. Um dieses Integral zu berechnen, bedienen wir uns der *summierten Trapezregel*.

Sei dafür  $a < b \in \mathbb{R}$  und  $[a, b]$  das Intervall, über welches wir integrieren wollen. Weiter sei  $f$  stetig auf  $[a, b]$ . Zerteilen wir nun  $[a, b]$  in  $n$  Teilintervalle der Breite  $h_{Trapez} = \frac{b-a}{n}$ , können wir  $\int_a^b f ds$  annähern durch

$$\int_a^b f ds \approx h_{Trapez} \left( \frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) + \sum_{i=1}^{n-1} f(a + ih) \right).$$

Da wir in Kapitel (4) gezeigt haben, dass unsere rechten Seiten mindestens stetig sind, können wir die summierte Trapezregel anwenden.

In der rechten Seite muss jedoch nicht nur das Randintegral diskretisiert werden, sondern auch die Funktion  $\sigma(\varphi)$ , welche wie folgt definiert war (vgl. Gleichung (3.8)):

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} \sigma_0, & \varphi \in [a, b] \subset [0, 2\pi] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

$\sigma$  besitzt also nur in dem Intervall  $[a, b]$  Werte ungleich Null, wodurch auch unser Integrand nur in diesem Intervall Werte aufweist. Daher können wir zur Diskretisierung die Grenzen unseres Integrals auf  $a, b$  reduzieren und den Integranden mit  $\sigma_0$  multiplizieren. Wir erhalten

$$\int_0^{2\pi} \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma(\varphi) |\partial_\varphi \psi(\varphi)| d\varphi = \int_a^b \alpha(S \circ \psi(\varphi)) \sigma_0 |\partial_\varphi \psi(\varphi)| d\varphi.$$

Diesen Ausdruck können wir wieder mit der summierten Trapezregel approximieren.

Somit haben wir alle relevanten Terme diskretisiert und können nun in Abschnitt 5.2 auf die wesentlichen Merkmale der Implementierung eingehen.

## 5.2 Implementierung

In diesem Abschnitt werden wir die wesentlichen Merkmale unserer Implementierung vorstellen und auf ein paar Besonderheiten aufmerksam machen.

Als Grundgerüst haben wir uns dem Programm `FEATFLOW` des Lehrstuhls für „Angewandte Mathematik und Numerik“ der TU Dortmund bedient. Hier war es möglich, mittels der Finite Elemente Methode (FEM) Gleichung (5.3) zu lösen, da in dem Programm bereits die Berechnung der dort benötigten Matrizen implementiert ist und auch entsprechende Lösungsalgorithmen zur Berechnung von Lösungen linearer Gleichungssysteme vorhanden sind. Somit konnten wir über eine `for`-Schleife, welche unseren Zeitschritt  $m$  hochzählte, den impliziten Euler in dieses Programm integrieren. Auch war es uns möglich, eine beliebige rechte Seite der Diffusionsgleichung anzugeben, sowie eine beliebige Startlösung  $S_0$ , was beim Testen noch eine wichtige Rolle spielen wird. Hier sei schon erwähnt, dass die rechte Seite der Diffusionsgleichung lediglich für die Eigenproduktion des Lockstoffes durch die Zelle von Nöten ist. Das heißt, setzen wir die rechte Seite Null, so ändert sich nichts, außer, dass unsere Zelle keinen eigenen Lockstoff produziert. Dies werden wir in Kapitel 6 genauer untersuchen.

Bleiben wir in unserer gerade genannten Zeitschleife. Nachdem wir die Diffusionsgleichung für Zeitschritt  $m$  mittels FEM gelöst haben, ermöglicht es uns `FEATFLOW` von der noch diskreten Lösung  $S(\mathbf{x}_{i,j}, t^m)$  mit  $\mathbf{x}_{i,j} \in \Omega_h$  eine stetige Lösung  $S(\mathbf{x}, t^m)$  mit  $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$  zu interpolieren. Außerdem ist es möglich, den Gradienten  $\nabla_{\mathbf{x}} S$  der stetigen Lösung zu bestimmen. Wir erinnern uns, dieser wird für die rechte Seite unseres ODE-Systems benötigt. Im Anschluss an dessen Berechnung können wir über die in Abschnitt 5.1 hergeleiteten Diskretisierungen unser ODE-System lösen und erhalten unsere neuen Zellparameter für Zeitschritt  $m + 1$ . Diese setzen wir wieder in die Diffusionsgleichung ein und lösen erneut, bis wir zum letzten Zeitschritt  $M$  gelangt sind.

In jedem Zeitschritt wird nach Berechnung der Lösung der Diffusionsgleichung eine `.vtk`-Datei angelegt, mit welcher wir die Lockstoffverteilung mittels dem Visualisierungsprogramm `Paraview` grafisch darstellen können. Doch nicht nur den Lockstoff wollen wir hinterher grafisch betrachten, sondern auch, wie sich die Zellparameter verändert haben. Daher schreiben wir nach jedem Zeitschritt die neuen Werte in einen Vektor, den wir schließlich am Ende unseres Programms in einer `.txt`-Datei abspeichern. Anschließend lesen wir diesen Vektor mit `Matlab` ein und plotten die Werte über die Zeit (vgl. Kapitel 6). Nachdem wir skizziert haben, wie unser Programm aufgebaut ist, gehen wir nun auf einige Aspekte etwas genauer ein.

Bevor wir anfangen können zu lösen, müssen verschiedene Parameter gesetzt werden. Wie wir im Diskretisierungsabschnitt erklärt haben, diskretisieren wir unser Zeitintervall über die Zerlegung in kleine Intervalle. Dazu haben wir die Zeitschrittweite  $dt$  eingeführt, welche wir in unserem Programm frei wählen können. Anders als in dem eben genannten Abschnitt geben wir hier jedoch keinen Endzeitpunkt  $T$  an, sondern lassen unsere Zeitschleife eine vorgegebene Anzahl von Zeitschritten durchlaufen. In den meisten Testfällen setzen wir diesen Parameter als  $M = 10000$ , wodurch sich bei einer Zeitschrittweite von  $dt = 0.0001$  eine Zeitspanne der Länge 1 ergibt. Doch nicht nur unser Zeitintervall muss diskretisiert werden, sondern auch das Gebiet  $\Omega$ . Wir setzen hier den zugehörigen Parameter  $h = 2^{-k}$  mit  $k \in \mathbb{N}$ .

Weiter ist es uns über `if`-Abfragen möglich, anzugeben, wie oft die Diffusionsgleichung gelöst werden

soll. Wir können also festlegen, dass beispielsweise nur in den ersten zehn Zeitschritten die Diffusionsgleichung gelöst wird, um eine Anpassung der Startlösung an die Randbedingung vorzunehmen, und anschließend in jedem Zeitschritt nur noch das ODE-System lösen. In Zukunft sprechen wir hierbei von „Optimierung der Zellparameter“. Dies macht vor allem dann Sinn, wenn wir die Optimierung testen wollen und wir durch dieses Verfahren eventuelle Fehler, die über das Lösen der Diffusionsgleichung entstehen, vernachlässigen können. Zu beachten ist hierbei jedoch, dass wir so nur vorgehen können, wenn wir keine Eigenproduktion der Zelle haben, da diese lediglich über die rechte Seite der Diffusionsgleichung einen Einfluss hat. Das heißt, wenn wir Eigenproduktion der Zelle untersuchen wollen, müssen wir in jedem Zeitschritt die Diffusionsgleichung lösen.

Andersrum ist es uns auch möglich, nur die Diffusionsgleichung zu lösen und die Optimierung auszustellen.

Ein anderer Aspekt unserer Implementierung ist, dass wir festlegen können, welche Zellparameter optimiert werden sollen. So können wir beispielsweise festlegen, dass sich in einem Testfall lediglich der Mittelpunkt der Zelle ändern darf und die restlichen Parameter konstant bleiben. Auch dies erleichtert uns das Testen.

Schauen wir uns die ODEs für den Mittelpunkt an, so stellen wir fest, dass hier das Gebiet  $\Omega$  gar keine Rolle spielt. Das heißt, für die Zelle gilt  $\Omega = \mathbb{R}^2$ . Um dies zu korrigieren, führen wir nach jeder Berechnung eines neuen Mittelpunktes  $(x_{0,neu}, y_{0,neu})$  eine Sicherheitsfrage ein, ob sich unsere Zelle noch in  $\Omega$  befindet. Ist dies nicht der Fall, so setzen wir den Mittelpunkt auf den Punkt  $(\bar{x}_{0,neu}, \bar{y}_{0,neu}) \in \Omega$ , welcher den kleinsten Abstand zum errechneten Punkt hat und noch in  $\Omega$  liegt. Da wir wollen, dass die komplette Zelle im Inneren von unserem Gebiet liegt, halten wir  $\max\{R, r\} + 0.01$  Abstand zum Rand von unserem Mittelpunkt.

Weil wir davon ausgehen, dass sich unsere Zelle nicht in einem Zeitschritt um beispielsweise  $180^\circ$  drehen kann, setzen wir auch hier der Zelle künstliche Grenzen und fixieren alle Drehungen  $|\theta| > \frac{1}{16}\pi$  auf eben genau diesen Grenzwert (mit passendem Vorzeichen). Dies ist jedoch in keinem der Testfälle aufgetreten.

Auch soll sich unsere Zelle nicht unendlich in die Länge ziehen können. Daher setzen wir dem Hauptachsenradius folgende Schranken:  $R_{neu} \in [\frac{1}{2}R_{start}, 2R_{start}]$  mit festem Startradius  $R_{start}$ . Analoges gilt über die Verkettung von Hauptachsenradius, Volumen und Nebenachsenradius auch für  $r$ .

# Kapitel 6

## Numerische Tests

Nachdem wir in Kapitel 5 die Diskretisierung und Implementierung unseres Problems vorgestellt haben, werden wir in diesem Kapitel unser Programm verschiedenen Tests unterziehen. Dazu betrachten wir in Abschnitt 6.1 die in Kapitel 3.2 vorgestellte Diffusionsgleichung und werden zeigen, dass unser Programm diese numerisch richtig löst. Anschließend gehen wir in Abschnitt 6.2 auf unser ODE-System ein. Hier werden wir anhand einfacher Beispiele nachweisen, dass eine korrekte Umsetzung vorliegt und sich die Zelle genau so verhält, wie wir es erwarten würden. Außerdem vergleichen wir in Abschnitt 6.3 unsere numerische Lösung mit einer analytisch berechneten Lösung und werden abschließend in Abschnitt 6.4 das Verhalten bei mehr als einer Zelle untersuchen.

### 6.1 Validierung der Diffusionsgleichung

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, dass unser Programm die Diffusionsgleichung numerisch richtig löst und darüber hinaus einige Testkonfigurationen vorstellen, welche in Kapitel 6.2 häufig genutzt werden.

Zur Überprüfung der Richtigkeit der Lösung der Diffusionsgleichung nehmen wir die Funktion  $S(\mathbf{x}, t) = e^{-8\pi^2 t} \sin(2\pi x) \cos(2\pi y)$  mit  $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega = ]0, 1[^2 \subset \mathbb{R}^2$  und  $t \in [0, T]$  für  $T > 0$ , setzen diese als Lösung in die Diffusionsgleichung

$$\partial_t S(\mathbf{x}, t) - \Delta S(\mathbf{x}, t) = f(\mathbf{x}, t) \quad (6.1)$$

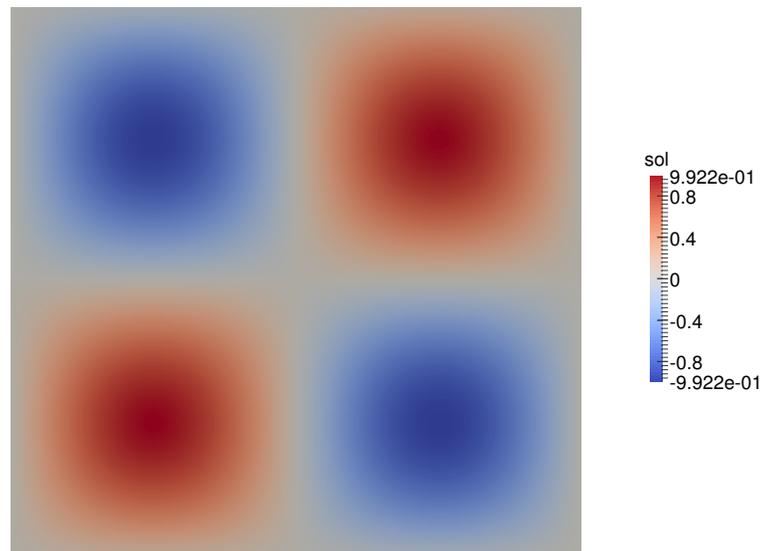
ein und erhalten für die rechte Seite  $f = 0$ . Weiter ergibt sich für die Dirichlet-Randbedingung  $g = 0 \forall t \in [0, T]$ , da  $S(\mathbf{x}, t) = 0 \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega$ . Somit haben wir ein Anfangs-Randwertproblem erzeugt, welches wir nun numerisch lösen werden und anschließend die diskrete Lösung  $S_h$  mit der analytischen Lösung  $S$  vergleichen. Hierbei betrachten wir auf der einen Seite den  $L^2$ -Fehler (vgl. Tabelle 6.1) und auf der anderen Seite den  $H^1$ -Fehler (vgl. Tabelle 6.2). Darüber hinaus untersuchen wir die gemachten Fehler für verschiedene Verfeinerungslevel der Ortsdiskretisierung  $h$  sowie für verschiedene Zeitschritte  $t^m$ .

Es ergibt sich so nachfolgende Tabelle 6.1 für den  $L^2$ -Fehler.

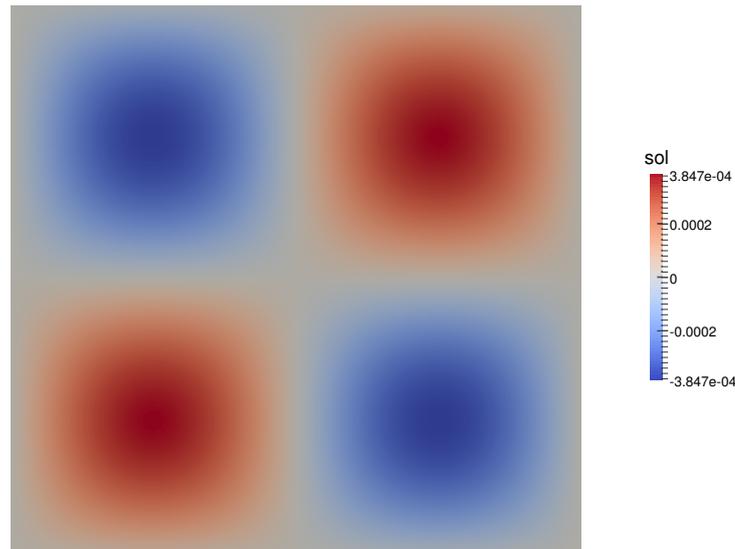
$h$	$m = 0$	$m = 10$	$m = 100$	$m = 1000$
$\frac{1}{16}$	0	$4.5837836E - 02$	$2.8929600E - 02$	$6.9351753E - 05$
$\frac{1}{32}$	0	$9.2470204E - 03$	$5.8262119E - 03$	$1.5523057E - 05$
$\frac{1}{64}$	0	$1.1778786E - 03$	$6.5922115E - 04$	$1.4401597E - 06$
$\frac{1}{128}$	0	$3.0277703E - 03$	$1.9957560E - 03$	$5.8622450E - 06$
$\frac{1}{256}$	0	$3.5994044E - 03$	$2.3754282E - 03$	$6.9985219E - 06$

Tabelle 6.1:  $L^2$ -Fehler der diskreten Lösung  $S_h$  zu der analytischen Lösung  $S$ 

Bei den ersten beiden Halbierungen der Gitterweite  $h$  ergibt sich für  $m = 10, 100, 1000$  eine deutliche Fehlerminderung. Dass wir hier keinen Faktor fest machen können, um den sich der Fehler reduziert, liegt daran, dass der Fehler in der Zeitdiskretisierung zusätzlichen Einfluss nimmt. Dies ist auch der Grund, warum bei der Verfeinerung von  $\frac{1}{64}$  zu  $\frac{1}{128}$  und schließlich zu  $\frac{1}{256}$  der Fehler im Wesentlichen gleich bleibt. Hier ist der Zeitdiskretisierungsfehler dominanter als der im Ort. Weiter lässt sich beobachten, dass der Fehler zwischen Zeitschritt 10 und Zeitschritt 100 in etwa auf dem gleichen Niveau ist, wohingegen der Fehler in Zeitschritt 1000 deutlich kleiner ist. Erklären lässt sich dieses Verhalten, wenn wir die Verteilung des Lockstoffes in Zeitschritt 0 mit der in Zeitschritt 1000 vergleichen (s. Abbildungen 6.1 und 6.2).

Abbildung 6.1: Anfangsverteilung des Lockstoffes bei  $S_0 = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y)$ 

Zunächst lässt sich eine vollkommen symmetrische Verteilung des Lockstoffes beobachten, sowohl in Abbildung 6.1 als auch in Abbildung 6.2. Auch lässt sich auf den ersten Blick kaum ein Unterschied erkennen. Dies liegt aber lediglich daran, dass die Farbskalierung angepasst wurde. Wenn wir die Legende hinzuziehen, so stellen wir fest, dass die Werte zum Zeitpunkt 0 noch von  $-0.9922$  bis zu  $0.9922$  reichen, also ein Intervall der Länge  $1.9844$ , wohingegen zum Zeitpunkt 1000 die Werte lediglich aus einem Intervall der Länge  $0.0007694$  stammen. Somit ist die Intervalllänge gut  $10^{-3}$  mal kleiner, was genau dem Faktor zwischen den Werten in Tabelle 6.1 entspricht.

Abbildung 6.2: Verteilung des Lockstoffes bei  $S_0 = \sin(2\pi x) \cos(2\pi y)$  in Zeitschritt 1000

Betrachten wir nun in Tabelle 6.2 den  $H^1$ -Fehler unserer Lösung.

$h$	$m = 0$	$m = 10$	$m = 100$	$m = 1000$
$\frac{1}{16}$	0	$9.4508720E - 01$	$4.8022124E - 01$	$6.6160416E - 04$
$\frac{1}{32}$	0	$4.6541931E - 01$	$2.2962611E - 01$	$2.2091956E - 04$
$\frac{1}{64}$	0	$2.3344105E - 01$	$1.1479513E - 01$	$9.5383377E - 05$
$\frac{1}{128}$	0	$1.2018097E - 01$	$6.0343978E - 02$	$7.1080105E - 05$
$\frac{1}{256}$	0	$6.6788190E - 02$	$3.5775107E - 02$	$6.6774563E - 05$

Tabelle 6.2:  $H^1$ -Fehler der diskreten Lösung  $S_h$  zu der analytischen Lösung  $S$ 

Anders als im Falle des  $L^2$ -Fehlers lässt sich hier in Zeitschritt 10 sowie 100 eine Halbierung des Fehlers bei Halbierung der Gitterweite  $h$  beobachten. Daraus lässt sich schließen, dass der Zeitdiskretisierungsfehler zwar bei dem  $L^2$ -Fehler dominant erscheint, im Falle des  $H^1$ -Fehlers jedoch keinen Einfluss hat, da hier genau das Verhalten auftritt, welches durch die FEM Theorie beschrieben wird, vergleiche [Braack]. Zum Zeitschritt 1000 lässt sich, wie beim  $L^2$ -Fehler, aufgrund der Werte nahe Null kaum eine Aussage machen. Auch hier lässt sich im Vergleich zu Zeitschritt 10 beziehungsweise 100 ein Faktor von  $10^{-3}$  erkennen.

Wir erhalten also sowohl für den  $L^2$ -, als auch für den  $H^1$ -Fehler, ein erklärbares Verhalten, wodurch wir von nun an davon ausgehen, dass wir die Diffusionsgleichung richtig lösen.

Wie bereits erwähnt, werden wir im Folgenden noch drei verschiedene Anfangskonzentrationen unseres Lockstoffes  $S$  angeben, auf die wir in Kapitel 6.2 öfters zurückgreifen werden. In allen drei Fällen betrachten wir die homogene Diffusionsgleichung, erlauben also keine Eigenproduktion der Zelle. Außerdem lösen wir die Diffusionsgleichung mit homogenen Neumann-Randbedingungen.

Für den ersten Testfall setzen wir die Anfangskonzentration auf  $S_0(x, y) = x \forall (x, y) \in \Omega$ . Es ergibt sich die in Abbildung 6.3 dargestellte Lockstoffkonzentrationsverteilung nach 10 Zeitschritten.

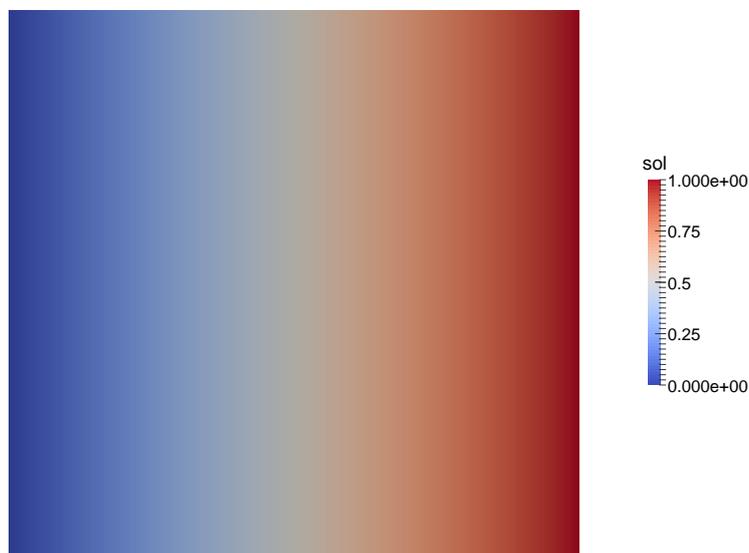


Abbildung 6.3: Lockstoffverteilung in Zeitschritt 10 für Anfangskonzentration  $S_0(x, y) = x$

Setzen wir  $S_0(\mathbf{x}) = y \forall (x, y) \in \Omega$ , so ergibt sich Abbildung 6.4.



Abbildung 6.4: Lockstoffverteilung in Zeitschritt 10 für Anfangskonzentration  $S_0(x, y) = y$

Und setzen wir schließlich  $S_0(\mathbf{x}) = x + y \forall (x, y) \in \Omega$ , so erhalten wir Abbildung 6.5

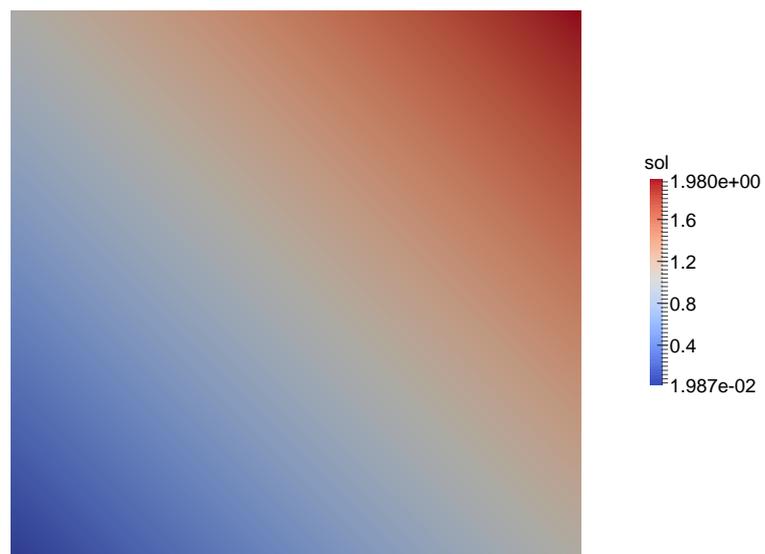


Abbildung 6.5: Lockstoffverteilung in Zeitschritt 10 für Anfangskonzentration  $S_0(x, y) = x + y$

## 6.2 Validierung des ODE-Systems für eine Zelle

Nachdem wir in Abschnitt 6.1 gezeigt haben, dass unsere Diffusionsgleichung numerisch richtig gelöst wird, kommen wir jetzt zu dem ODE-System. Dies ist besonders entscheidend für uns, da über dessen Lösung die Bewegung unserer Zelle definiert wird, was das primäre Ziel unseres Programm ist.

Dafür werden wir in Abschnitt 6.2.1 zeigen, dass numerische Stabilität vorliegt, bevor wir in den darauffolgenden Abschnitten die einzelnen Gleichungen des ODE-Systems einzeln und unabhängig voneinander untersuchen werden, sowie anschließend in Kombination miteinander.

### 6.2.1 Numerische Stabilität

Wir werden in diesem Abschnitt zunächst den einfachsten Testfall *Steady* untersuchen. Wie der Name schon suggeriert, werden wir hier annehmen, dass kein Lockstoff in unserem Gebiet vorliegt (Startlösung  $S_0(\mathbf{x}) = 0 \forall \mathbf{x} \in \Omega = [0, 1]^2$ , homogene Dirichlet-Randbedingungen) und sich unsere Zelle dann auch nicht bewegen wird. Dies werden wir sowohl für den Fall mit Eigenproduktion von Lockstoff durch die Zelle zeigen, als auch ohne Eigenproduktion ( $f = 0$ ). Bevor wir jedoch zur Auswertung dieses Tests kommen, müssen wir einige Parameter festlegen. Wir verwenden in diesem Test folgende für unsere Implementierung entschiedenen Parameter:

$$h = \frac{1}{256}, \quad dt = 0.0001, \quad M = 2000 \Rightarrow T = 0.2. \quad (6.2)$$

Außerdem setzen wir unseren initialen Zellmittelpunkt auf die Mitte unseres Gebietes  $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$ , sowie das Volumen  $V = 0.01$ , den Hauptachsenradius  $R = 0.08$  und den daraus resultierenden Radius  $r = \frac{V}{\pi R} = 0.0398$ . Weiter nehmen wir an, dass unsere Zelle waagrecht in  $\Omega$  liegt, das heißt, wir setzen die Suchrichtung  $\theta = 0$ . Schließlich setzen wir noch  $\sigma(\varphi) = 1$  für alle  $\varphi \in [0, 2\pi]$ . Wir erlauben also der Zelle, überall auf dem Rand Energie zu messen. Wir lösen unser System, indem wir zuerst zehn Zeitschritte lang die Diffusionsgleichung mit rechter Seite  $f = 0$  lösen und anschließend das ODE-System für die restlichen 1990 Zeitschritte. Diese Konfiguration werden wir in Zukunft als *Debug Konfiguration* bezeichnen.

Für den Verlauf des Mittelpunktes der Zelle ergibt sich folgende Abbildung 6.6:

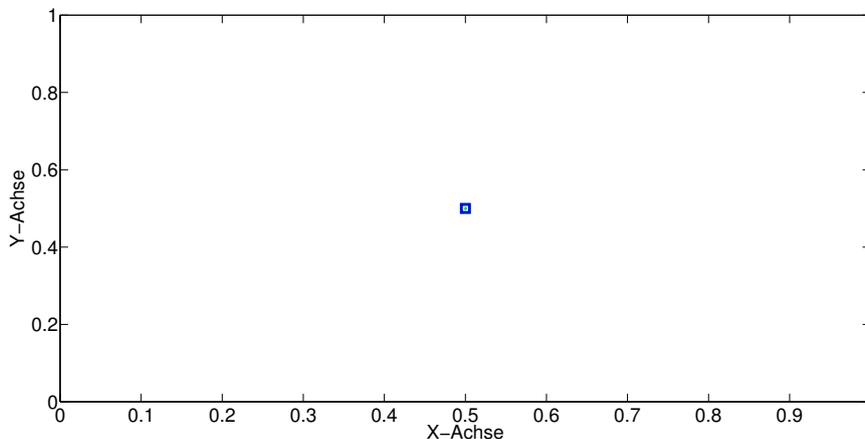


Abbildung 6.6: Verlauf des Mittelpunktes der Zelle mit Start- (grün) und Endpunkt (blau)  $(0.5, 0.5)$

Deutlich zu erkennen ist, dass sich unser Zellmittelpunkt nicht ändert und auch nach 2000 Zeitschritten noch die Koordinaten  $(0.5, 0.5)$  aufweist.

Betrachten wir nun in Abbildung 6.7 den Verlauf unserer Suchrichtung  $\theta$ .

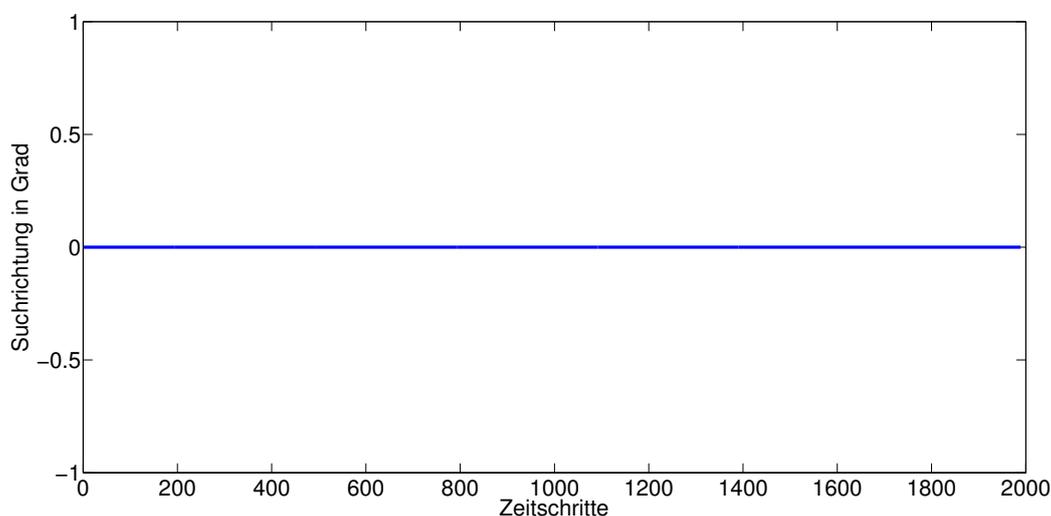


Abbildung 6.7: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

Auch hier lässt sich keinerlei Änderung der Werte über das komplette Zeitintervall feststellen.

Kommen wir schließlich zu dem letzten Zellparameter  $R$ , dargestellt in Abbildung 6.8. Da das Volumen  $V$  festgesetzt wird, reicht es aus,  $R$  zu untersuchen und darüber eine Aussage über  $r$  treffen zu können.

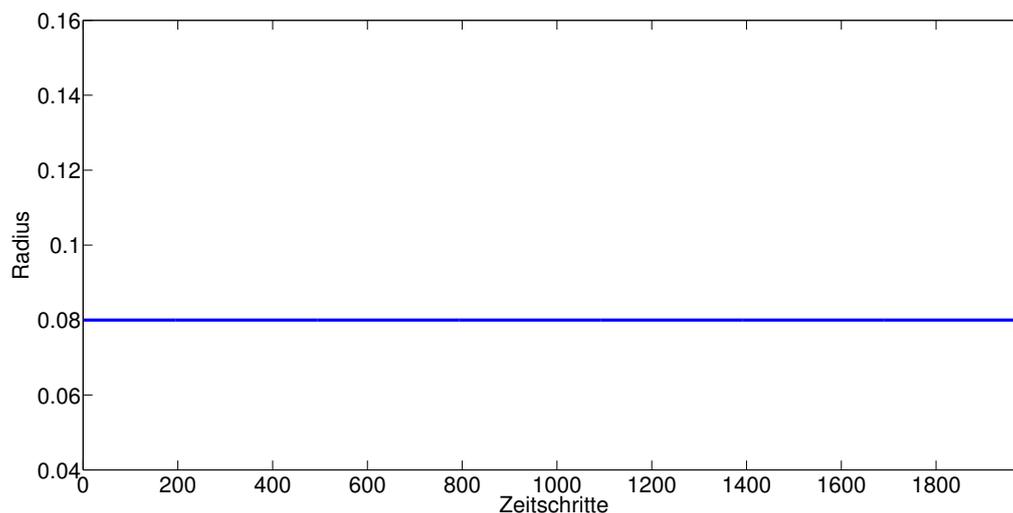


Abbildung 6.8: Verlauf des Hauptachsenradius  $R$  der Zelle

Wie schon bei dem Mittelpunkt und der Suchrichtung der Zelle erfährt auch hier die Zelle keine Änderung. Dies führt dazu, dass sich auch  $r$  nicht ändert.

Das gleiche Verhalten ergibt sich, wenn wir die rechte Seite der Diffusionsgleichung  $f = \int_0^{2\pi} \delta_\varepsilon(\mathbf{x} - \psi) |\partial_\varphi \psi_{x_0, y_0, R, \theta}(\varphi)| d\varphi$  setzen und damit Eigenproduktion der Zelle erlauben. Da

diese in die Diffusionsgleichung eingeht, müssen wir in diesem Fall für alle 2000 Zeitschritte die Diffusionsgleichung lösen, abwechselnd mit dem ODE-System. Da sich die gleichen Diagramme ergeben wie für  $f = 0$ , geben wir diese nicht noch einmal an.

Damit haben wir gezeigt, dass unser Programm sowohl beim Lösen der Diffusionsgleichung (vgl. Abschnitt 6.1) als auch beim Lösen des ODE-Systems numerisch stabil bleibt. Jedoch können wir noch keinerlei Aussage über die Richtigkeit der Lösung treffen. Dies werden wir in Abschnitt 6.2.2 genauer untersuchen.

### 6.2.2 Zellparameter Tests

In diesem Abschnitt werden wir die einzelnen Gleichungen unseres ODE-Systems näher untersuchen und betrachten dafür den Verlauf des zu der jeweiligen Gleichung gehörigen Zellparameters. Dazu betrachten wir unsere Debug Konfiguration (vgl. Gleichung (6.2) mit nachfolgender Ausführung), setzen aber diesmal  $M = 10000$  und  $\sigma(\varphi) = 750$ . Die entscheidende Änderung zum Steady Testfall ist jedoch, dass wir als Startlösung  $S_0(\mathbf{x}) = x$  mit  $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$  (vgl. dazu Abbildung 6.3) wählen und somit einen Konzentrationsgradienten von  $(1, 0)$  haben.

Wenn wir nun lediglich die ersten beiden Gleichungen unseres ODE-Systems betrachten, welche die Änderung des Mittelpunktes angeben und wir damit keine Änderung des Radius und der Suchrichtung zulassen, so sollte sich der Intuition nach die Zelle in Richtung des rechten Randes unseres Gebiets bewegen, da hier  $S_0$  die größten Werte aufweist. Mit dieser Überlegung im Hinterkopf betrachten wir nun Abbildung 6.9.

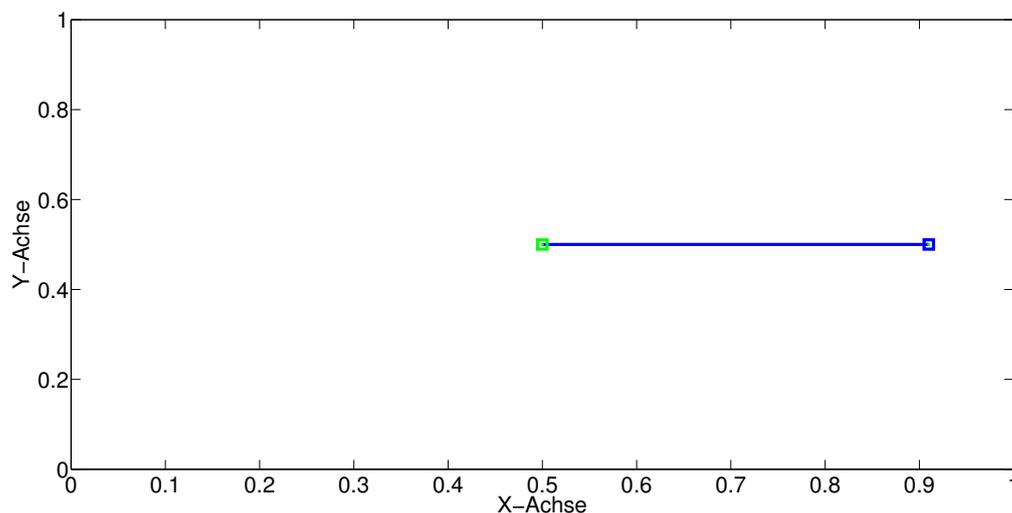


Abbildung 6.9: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.91, 0.5)$  (blau)

Deutlich zu erkennen ist, dass die Zelle mit Startwert  $(0.5, 0.5)$  (grün gekennzeichnet in Abbildung 6.9) horizontal nach rechts wandert und schließlich bei  $(0.91, 0.5)$  stehen bleibt (blau gekennzeichnet). Der Wert 0.91 ergibt sich daraus, dass wir, wie in Kapitel 5 erläutert, dem Mittelpunkt der Zelle künstliche

Schranken setzen, sodass unsere Zelle immer vollständig in  $\Omega$  liegt. Wir hatten hier den Abstand als  $\max(R, r) + 0.01$  definiert. Setzen wir  $R = 0.08$  und  $r = 0.0398$  ein, so erhalten wir  $0.09$ . Dies entspricht genau der Differenz zwischen der  $x$ -Koordinate ( $1.0$ ) auf dem rechten Rand von  $\Omega$  und unserem Endpunkt  $0.91$ .

Betrachten wir nun selbigen Testfall mit einer Eigenproduktion der Zelle mit  $n = 32$  als Anzahl der Teilintervalle der summierten Trapezregel und  $p = 9.0$  als Höhe unserer Gaußglocken auf dem Rand der Zelle, so erhalten wir in Abbildung 6.10 folgenden Verlauf des Mittelpunkts.

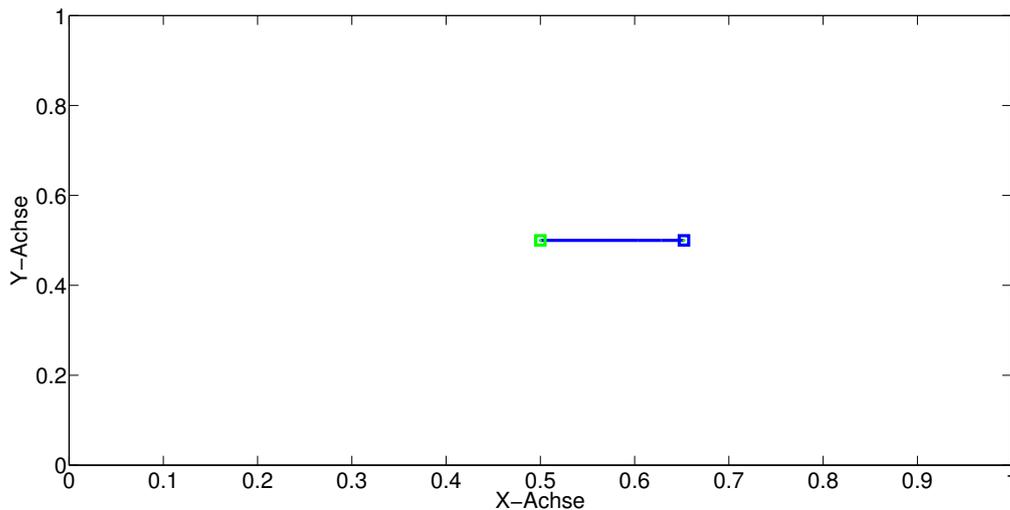


Abbildung 6.10: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.652, 0.5)$  (blau) mit Eigenproduktion der Zelle

Anders als in Abbildung 6.9 wandert die Zelle nicht mehr ganz bis zum rechten Rand. Dies liegt daran, dass nach ein paar Zeitschritten die Eigenproduktion so viel Lockstoff hervorgebracht hat, dass diese einen stärkeren Einfluss auf die Bewegung hat als der anfänglich vorliegende Lockstoff  $S_0$ . Diesen Effekt können wir vermeiden, indem wir (durch Addition/Subtraktion einer Konstanten im Exponenten) die Höhe der Gaußglocken skalieren, dadurch die Eigenproduktion reduzieren und  $S_0$  somit über das Zeitintervall dominant bleibt.

Da dieser Effekt auch bei allen kommenden Testfällen auftritt, werden wir im Folgenden den Testfall mit Eigenproduktion vernachlässigen, da er keinen zusätzlichen Erkenntnisgewinn hervorbringt, es wird die Bewegung lediglich frühzeitig gestoppt.

Wenn wir nun die Eigenproduktion ausschalten und unsere Startlösung auf  $S_0(\mathbf{x}) = y$  (vgl. Abbildung 6.4) setzen, somit also ein Konzentrationsgradient von  $(0, 1)$  vorliegt, erhalten wir den gleichen Verlauf der Zelle wie in Abbildung 6.9, nur in  $y$ -Richtung anstelle der  $x$ -Richtung; und wir haben mit Abbildung 6.11 gezeigt, dass auch die Bewegung der Zelle in  $y$ -Richtung so verläuft, wie wir es angenommen hätten.

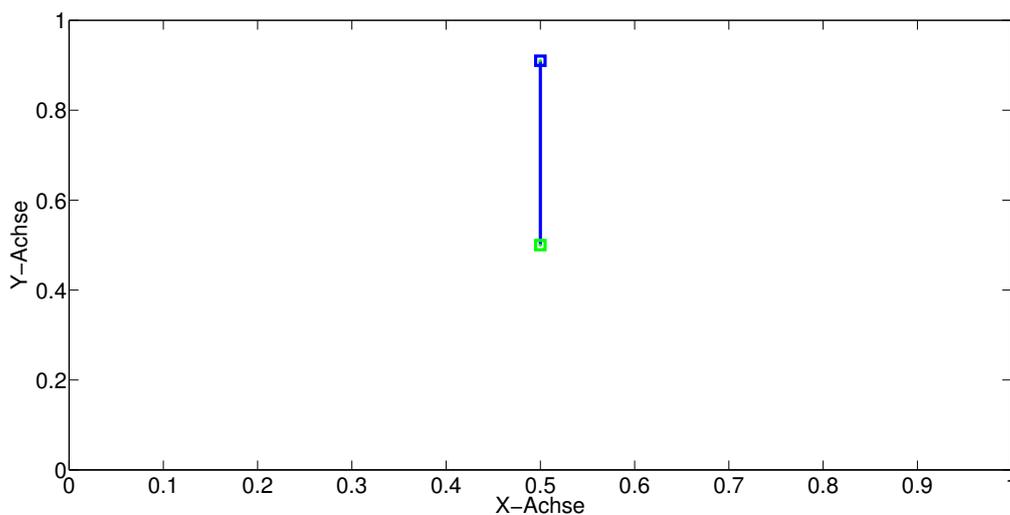


Abbildung 6.11: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.5, 0.91)$  (blau)

Betrachten wir im Folgenden eine Startlösung unserer Lockstoffverteilung, bei der wir sowohl in  $x$ - als auch in  $y$ -Richtung eine Veränderung des Mittelpunkts erwarten. Dazu wählen wir  $S_0(\mathbf{x}) = x + y$  (vgl. Abbildung 6.5). Wir erhalten in Abbildung 6.12 folgenden Verlauf des Mittelpunkts:

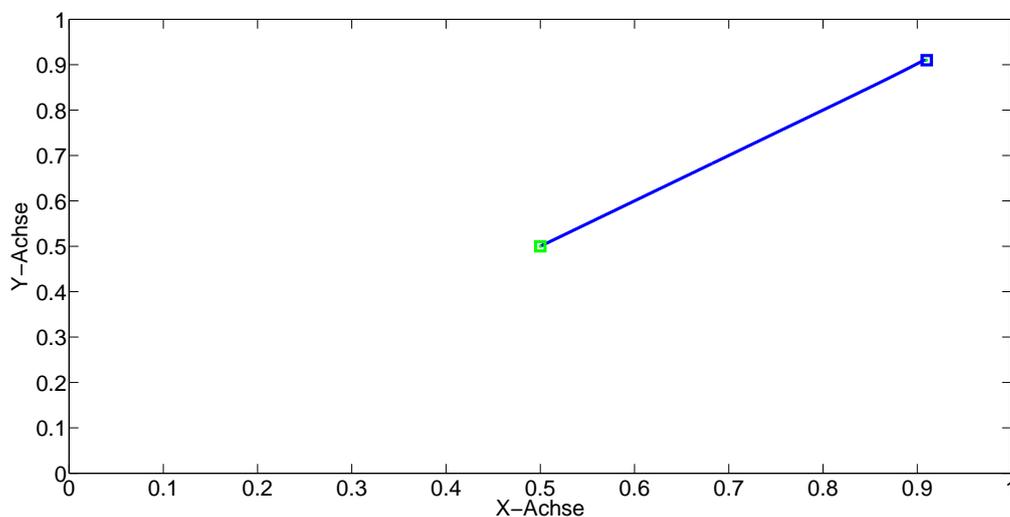


Abbildung 6.12: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.91, 0.91)$  (blau)

Auch hier tritt das erwartete Verhalten der Zelle ein. Sie bewegt sich auf der Winkelhalbierenden (vgl. Tabelle 6.3) in die rechte obere Ecke und hat ihren Endpunkt in  $(0.91, 0.91)$ . Um zu zeigen, dass die Zelle entlang der Winkelhalbierenden wandert, haben wir in Tabelle 6.3 einige Eckpunkte ihrer Bewegung aufgelistet.

Zeitschritt $m$	$x_0(t^m)$	$y_0(t^m)$
0	0.5	0.5
100	0.6222754822	0.6222754822
200	0.7231729755	0.7231730185
300	0.8070542659	0.8070733684
400	0.8777029377	0.8786120366
451	0.91	0.91

Tabelle 6.3: Auswahl von Mittelpunkt-Koordinaten zu unterschiedlichen Zeitschritten

Dass sich in Zeitschritt 400 die  $x$ - und  $y$ -Koordinate des Mittelpunktes auf der dritten Nachkommastelle unterscheidet, liegt an der Genauigkeit unserer eingesetzten numerischen Verfahren. Außerdem sei erwähnt, dass sich nach dem 451. Zeitschritt die Koordinaten nicht weiter ändern.

Nach diesem Test können wir nun davon ausgehen, dass die Gleichungen zur Änderung des Mittelpunktes der Zelle einwandfrei funktionieren und sich unsere idealisierte Zelle so verhält, wie wir es erwarten würden.

Kommen wir nun zu der Untersuchung der Suchrichtung  $\theta$ . Dazu setzen wir diesmal den Mittelpunkt  $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$  fest und auch den Radius  $R$  fixieren wir wieder auf 0.08. Die initiale Suchrichtung sei  $0^\circ$ ,  $M = 10000$  und die restlichen Parameter setzen wir wie in der Debug Konfiguration (vgl. Gleichung (6.2) mit nachfolgender Ausführung).

Um jedoch einen aussagekräftigen Testfall zu erzeugen, ändern wir die Funktion  $\sigma$  ab. Wir definieren für unseren ersten Testfall  $\sigma(\varphi)$  wie folgt:

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} 20000, & \varphi \in [-\frac{\pi}{16}, \frac{\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} . \quad (6.3)$$

Diese Definition erlaubt der Zelle nur – wenn wir davon ausgehen, dass die Zelle anfänglich waagrecht in dem Gebiet liegt – an der Spitze eine Energie zu messen. Wir sprechen in Zukunft von einem „Suchkopf“. Etwas auffällig ist der hohe Wert von  $\sigma$ , diesen haben wir so groß gewählt, da, anders als bei dem Mittelpunkt, sich der Wert von  $\theta$  nur sehr langsam ändert und wir innerhalb von 10000 Zeitschritten ein aussagekräftiges Resultat erzielen wollen.

Wir setzen als Startlösung unserer Diffusionsgleichung  $S_0(\mathbf{x}) = x + y$  (vgl. Abbildung 6.5). Da die Zelle nur am Suchkopf die Energie messen kann, suggeriert uns die Vorstellung, dass sich die Zelle um  $+45^\circ$  dreht, da ihre Hauptachse so genau entlang der Winkelhalbierenden verläuft und ihr Suchkopf im Bereich der höchsten Konzentration liegt. Um dies zu überprüfen, betrachten wir nun Abbildung 6.13.

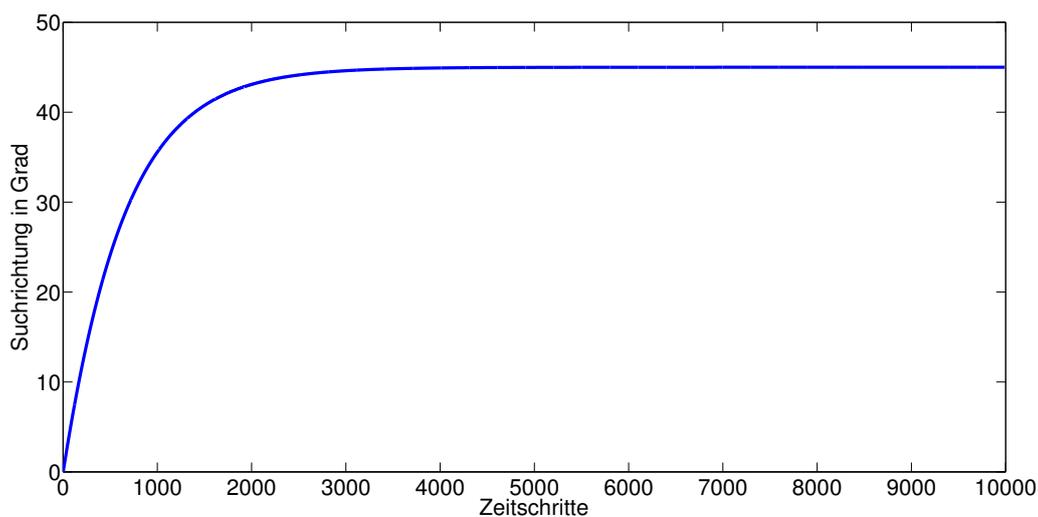


Abbildung 6.13: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

Wie wir vermutet haben, dreht sich die Zelle um  $+45^\circ$  und bleibt nach Erreichen dieses Winkels konstant. Dies entspricht genau dem, was wir erwarten haben.

Nehmen wir nun an, dass sich unserer Suchkopf am hinteren Ende der Zelle befindet, wir  $\sigma$  also wie folgt definieren

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} 20000, & \varphi \in [\frac{15\pi}{16}, \frac{17\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases},$$

so können wir erwarten, dass sich die Zelle diesmal um  $-135^\circ$  dreht, da sie so wieder mit der Hauptachse entlang der Winkelhalbierenden liegt, wo die höchste Lockstoffkonzentration vorliegt. Genau dieses Verhalten können wir in Abbildung 6.14 erkennen.

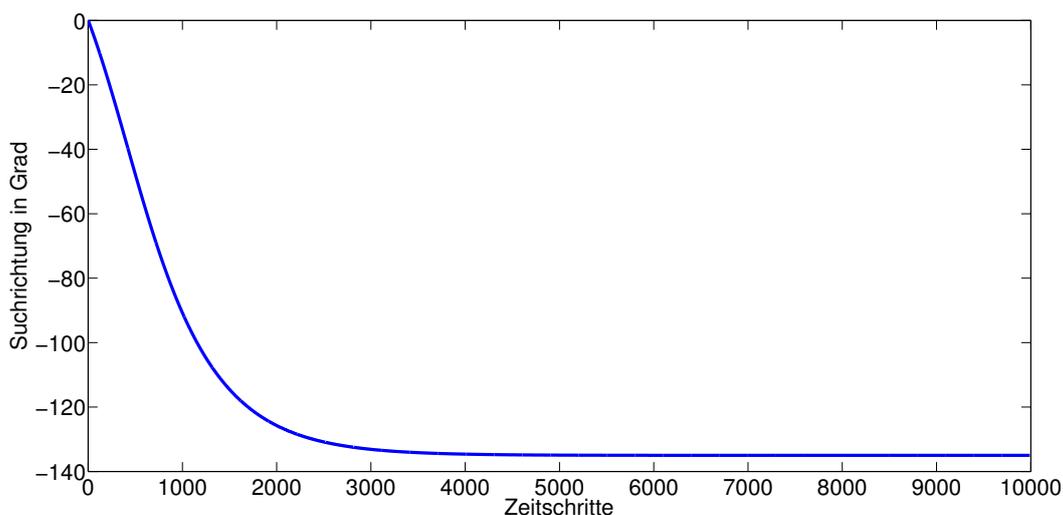


Abbildung 6.14: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

Auch hier werden wir, wie schon bei dem Mittelpunkt-Test, eine Tabelle 6.4 mit ausgewählte Werten angeben, um die Abbildungen zu ergänzen.

Zeitschritt $m$	Suchkopf vorne	Suchkopf hinten
0	0	0
1000	35.55242	-90.67543
3000	44.61309	-133.12360
5000	44.98417	-134.92326
7000	44.99935	-134.99686
10000	44.99998	-134.99997

Tabelle 6.4: Auswahl von Suchrichtungen  $\theta$  zu unterschiedlichen Zeitschritten  $t^m$  in Grad

Wir erreichen also nach 10000 Zeitschritten bis auf die fünfte Nachkommastelle das Ergebnis, das wir erwartet haben. Mit diesem guten Resultat können wir den Test der Suchrichtung abschließen und widmen uns nun dem Test des Radius der Hauptachse.

Wir nehmen als Ausgangssituation unsere Debug Konfiguration (vgl. Gleichung (6.2) mit nachfolgender Ausführung), setzen den Mittelpunkt und die Suchrichtung fest und betrachten nur den Radius als veränderlich. Weiter definieren wir

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} 0.1, & \varphi \in [-\frac{\pi}{16}, \frac{\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Diesmal wählen wir ein sehr kleines  $\sigma$ , da im Vergleich zum Radius die Spanne, in der sich unser Radius verändern kann, vergleichsweise klein ist ( $R \in [0.04, 0.16]$  zu  $\theta \in [0, 2\pi]$ ). Unser Suchkopf befindet sich vorne und als Startlösung wählen wir  $S_0(\mathbf{x}) = x$  (vgl. Abbildung 6.3). Zu erwarten ist, dass sich, da die Zelle einen festen Mittelpunkt hat, der Hauptachsenradius vergrößert, um mit dem Suchkopf näher an das Maximum der Konzentration zu gelangen, welches ja am rechten Rand vorliegt. Betrachten wir daher Abbildung 6.15.

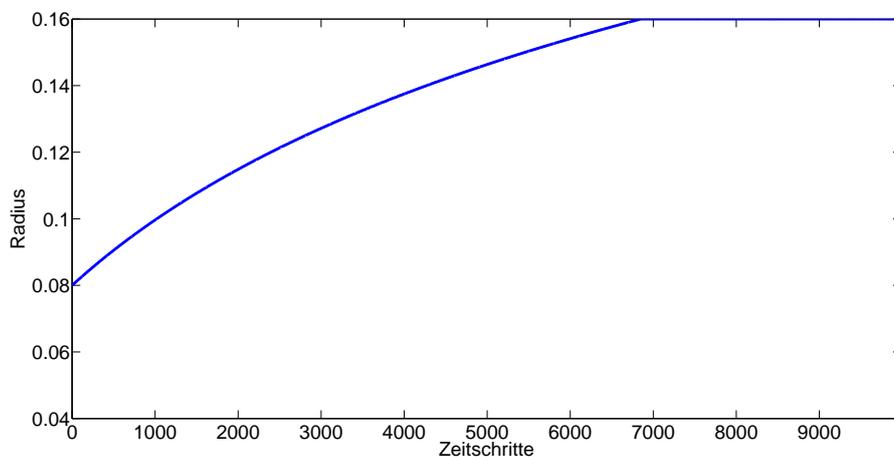


Abbildung 6.15: Verlauf des Hauptachsenradius  $R$  der Zelle

Deutlich zu erkennen ist, dass sich der Radius  $R$  von Beginn an vergrößert, bis er schließlich sein Maximum von  $R = 0.16$  erreicht. Von diesem Zeitpunkt an, bleibt der Radius konstant. Durch das Vergrößern des Hauptachsenradius ergibt sich eine Verkleinerung des Radius  $r$ , welcher am Ende von anfänglichen 0.0398 nur noch 0.0199 beträgt. Die Zelle ist also merklich länger und schmaler entlang der Hauptachse geworden.

Untersuchen wir nun einen Testfall mit  $S_0(\mathbf{x}) = y$  (vgl. Abbildung 6.4) und einem  $\sigma$  von

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} 0.1, & \varphi \in [\frac{7\pi}{16}, \frac{9\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}.$$

Wir verlegen den Suchkopf also auf den Bereich  $[\frac{7\pi}{16}, \frac{9\pi}{16}]$ . Das ist der Bereich der Zelle, der in der anfänglichen Debug Konfiguration am nächsten zum Rand bei  $y = 1$  liegt. Wenn wir uns nun überlegen, wie sich der Hauptachsenradius ändert, so müssen wir uns erneut verdeutlichen, dass eine Vergrößerung von  $R$  zu einer Verkleinerung von  $r$  führt und andersherum. Damit der Suchkopf näher an das Konzentrationsmaximum gelangt, muss  $r$  größer werden, wir sollten daher eine Verkleinerung von  $R$  beobachten. Betrachten wir Abbildung 6.16, so geschieht genau dies. Der Hauptachsenradius wird kleiner, womit  $r$  größer wird.

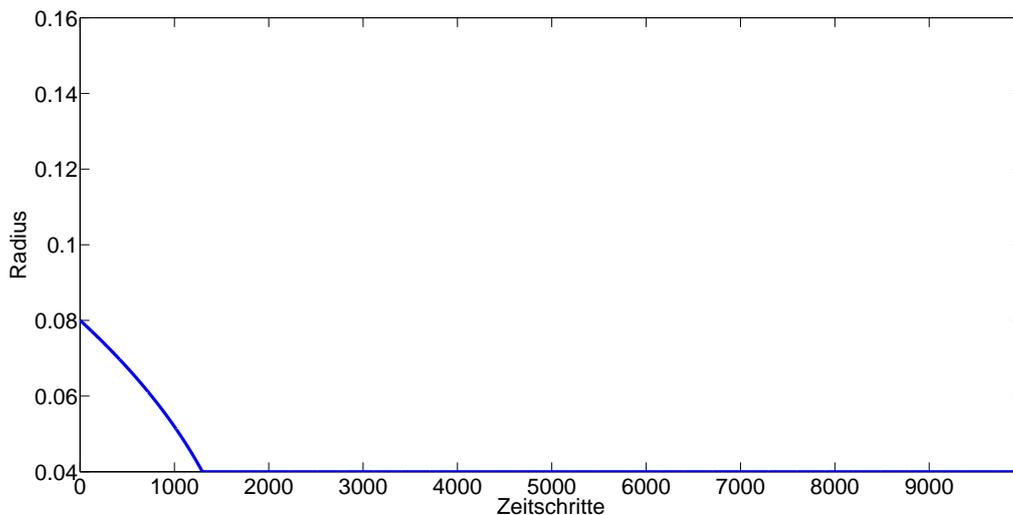


Abbildung 6.16: Verlauf des Hauptachsenradius  $R$  der Zelle

Wir können diesen Teil unserer Tests abschließen, da wir gezeigt haben, dass sich alle Zellparameter in ihrer Entwicklung genau so verhalten, wie wir es erwarten würden. Der einzige Aspekt, den wir beachten müssen, ist, dass wir unterschiedliche Werte von  $\sigma$  wählen müssen, damit sich die Änderung der einzelnen Parameter in etwa gleich stark und vor allem gleich schnell ändert. Dies lässt sich aber durch wiederholtes Ausführen der Tests einfach bestimmen.

Da wir bis jetzt nur die Veränderung eines Parameters untersucht haben, werden wir nun auf den Fall eingehen, wenn sich mehr als ein Parameter ändern kann.

Im ersten Testfall halten wir den Radius fest und erlauben eine Änderung des Mittelpunkts sowie der Suchrichtung. Dazu gehen wir von der Debug Konfiguration aus, wählen

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} \sigma_0, & \varphi \in [\frac{15\pi}{16}, \frac{17\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit  $\sigma_0 = 20000$  für die Gleichung, die die Veränderung von  $\theta$  bestimmt, und  $\sigma_0 = 100$  für die Mittelpunkt Gleichungen. Weiter setzen wir  $S_0(\mathbf{x}) = x + y$  (vgl. Abbildung 6.5). Wir erhalten in dieser Konfiguration folgende Abbildungen 6.17 und 6.18 für die zeitliche Veränderung des Mittelpunkts beziehungsweise der Suchrichtung.

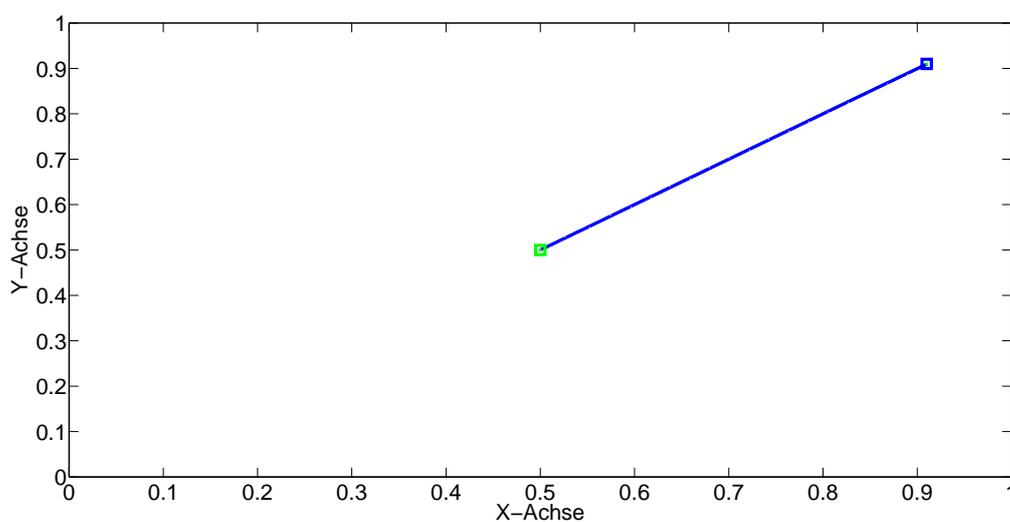


Abbildung 6.17: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.91, 0.91)$  (blau)

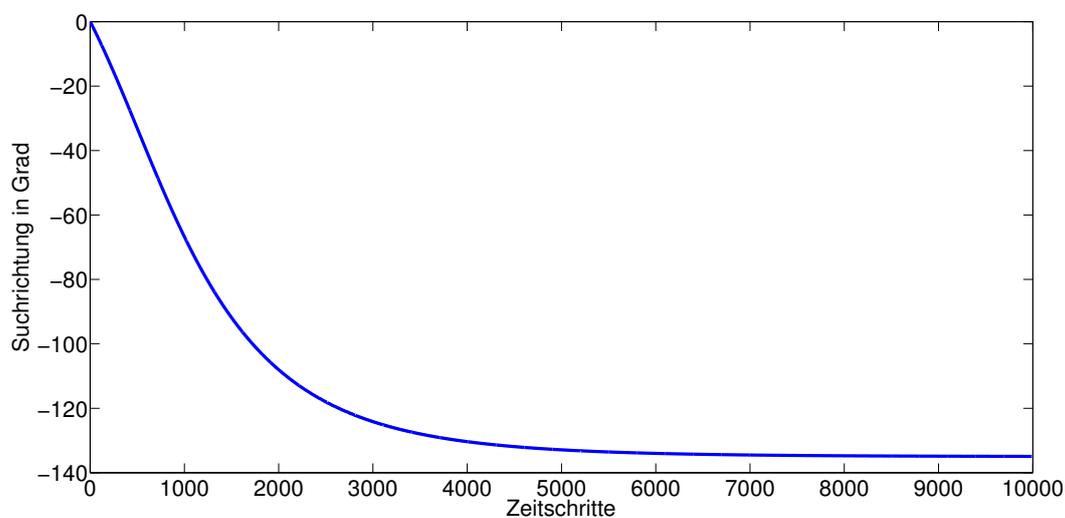


Abbildung 6.18: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

Wie schon bei dem Test mit nur einem Parameter ergibt sich hier das erwartete Bild. Die Zelle wandert entlang der Winkelhalbierenden in die obere rechte Ecke, wo sie in  $(0.91, 0.91)$  ihren Endpunkt findet. Während sie sich diesem Punkt nähert, dreht sich die Zelle um  $-135^\circ$ . Es entstehen in etwa die gleichen Abbildungen, wie wir sie bei den Einzeltests gesehen haben.

Fixieren wir im nächsten Testfall nur den Mittelpunkt, setzen  $S_0(\mathbf{x}) = x + y$  (vgl. Abbildung 6.5) und wählen

$$\sigma(\varphi) := \begin{cases} \sigma_0, & \varphi \in [-\frac{\pi}{16}, \frac{\pi}{16}] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

mit  $\sigma_0 = 20000$  für die Gleichung, die die Veränderung von  $\theta$  bestimmt, und  $\sigma_0 = 1$  für den Radius, so ergeben sich folgende zwei Abbildungen 6.19 und 6.20.

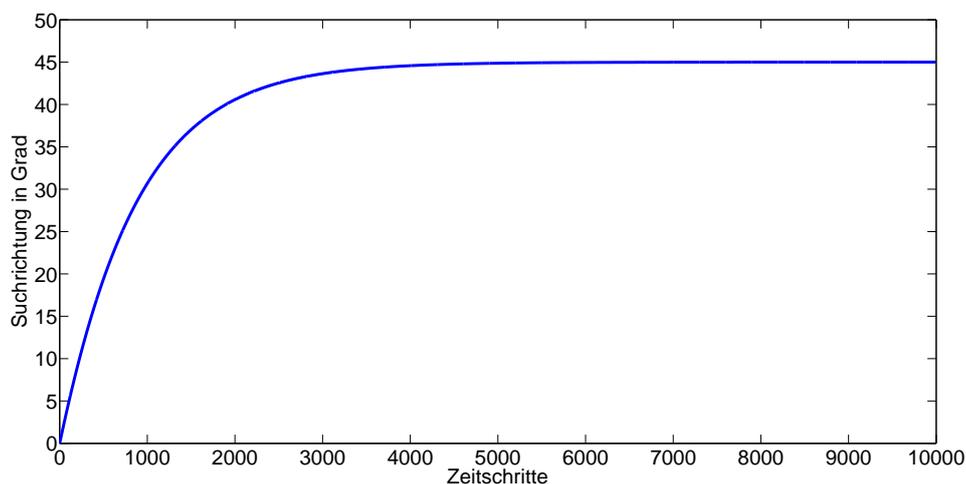


Abbildung 6.19: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

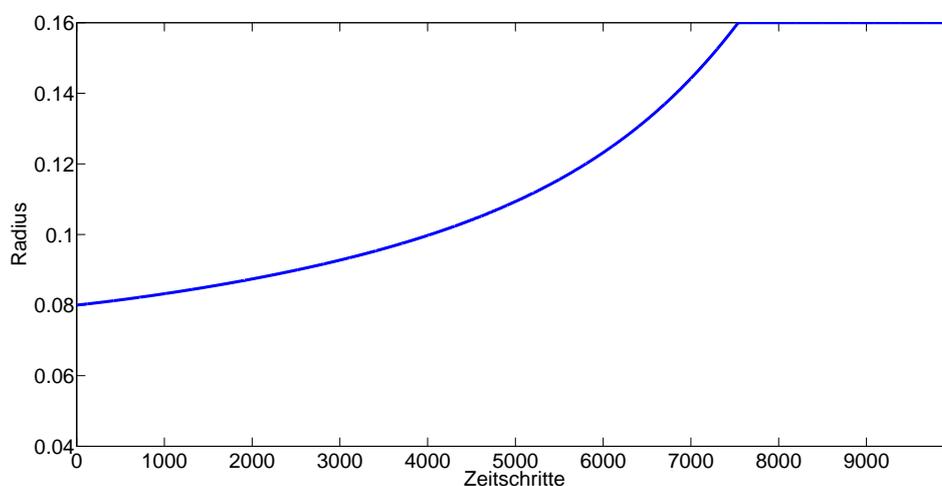


Abbildung 6.20: Verlauf des Hauptachsenradius  $R$  der Zelle

Auch hier tritt das erwartete Verhalten ein. Die Zelle dreht sich um  $+45^\circ$  und vergrößert ihren Hauptachsenradius  $R$  auf das Maximum, um der Stelle der höchsten Konzentration am Nächsten zu sein.

Abschließend in diesem Abschnitt werden wir den Testfall untersuchen, wenn wir keinen der Zellparameter festhalten. Dazu wählen wir  $S_0(\mathbf{x}) = x + y$  (vgl. Abbildung 6.5),  $\sigma_R = 0.1$ ,  $\sigma_\theta = 20000$  und  $\sigma_{(x_0, y_0)} = 150$ , um eine gleichmäßige Bewegung zu erhalten. Außerdem definieren wir in diesem Test keinen Suchkopf, sondern lassen die Zelle über den vollständigen Rand die Energie messen. Es ergeben sich hier nachfolgende drei Abbildungen 6.21, 6.22 und 6.23

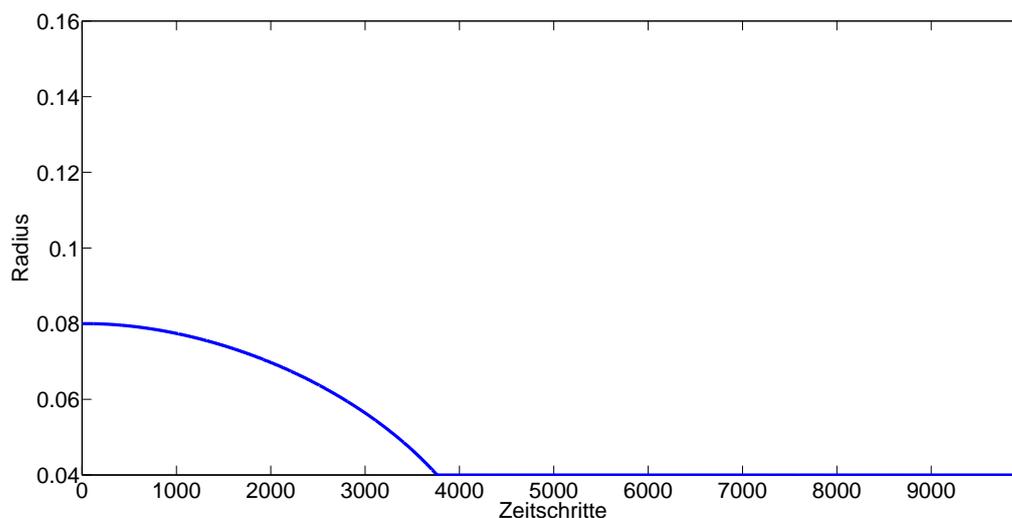


Abbildung 6.21: Verlauf des Hauptachsenradius  $R$  der Zelle

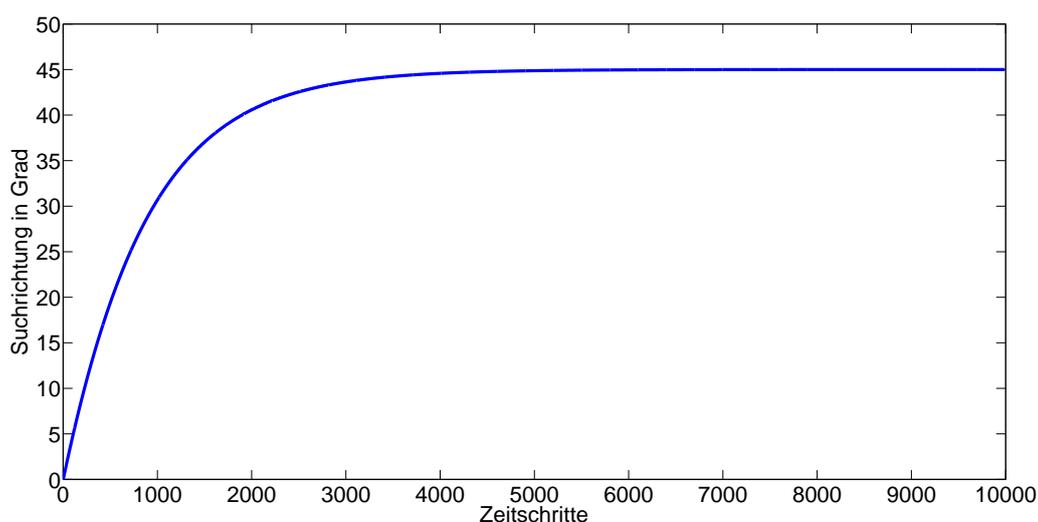


Abbildung 6.22: Verlauf der Suchrichtung  $\theta$  der Zelle

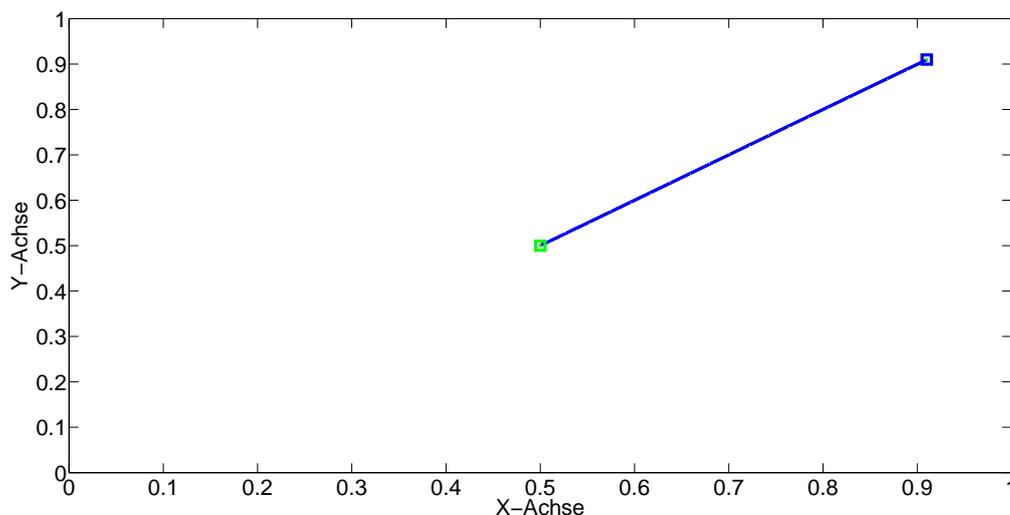


Abbildung 6.23: Verlauf des Mittelpunkts der Zelle mit Startpunkt  $(0.5, 0.5)$  (grün) und Endpunkt  $(0.91, 0.91)$  (blau)

Die Verläufe für den Mittelpunkt sowie für den Winkel lassen sich sofort erklären (vgl. vorherige Ausführungen). Anders ist es jedoch bei dem Radius. Hier hätten wir eventuell angenommen, dass sich, wenn sich die Zelle um  $+45^\circ$  gedreht hat, der Radius vergrößert, um näher an das Maximum in der oberen rechten Ecke zu gelangen. Dies tut die Zelle jedoch nicht. Sie verkleinert ihren Radius  $R$  und vergrößert damit  $r$ . Offensichtlich erfährt die Zelle auf diese Weise mehr Energie, als würde sie sich entlang der Winkelhalbierenden „strecken“. Da wir durch die bisherigen Tests die Richtigkeit unserer Gleichungen bewiesen haben, werden wir dieses Verhalten nicht in Frage stellen, zumal es sich aufgrund der Struktur von  $S_0$  nur schwer vorstellen lässt, wie sich die Zelle schlussendlich „in der Realität“ verhalten würde.

Wir können abschließend festhalten, dass die in diesem Abschnitt gezeigten Resultate die Richtigkeit unserer Gleichungen belegen. Stellt sich noch die Frage, ob dies auch gilt, wenn sich mehr als eine Zelle in unserem Gebiet befindet. Dieser Frage widmen wir uns in Abschnitt 6.4.

### 6.3 Validierung des ODE-Systems mittels einer analytischen Lösung

In diesem Kapitel werden wir anhand einer analytischen Lösung die Richtigkeit unserer Lösung des ODE-Systems nachweisen.

Dazu wählen wir eine einfache Konfiguration mit  $R = r = 0.01$ , womit sich das Volumen der nun kreisförmigen Zelle ergibt zu  $V = \pi Rr = \frac{1}{10000}\pi$ . Weiter setzen wir den Mittelpunkt auf  $(x_0, y_0) = (0.5, 0.5)$  und die Suchrichtung  $\theta = 0$ .

Mit diesen Startwerten erhalten wir für die initiale Parametrisierung des Randes der Zelle

$$\psi(\varphi) = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{pmatrix} + R \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cos \varphi + r \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sin \varphi \quad \text{für } 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

Weiter setzen wir  $S_0(x, y) = x$  als Anfangsverteilung der Lockstoffkonzentration,  $\alpha(s) = -s + 1$ , damit  $\alpha'(s) = -1$  (vgl. Kapitel 3.3) und nehmen an, dass sich unser Radius nicht ändern kann. Durch die Wahl der Zelle als Kreis ergibt sich das Linienelement zu  $|\partial_\varphi \psi(\varphi)| = R$ .

Setzen wir nun alles in unser ODE-System ein, so erhalten wir folgendes System von Gleichungen, wenn wir  $\sigma(\varphi) = 1$  wählen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} x_0 &= 2\pi R = \frac{1}{50}\pi \approx 0.06283185307 \\ \frac{\partial}{\partial t} y_0 &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \theta &= 0. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich  $x_0(t) = \frac{1}{50}\pi t + c$  für ein  $c \in \mathbb{R}$  und durch Einsetzen von  $x_0(0) = 0.5$  als Startpunkt  $x_0(t) = \frac{1}{50}\pi t + 0.5$ .

In Tabelle 6.5 werden wir nun die analytische Lösung mit der diskreten in verschiedenen Zeitpunkten vergleichen.

Zeitschritt $m$	Analytische Lösung	Diskrete Lösung
0	0.5	0.5
100	0.5006283185	0.5006283185
300	0.5018849556	0.5018849556
500	0.5031415927	0.5031415927
700	0.5043982297	0.5043982297
1000	0.5062831853	0.5062831853

Tabelle 6.5: Vergleich von analytischer Lösung mit der diskreten Lösung

Es ergeben sich in diesem Spezialfall exakt die selben Werte. Somit können wir nun endgültig davon ausgehen, dass unser Programm unser Problem richtig löst und wir können in dem folgenden Abschnitt ein System mit zwei Zelle untersuchen.

## 6.4 Validierung des ODE-Systems für zwei Zellen

Nachdem wir im vorherigen Abschnitt die Richtigkeit unseres Programm nachgewiesen haben, werden wir nun einen Schritt weitergehen und eine zweite Zelle in unser Gebiet legen.

Reine Parametertests liefern hier das gleiche Verhalten wie wir es schon in Abschnitt 6.2 gezeigt haben, nur eben mit zwei Zellen statt einer. Daher geben wir zu diesem Sachverhalt keine weiteren Diagramme an. In allen vorangegangenen Tests hatten wir stets die Eigenproduktion von Lockstoff durch die Zelle vernachlässigt, da diese bei einer Zelle nur zur Behinderung beiträgt und eigentlich sinnfrei ist, da es keine andere Zelle gibt, die darauf reagieren könnte. Dies ändert sich nun.

Betrachten wir eine Anfangslösung  $S_0 = 0$  in  $\Omega$ . Es liegt also anfänglich kein Lockstoff vor. Jedoch erlauben wir den Zellen, selber Lockstoff zu produzieren. Für den ersten Zeitschritt ergibt sich so die in Abbildung 6.24 dargestellte Lockstoffkonzentrationsverteilung.

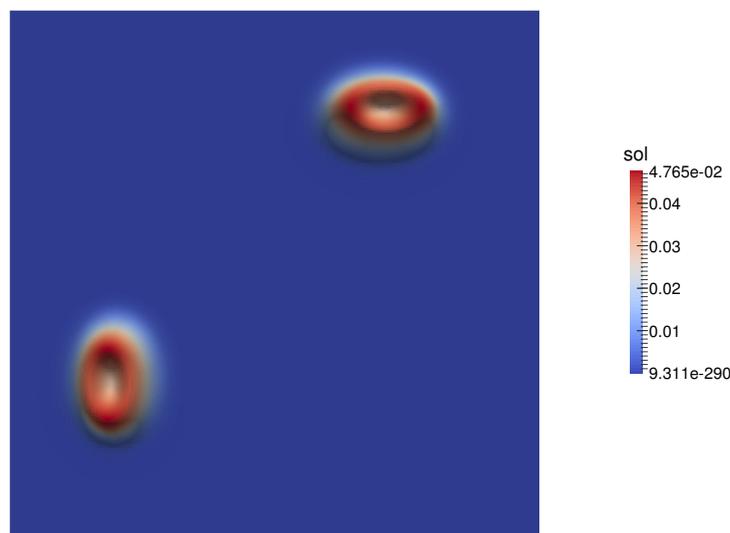


Abbildung 6.24: Lockstoffkonzentration im ersten Zeitschritt mit  $S_0 = 0$  und zwei Zellen mit Lockstoffproduktion

Hier wurden als Mittelpunkte der Zellen  $(0.2, 0.3)$  und  $(0.8, 0.7)$  gewählt, sowie ein Radius von  $R = 0.08$  und ein Volumen von  $V = 0.01$ . Die Suchrichtung der unteren Zelle beträgt  $\theta = \frac{1}{2}\pi$  und die der oberen  $\theta = 0$ .

Betrachten wir nun die Bewegung der beiden Zellen über die Zeit, sowie deren Suchrichtung, so erhalten wir die folgenden zwei Abbildungen 6.25 und 6.26.

Schön zu erkennen ist hier in Abbildung 6.25, dass sich die Zellen nach einer kurzen Zeit zueinander drehen bis sie schließlich genau in die gleiche Richtung zeigen. Das anfängliche „Warten“ ist darauf zurückzuführen, dass sich der von den Zellen produzierte Lockstoff erst eine Weile ausbreiten muss. Sobald die Zellen eine Erhöhung der Lockstoffkonzentration wahrnehmen, die nicht ihrer eigenen Produktion zugrunde liegt, beginnt die Drehung der Zelle.

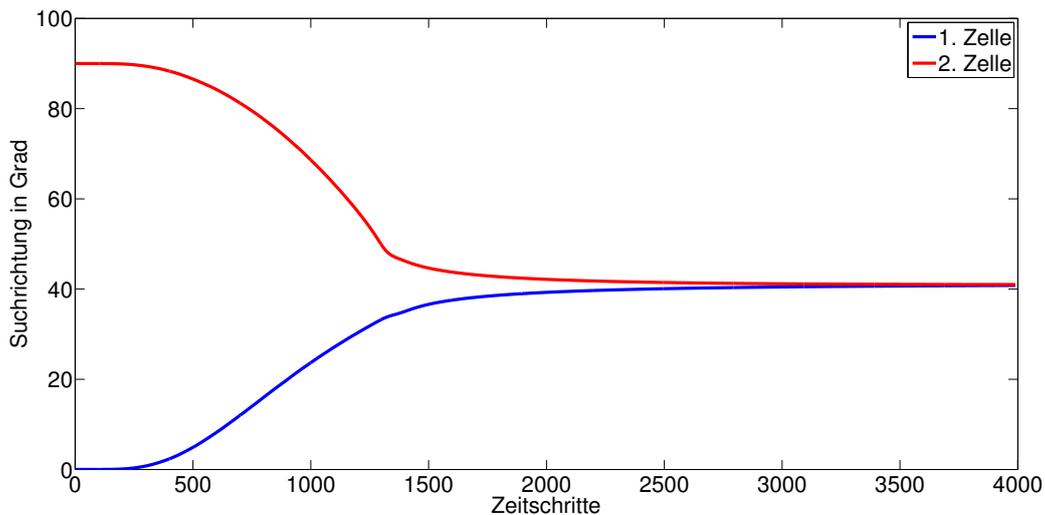


Abbildung 6.25: Darstellung des Verlaufs der Suchrichtung von zwei Zellen

Untersuchen wir die Verlagerung des Mittelpunkts anhand von Abbildung 6.26, so stellen wir fest, dass sich die Zellen fast auf direktem Wege suchen und sich am Ende perfekt überlagern. Dies ist zwar in der Realität nicht möglich, zeigt aber erneut die Richtigkeit unserer Lösung, da wir zu keinem Zeitpunkt so ein Verhalten ausschließen, und dies damit das einzig vernünftige Ergebnis ist.

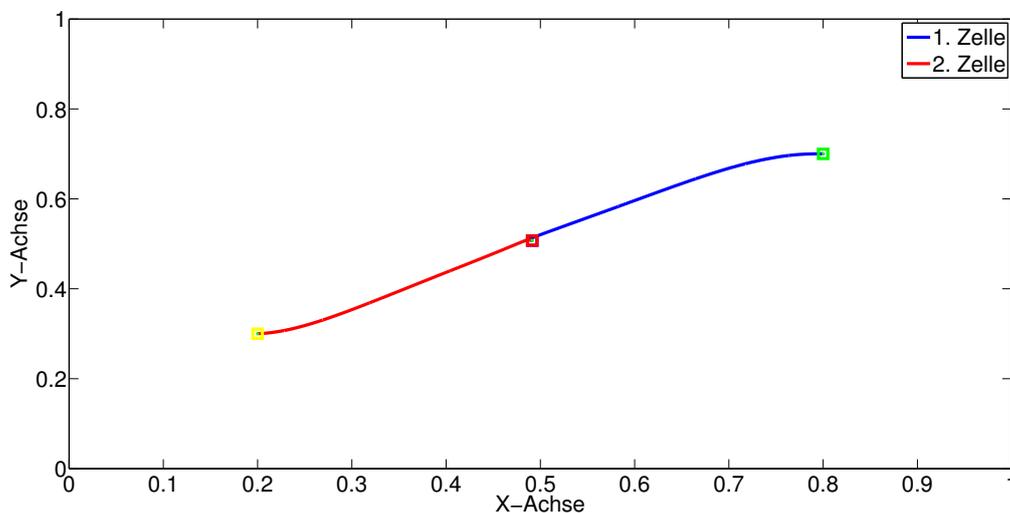


Abbildung 6.26: Darstellung des Verlaufs der Mittelpunkte von zwei Zellen

Dies war nun der letzte Testfall, den wir untersucht haben, und wir schließen diese Arbeit mit dem Kapitel „Diskussion und Fazit“ ab, in welchem wir zusammenfassen werden, was unser Programm leistet beziehungsweise nicht leistet und anschließend einen Ausblick geben, was noch ergänzt oder verbessert werden könnte.

## Kapitel 7

# Fazit und Diskussion

In diesem Kapitel werden wir die wichtigsten Resultate dieser Arbeit zusammenfassen und anschließend eine Bewertung unseres mathematischen Modells angeben.

Nachdem wir in Kapitel 2 auf die biologischen Hintergründe unserer Arbeit eingegangen sind, haben wir uns in Kapitel 3 mit der Entwicklung eines mathematischen Modells auseinandergesetzt. Wir werden nun die unterschiedlichen Modelle genau beleuchten und anhand unserer in Kapitel 6 durchgeführten Tests Vor- aber auch Nachteile aufzeigen.

Betrachten wir zuerst die Parametrisierung der Zelle. Hier hatten wir angenommen, dass unsere Zelle ellipsenförmig ist und auch während des kompletten Zeitintervalls bleibt. Dies ist natürlich eine sehr starke Vereinfachung, denn in der Realität werden wir dieses Verhalten nicht vorfinden. Hier wäre ein Modell, welches das Bilden von Pseudopodien berücksichtigt und einen flexiblen Rand ermöglicht, von Vorteil. Dies würde aber vermutlich deutlich komplexer sein und nur mit großem Aufwand implementiert werden können. Außerdem wäre der zusätzliche Erkenntnisgewinn durch ein solches Modell relativ gering, da wir uns primär mit der Fragestellung der Bewegung der Zelle auseinandergesetzt haben, und nicht wie sich die Membran mit der Zeit verändert. Es wäre sicherlich auch eine spannende Frage, wie man ein solches Modell entwickelt, war aber nicht Ziel dieser Arbeit.

Kommen wir nun zu der Beurteilung der Diffusionsgleichung. Hier haben wir gefordert, dass sich unser Lockstoff durch Diffusion verbreitet, ein kontinuierlicher Verfall stattfindet und dass unseren Zellen ermöglicht werden sollte, selber Lockstoff zu produzieren. Alle diese Punkte werden durch unsere modifizierte Diffusionsgleichung erfüllt und durch die in Kapitel 6 gemachten Tests belegt. Ein Punkt zur Verbesserung dieses Modells wäre eine Modifizierung der rechten Seite  $f$  der Diffusionsgleichung, welche für die Eigenproduktion zuständig ist. Wir haben hier die Dirac-Distribution durch die Gaußkurve diskretisiert, wodurch es auch zu einer Produktion von Lockstoff im Inneren der Zelle kommt, was nicht der Realität entspricht. Eine bessere Approximation könnte dies eventuell vermeiden.

Eventuell könnte für konkrete biologische Anwendungen an den Parametern für die Stärke des Zerfalls des Lockstoffs oder der Geschwindigkeit der Diffusion etwas geändert werden. In der Praxis spielen zudem andere stoffspezifische Parameter (Dichte, Viskosität, etc.) und äußere Einflüsse (Wärme, Druck, etc.) eine wichtige Rolle, um die Ausbreitung einer speziellen Substanz physikalisch richtig zu simulieren. Für unser vereinfachtes Modell ist dies jedoch nicht notwendig.

Betrachten wir nun unser System von gewöhnlichen Differentialgleichungen aus Kapitel 3.3. Wir haben

durch eine über den Rand definierte Energie Gleichungen hergeleitet, über welche wir die Bewegung der Zelle berechnen konnten. Nachdem wir dieses Modell in Kapitel 6 ausführlich getestet haben, können wir jetzt einige Vor- und Nachteile angeben.

Die Tests haben ergeben, dass sich das beobachtete Verhalten der Zelle mit der Intuition deckt. Wir hatten dort gezeigt, dass sich die Zelle immer in Richtung der höchsten Konzentration orientiert. Sei es durch Drehen ihrer Hauptachse, durch Verändern des Hauptachsenradius oder des Mittelpunkts. Interessant wäre dieses Resultat anhand von Experimenten mit echten Zellen (bswp. *Dictyostelium discoideum*) nachzuweisen. Dies würde jedoch den Rahmen einer Masterarbeit deutlich übersteigen. In Abschnitt 5.2 haben wir beschrieben, wie wir unser Programm aufbauen und sind am Ende des Abschnitts darauf eingegangen, dass wir der Zelle künstliche Grenzen setzen ( $R \in [R_{min}, R_{max}]$  etc.). Dies ist in dieser Form nicht optimal gelöst. Ein alternativer Zugang dazu wären entsprechende Penalisationen in der rechten Seite des ODE-Systems. So könnte für die Grenzen des Radius eine Penalisation der Krümmung eingeführt werden. Auch könnte der künstliche innere Rand des Gebiets durch einen Strafterm in den Gleichungen für die Mittelpunktkoordinaten ersetzt werden, der sich stärker auswirkt, umso näher die Zelle dem Rand kommt. Der Test zu dem Verhalten mehrerer Zellen hat außerdem gezeigt, dass sich die Zellen durch die Eigenproduktion des Lockstoffes gegenseitig anziehen und sich schließlich direkt überlagern. In der Realität würde der zuletzt genannte Effekt nicht eintreffen, womit ein weiterer Penalisierungsansatz von Nöten wäre. Hier könnte über den Mittelpunkt und die Suchrichtung der Zellen ein Strafterm definiert werden, welcher dies verhindert.

Betrachten wir genauer die rechte Seite in dem ODE-System, so stellen wir fest, dass wir hier auf den Gradienten der Lockstoffkonzentration zugreifen. Eine Zelle ist zwar in der Lage die aktuelle Konzentration wahrzunehmen und zu entscheiden, wo die höhere Konzentration vorliegt, einen Konzentrationsgradienten kann sie aber nicht „errechnen“. Dieser Punkt macht noch einmal deutlich, dass es sich um ein stark vereinfachtes Modell handelt und noch weit entfernt ist von einer exakten Simulation der Realität. In Kapitel 4 haben wir die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen für das entkoppelte System von Diffusionsgleichung und ODE-System hergeleitet. Offen bleibt die theoretische Untersuchung zur Existenz einer Lösung des gekoppelten Systems. Dies könnte über eine Formulierung als Fixpunktproblem und Anwendung des Fixpunktsatzes von Banach gelöst werden.

Abschließend können wir sagen, dass wir zwar in diesem Kapitel etliche Verbesserungsmöglichkeiten aufgezeigt haben, aber trotzdem eine vernünftige Simulation erarbeitet haben, um einen sehr komplexen biologischen Sachzusammenhang mathematisch zu beschreiben und numerisch umzusetzen.

# Literaturverzeichnis

[Evans] Lawrence C. Evans, *Partial differential equations*, American Math. Soc, Providence, 2010

[Amann] Herbert Amann, *Gewöhnliche Differentialgleichungen*, De Gruyter, Berlin, 1995

[Harrach] Bastian von Harrach, *Numerische Mathematik 2*, <http://www.mathematik.uni-stuttgart.de/~harrach/lehre/Numerik2.pdf>

[Braack] Malte Braack, *Finite Elemente*, <http://www.informatik.uni-kiel.de/~mabr/lehre/skripte/fem-braack.pdf>

[RUB] Ruhr Universität Bochum, Lehrstuhl für Genetik, *Unterschiede zwischen Prokaryoten und Eukaryoten*, <http://www.ruhr-uni-bochum.de/genetik/Unterlagen/Eu+Prokaryoten.pdf>

[Levine] Herbert Levine und Wouter-Jan Rappel, *The physics of eukaryotic chemotaxis*, Physica Today, Februar 2013

[Xue] Chuan Xue, Hans G. Othmer und Radek Erban, *From Individual to Collective Behavior of Unicellular Organisms: Recent Results and Open Problems*, Proceedings of 2nd Okinawa Conference on Mathematics and Biology

[Wiki] <http://de.wikipedia.org/wiki/Myosin>

## Eidesstattliche Versicherung

---

Name, Vorname

---

Matr.-Nr.

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit/Masterarbeit\* mit dem Titel

---

---

---

selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift

\*Nichtzutreffendes bitte streichen

### **Belehrung:**

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50.000,00 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden. (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz - HG - )

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird gfls. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z.B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

---

Ort, Datum

---

Unterschrift