

Numerik von Differentialgleichungen - Blatt 4, für den 18. 4. 2018

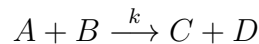
- Finden Sie alle dreistufige, explizite und autonomisierbare Runge-Kutta Verfahren mit Konsistenzordnung 3. Geben Sie c_2 und c_3 vor, und bestimmen Sie A und b . Wählen Sie konkret $c_2 = 1/3$ und $c_3 = 2/3$ (das ist das Verfahren von Heun).
- Bestimmen Sie das zweistufige implizite und autonomisierbare RK - Verfahren optimaler Ordnung, wobei die Nebenbedingung $c_2 = 1$ vorgegeben ist. Wiederholen Sie Ü 14 mit diesem Verfahren.
- Implementieren Sie adaptive Schrittweitensteuerung (nach dem Flussdiagramm aus Dahmen-Reusken, siehe Anlage). Verwenden Sie zur Fehlerschätzung zwei Einzschrittverfahren unterschiedlicher Ordnung. Erweitern Sie die SSM - Klasse wie folgt:

```
virtual bool Step (double t, double h, const ODE_Function & func,
                  const Vector<> & yold, Vector<> & ynew) const = 0;
virtual int Order () { return "Konsistenzordnung"; }
```

Der Rückgabewert sei 'true' falls der Schritt erfolgreich war, und 'false' sonst (z.B. Newton konvergiert nicht). Im 'false' - Fall wird die Schrittweite ebenfalls reduziert.

Testen Sie das Verfahren mit dem Beispiel aus Ü 14. Plotten Sie $h(t)$. Vergleichen Sie den Fehler bei $T = 10$ mit der Vorgabe $\varepsilon = 10^{-2}, \dots, \varepsilon = 10^{-6}$.

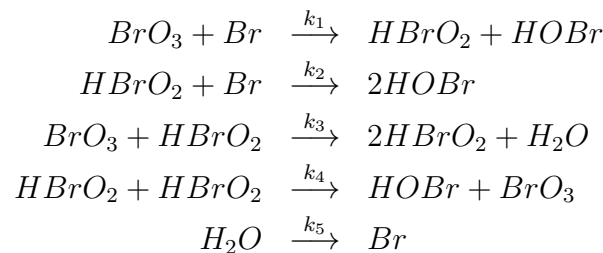
- Chemische Reaktionsgleichungen: Moleküle vom Typ A und Typ B können miteinander reagieren und Moleküle vom Typ C und D bilden.



Die Wahrscheinlichkeit dieser Reaktion ist $k c_A c_B$, wobei k die Reaktionskonstante, und c_A und c_B die Volumsdichten der entsprechenden Substanzen sind. Dies führt zu der Differentialgleichung

$$\begin{aligned}c'_A &= -k c_A c_B \\c'_B &= -k c_A c_B \\c'_C &= k c_A c_B \\c'_D &= k c_A c_B.\end{aligned}$$

Ein interessantes Beispiel ist die Zhabotinski-Belousov-Reaktion (der sogenannte Oregonator) in vereinfachter Form (insbesondere Reaktion 5) ist



Die Konzentrationen $(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$ geben die Dichten der Substanzen (BrO_3 , Br , $HBrO_2$, $HOBr$, H_2O) an, Wasserstoff H ist beliebig viel vorhanden. Daraus ergibt sich die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}c_1' &= -k_1 c_1 c_2 - k_3 c_1 c_3 + k_4 c_3^2 \\c_2' &= -k_1 c_1 c_2 - k_2 c_2 c_3 + k_5 c_5 \\c_3' &= k_1 c_1 c_2 - k_2 c_2 c_3 + k_3 c_1 c_3 - 2k_4 c_3^2 \\c_4' &= k_1 c_1 c_2 + k_2 c_2 c_3 + k_4 c_3^2 \\c_5' &= k_3 c_1 c_3 - k_5 c_5\end{aligned}$$

Die Reaktionskonstanten sind

$$k_1 = 1.34, \quad k_2 = 1.6 \cdot 10^9, \quad k_3 = 8.0 \cdot 10^3, \quad k_4 = 4.0 \cdot 10^7, \quad k_5 = 1.0,$$

Anfangswerte sind

$$c_1(0) = 0.05, \quad c_2(0) = 1 \cdot 10^{-4}, \quad c_3(0) = 1 \cdot 10^{-10}, \quad c_4(0) = 0.1, \quad c_5(0) = 1 \cdot 10^{-4}.$$

Lösen Sie die Gleichungen mit automatischer Schrittweitensteuerung und Verfahren Ihrer Wahl. Plotten Sie die zeitlichen Verläufe der Konzentrationsdichten auf $[0, T = 200]$. Wählen Sie sinnvoll lineare oder logarithmische Maßstäbe.