

## Numerik von Differentialgleichungen - Blatt 4, für den 18. 4. 2012

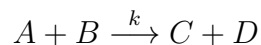
15. Finden Sie alle dreistufige, explizite und autonomisierbare Runge-Kutta Verfahren mit Konsistenzordnung 3. Geben Sie  $c_2$  und  $c_3$  vor, und bestimmen Sie  $A$  und  $b$ . Wählen Sie konkret  $c_2 = 1/3$  und  $c_3 = 2/3$  (das ist das Verfahren von Heun).
16. Bestimmen Sie das zweistufige implizite und autonomisierbare RK - Verfahren optimaler Ordnung, wobei die Nebenbedingung  $c_2 = 1$  vorgegeben ist. Wiederholen Sie Ü 14 mit diesem Verfahren.
17. Wie viele Bedingungen sind für Konsistenzordnung 5 sind zusätzlich nötig? Geben Sie die entsprechenden elementaren Differentiale an.
18. 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  $\varepsilon = 10^{-2}, \dots, \varepsilon = 10^{-6}$ .

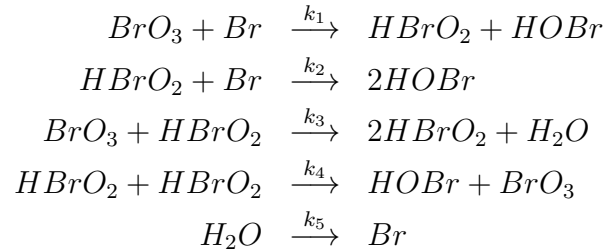
19. Chemische Reaktionsgleichungen: Moleküle vom Typ A und Typ B können miteinander reagieren und Moleküle vom Typ C und D bilden.



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.