Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Abteilung für Angewandte Mathematik
Prof. Dr. Patrick Dondl
M.Sc. Eng. Aristide C. Hounkpe

Wintersemester 2020

Praktische Übung zu Numerik für Differentialgleichungen:Blatt 2

Abgabe: 15 Juni

Runge–Kutta

Aufgabe 1 (8 Punkte)**.** (i) Die Geschwindigkeit der chemischen Reaktion zweier Stoffe A und B mit Produkt $2B$ wird nach einem Massenwirkungsprinzip durch einen Reaktionskoeffizienten α und die Differentialgleichungen

$$C_A' = -\alpha C_A C_B,\ C_B' = \alpha C_A C_B$$

beschrieben, wobei $C_A, C_B : [0,T] \mapsto [0,1]$ die jeweiligen Konzentrationen angeben. In der Reaktions gleichung wird dies durch die Notation $A + B \overset{\alpha}{\to} 2B$ berücksichtigt. Zeigen Sie, dass die Summe der Konzentrationen C_A, C_B konstant ist.

(ii) Wir betrachten das Reaktionsschema

$$A \overset{\alpha}{\to} B,\ 2B \overset{\beta}{\to} B + C,\ B + C \overset{\gamma}{\to} A + C$$

mit den Reaktionskoeffizienten $\alpha = 0.04, \beta = 3 \times 10^7, \gamma = 10^4$, das heißt beispielsweise, dass der Stoff B sehr schnell in den Stoff C umgewandelt wird. Formulieren Sie ein System von Differentialgleichungen zur Beschreibung des Reaktionsschemas, zeigen Sie, dass die Summe der Konzentrationen konstant ist und bestimmen Sie numerisch das Maximum der Konzentration des Stoffs B, wenn zu Beginn des Vorgangs nur der Stoff A vorliegt.

(iii) Testen Sie verschiedene Matlab-Routinen zur numerischen Lösung des Problems im Zeitintervall $[0, 1/2]$ und kommentieren Sie die Ergebnisse.

Aufgabe 2 (8 Punkte)**.** Das Matlab-Programm *rungekuttaexpl.m* realisiert ein explizites Runge–Kutta-Verfahren zur Lösung einer skalaren Differentialgleichung $y' = f(t, y),\ y(0) = y_0$.

(i) Dokumentieren Sie jede Zeile des Programms.

(ii) Überprüfen Sie, dass die exakte Lösung für den Fall $f(t, y) = -2y + 5\cos(t)$ und $y_0 = 2$ gegeben ist durch $y(t) = 2\cos(t) + \sin(t)$. Bestimmen Sie für die Schrittweiten $\tau = 2^{-s}, s = 0, 1, ...5$ den Approximationsfehler $|y(T) - y_K|$ mit $T = t_K = 10$.

(iii) Modifizieren Sie das Programm, um das explizite Euler-Verfahren, das Euler–Collatz-Verfahren,das klassische Runge–Kutta-Verfahren und die 3/8-Regel zu realisieren.

(iv) Bestimmen Sie für alle Verfahren die Approximationsfehler $|y(T) - y_K|$ zum Zeitpunkt $T = 10$ mit den Schrittweiten $\tau = 2^{-s}, s = 0, 1, ..., 5$. Stellen Sie diese vergleichend als Polygonzüge in einer Grafik mit logarithmischen Achsenskalierungen dar, was in Matlab mit dem Kommando *loglog* realisiert werden kann.