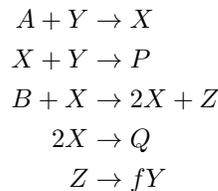


Programmierübung Nr. 6 zur Vorlesung Numerik I, Sommer 2013

Belousov-Zhabotinsky-Reaktion (Steifes AWP) Bei der Belousov-Zhabotinsky-Reaktion handelt es sich um einen chemischen Oszillator. Dabei wechselt eine chemische Lösung in gewissen Zeitabständen die Farbe. Die zugrunde liegenden Reaktionen sind in abstrakter Form gegeben durch



wobei lediglich die chemischen Stoffe $X = HBrO_2$, $Y = Br^-$ und $Z = Ce(IV)$ mit der Zeit umgesetzt werden, während die Stoffe $A = B = BrO_3^-$ der Reaktion zeitlich konstant immer zur Verfügung gestellt werden. Die nicht näher spezifizierten Reaktionsprodukte P und Q werden immer abgeführt und sind deshalb für die Reaktion ebenfalls irrelevant.

Mit diesen Annahmen wird die Reaktionskinematik durch das folgende nichtlineare System beschrieben

$$\begin{aligned}u_1' &= p(u_2 + u_1(1 - qu_1 - u_2)), \\u_2' &= \frac{1}{p}(u_3 - (1 + u_1)u_2), \\u_3' &= r(u_1 - u_3).\end{aligned}\tag{6.1}$$

Hierbei korrespondiert X zu u_1 , Y zu u_2 und Z zu u_3 . Außerdem liegen die Gleichungen in entdimensionalisierter Form vor und für die drei Parameter gilt

$$p = 77.27, \quad q = 8.375e - 6, \quad r = 0.161.$$

Für die Details zur Aufstellung dieses Modells verweisen wir auf den Artikel von Field und Noyes:

[1] Richard J. Field, Richard M. Noyes (1974): *Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction*. J. Chem. Phys. 60, S. 1877-1884, doi:10.1063/1.1681288

Aufgaben:

- (a) Lösen Sie (6.1) auf dem Intervall $I = [0, 10]$ für den Startwert $u(0) = (3, 1, 2)^T$ mit dem Dormand und Prince Verfahren (DOPRI), wobei die Schrittweitensteuerung aus Aufgabe 5 verwendet werden soll ($Tol = 10^{-6}$). Bestimmen Sie dabei die Anzahl der benötigten Schritte.
- (b) Während Ihre Rechnung zum Aufgabenteil a) läuft, implementieren Sie das θ -Verfahren für das nichtlineare System $\mathbf{u}'(t) = f(t, \mathbf{u}(t))$ in (6.1):

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{u}_{k-1} + h_k (\theta f(t_k, \mathbf{u}_k) + (1 - \theta)f(t_{k-1}, \mathbf{u}_{k-1})), \quad \text{mit } \theta \in [0, 1]$$

Hinweis: Beachten Sie, dass das Verfahren im Fall $\theta > 0$ implizit ist. Nutzen Sie deshalb in jedem Zeitschritt ein (gedämpftes) Newton-Verfahren zur Berechnung von \mathbf{u} . Brechen Sie dabei die Newton-Iteration ab, sobald Ihr Newton-Residuum den Wert 10^{-10} unterschreitet.

- (c) Vergleichen Sie DOPRI und das θ -Verfahren für $\theta = 0$, $\theta = 0.5$ und $\theta = 1$ bezüglich ihres Konvergenzverhalten im Endzeitpunkt $\mathbf{u}(10)$ (Liegt Konvergenz vor? Wenn ja von welcher Ordnung?). Stellen Sie fest wieviele Funktionsauswertungen Sie für die einzelnen Methoden benötigen.

Hinweis: Der ungefähre Wert: $\mathbf{u}(10) \approx (1.0006698e0, 1.4939237e3, 1.0686975e4)$.

- (d) Rechnen Sie mit der Ihnen am besten erscheinenden Methode zu einer angemessenen Schrittweite die Lösung auf dem Zeitintervall $I=[0,360]$ aus. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit der Lösung bei Verwendung des Octave internen Befehl `lsode` (In Matlab: `ode15s`).