P I 16.10. 2002 (Zeit : $10^{\underline{15}}$ – $11^{\underline{00}}$ Uhr; Raum : T 711)

1 Numerische Behandlung von AWA für gewöhnliche Dgl.

1.1 Einschrittverfahren

Ü01 Der Oregonator wird durch das Reaktionsschema

$$\begin{array}{rcl} BrO_3^- + Br^- & \xrightarrow{k_1} & HBrO_2 \\ HBrO_2 + Br^- & \xrightarrow{k_2} & P \\ BrO_3^- + HBrO_2 & \xrightarrow{k_3} & 2HBrO_2 + Ce(IV) \\ 2HBrO_2 & \xrightarrow{k_4} & P \\ Ce(IV) & \xrightarrow{k_5} & Br^- \end{array}$$

mit gegebenen Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten $k_1,\ k_2,\ k_3,\ k_4,\ k_5$ beschrieben. Stellen Sie das Differentialgleichungssystem für die gesuchten Konzentrationen

$$\begin{array}{rcl} c_1(t) & = & c_{\mathrm{BrO_3^-}}(t) \\ c_2(t) & = & c_{\mathrm{Br^-}}(t) \\ c_3(t) & = & c_{\mathrm{HBrO_2}}(t) \\ c_4(t) & = & c_{\mathrm{P}}(t) \\ c_5(t) & = & c_{\mathrm{Ce(IV)}}(t) \end{array}$$

auf, und stellen Sie sinnvolle Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = t_0 = 0$!

○ Bemerkung :
Im Praktikum **P III** (30.10.2002) werden wir das abgeleitete Dgl.-System numerisch integrieren und damit den Oregonator numerisch simulieren.

Ü02 Die Robertson–Reaktion wird durch das Reaktionsschema

$$\begin{array}{rclll} A & \xrightarrow{0.04} & B & & \text{(langsame Reaktion)} \\ B + B & \xrightarrow{3.10^7} & C + B & & \text{(sehr schnell)} \\ B + C & \xrightarrow{10^4} & A + C & & \text{(schnell)} \end{array}$$

beschrieben. Stellen Sie das Dgl.-System zur Bestimmung der Konzentrationen $c_A(t)$, $c_B(t)$, $c_C(t)$ auf, und schreiben Sie geeignete Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = t_0 = 0$ vor!

○ <u>Bemerkung :</u>

Im Praktikum $\boxed{\text{P III}}$ (30.10.2002) werden wir das abgeleitete Dgl.-System numerisch integrieren und damit die Robertson–Reaktion numerisch simulieren.

$\boxed{\text{Ü 03}}$ Man beweise die folgende Konvergenzaussage zum Eulerschen Polygonzugverfahren (EPZV) auf äquidistantem Gitter (Satz 3.4 aus der Vorlesung):

<u>Vor.:</u>

$$\begin{array}{llll}
1.) & u(t): & u'(t) & = f(t,u(t)),\ t \in I = [0,\ T] \\
 & & u(0) & = g_0 \\
2.) & u_h: & I_h & = \{t_j = jh\ :\ j = 1, \dots m\} \rightarrow \mathbb{R}^N : \\
 & & u_{j+1} & = u_j + h\, f(t_j, u_j),\ j = 0,\ 1, \dots, m-1 \\
 & & u_h(0) & = u_0 = g_0 + \delta \\
 & & u_h(t_j) & = u_j,\ h = T/m.
\end{array}$$

3.) $f : D \rightarrow \mathbb{R}^N$, wobei $D = I \times \mathbb{R}^N = \{(t, v)\ :\ t \in I = [0,\ T],\ |\ v - u_0\ | < \infty = b\}$

4.) $|\ f(t,v) - f(t,\bar{v})\ | \leq L\ |\ v - \bar{v}\ |\ \ \forall\ (t,v),\ (t,\bar{v}) \in D.$

<u>Bh.:</u>

Dann gilt die Fehlerabschätzung

$$|\ u(t_j) - u_h(t_j)\ | \leq\ e^{Lt_j} \left[|\ \delta\ | + \frac{\tau}{L} \right],$$

mit $\tau = \max_{j=1,\dots,m} |\ \tau_j\ |$ und den lokalen Abschneidefehlern (siehe Vorlesung)

$$\tau_j \equiv \tau_h(t_j) = \frac{1}{h} \left[\frac{u(t_j) - u(t_{j-1})}{h} - f\left((t_{j-1}, u(t_{j-1})\right) \right]$$

○ <u>Hinweis :</u>

a.) Schreiben Sie unter Benutzung der Darstellung (*)

$$u(t_{j+1}) = u(t_j) + hf(t_j, u(t_j)) + h \underbrace{\left[\frac{u(t_{j+1}) - u(t_j)}{h} - f\left((t_j, u(t_j)\right) \right]}_{=:\tau_h(t_{j+1}) = \tau_{j+1}}$$

und des EPZV (**)

$$u_{j+1} = u_j + h\ f(t_j,\ u_j)$$

eine Rekursionsbeziehung ((*) - (**)!) für den Fehler

$$e_{j+1} = u(t_{j+1}) - u_h(t_{j+1}) = u(t_{j+1}) - u_{j+1}$$

auf, und schätzen Sie diese ab.

b.) Verwenden Sie dabei die elementare Beziehung

$$(1 + hL)^{j+1}\ \leq\ e^{(j+1)hL}\ =\ e^{Lt_{j+1}}\ \leq\ e^{LT}$$

c.) Interpretieren Sie die zu beweisende Behauptung !