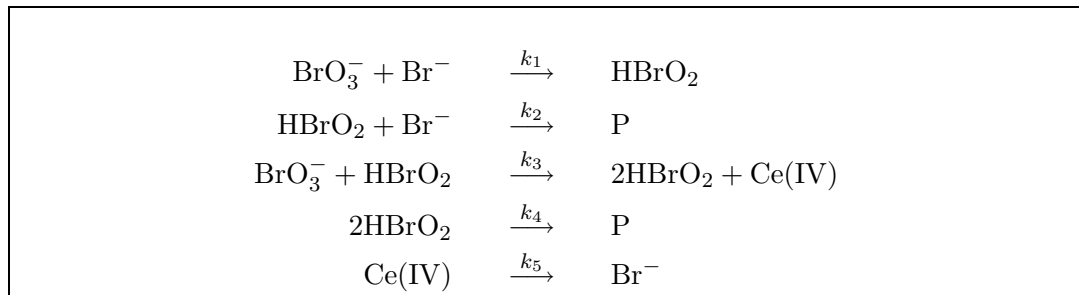


P I 16.10. 2002 (Zeit : 10¹⁵ – 11⁰⁰ Uhr; Raum : T 711)

1 Numerische Behandlung von AWA für gewöhnliche Dgl.

1.1 Einschrittverfahren

Ü01 Der Oregonator wird durch das Reaktionsschema



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

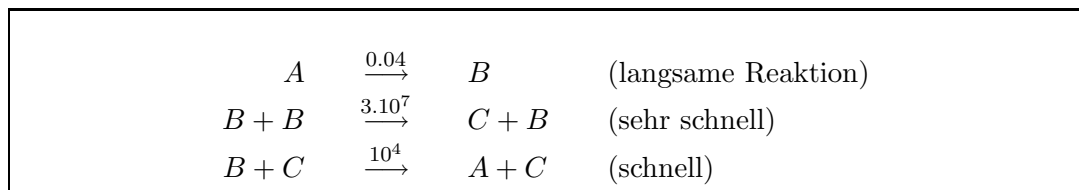
$$\begin{aligned}
 c_1(t) &= c_{\text{BrO}_3^-}(t) \\
 c_2(t) &= c_{\text{Br}^-}(t) \\
 c_3(t) &= c_{\text{HBrO}_2}(t) \\
 c_4(t) &= c_{\text{P}}(t) \\
 c_5(t) &= c_{\text{Ce(IV)}}(t)
 \end{aligned}$$

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



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!

○ Bemerkung :

Im Praktikum **P III** (30.10.2002) werden wir das abgeleitete Dgl.-System numerisch integrieren und damit die Robertson-Reaktion numerisch simulieren.

Ü 03 Man beweise die folgende Konvergenzaussage zum Eulerschen Polygonzugverfahren (EPZV) auf äquidistantem Gitter (Satz 3.4 aus der Vorlesung):

Vor.:

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

Bh.:
 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)

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

○ Hinweis :

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

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

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 !