

Лабораторная работа №1

ОДУ

Колобаев Дмитрий
Группа Б01-903

Задание X.9.9:

Модель химической реакции из, получившая свое название Е5 в более ранних публикациях:

$$\begin{aligned}\dot{y}_1 &= -Ay_1 - By_1y_3, \\ \dot{y}_2 &= Ay_1 - MCy_2y_3, \\ \dot{y}_3 &= Ay_1 - By_1y_3 - MCy_2y_3 + Cy_4, \\ \dot{y}_4 &= By_1y_3 - Cy_4\end{aligned}$$

Начальные условия: $y_1(0) = 1,76 \cdot 10^{-3}$, все остальные переменные равны 0. Значения коэффициентов модели следующие: $A = 7,89 \cdot 10^{-10}$, $B = 1,1 \cdot 10^7$, $C = 1,13 \cdot 10^3$, $M = 10^6$. Первоначально задача ставилась на отрезке $T_k = 1000$, но впоследствии было обнаружено, что она обладает нетривиальными свойствами вплоть до времени $T_k = 10^{13}$.

Метод решения

Воспользуемся одноитерационным методом Розенброка третьего порядка точности. Он имеет следующий вид (Петров, Лобанов "Лекции по вычислительной математике").

$$(\mathbf{E} - a\tau\mathbf{J} - b\tau^2\mathbf{J}^2)\frac{\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n}{\tau} = f[\mathbf{u}_n + c\tau\mathbf{f}(\mathbf{u}_n)] \quad (1)$$

Здесь $J = \frac{\partial f}{\partial u}(u_n)$ - матрица якоби. Параметры подобраны так, чтобы обеспечить 3 порядок точности:

$$a = 1,077; b = -0,372; c = -0,577$$

Выражая y_{n+1} из формулы 1 получаем значение на следующей стадии.

Результаты

Результаты вычислений представлены на рисунках ниже. Стоит отметить, что концентрации всех реагентов остаются маленькими. Однако если 2, 3 и 4 растут, то концентрация реагента 1 очень медленно уменьшается со временем.

Программная реализация

Имплементацию использованного метода Розенброка можно найти в файлах `Rosenbrok.cpp` и `Rosenbrok.hpp`





