Московский физико-технический институт
(государственный университет)

Курсовая работа по вычислительной математике

Изучение поведения концентраций веществ в реакции Белоусова-Жаботинского.

Пузанков Артем
Группа Б01-003

Долгопрудный
8.05.2023

Содержание

1 Введение

Большинство химических превращений протекает через огромное количество элементарных стадий с большим числом различных веществ, которые могут включать атомы и радикалы. При этом их концентрации могут описываться сложными кривыми в зависимости от времени. Также немалое влияние могут оказывать вещества малых концентраций, а большое количество перекрестных взаимодействий между веществами усложняет исследование реакции.

Колебательными называются реакции, в которых происходит периодическое изменений концентраций веществ, участвующих в самой реакции.

Реакция Белоусова–Жаботинского, открытая в 1951 году, является выдающимся примером колебательной, самоорганизующейся химической системы, широко изучаемой в различных научных дисциплинах. При этом такая система может проявлять несколько динамических режимов: периодические, апериодические и хаотические колебания.

Механизм реакции Белоусова-Жаботинского насчитывает более 80 стадий. Для исследования колебаний аналитически необходимо сведение полной модели к более простой. Ученые Р. Филд, Е. Кёрёш и Р. Нойес предложили абстрактную и простую модель реакции Белоусова-Жаботинского под названием "Орегонатор" которую впоследствии расширили до шести стадий:

$$
\begin{aligned}
A + X &\iff X + P \\
X + Y &\iff 2P \\
A + X &\iff 2X + 2Z \\
2X &\iff A + P \\
B + Z &\iff \frac{1}{2} fY
\end{aligned}
$$

На основе этого можно построить систему ОДУ

$$
\begin{cases}
\frac{dx}{dt} = k_1 ay - k_2 xy + k_3 ax - 2k_4 x^2 \\
\frac{dy}{dt} = -k_1 ay - k_2 xy + k_5 z + \frac{f}{2} k_5 bz \\
\frac{dz}{dt} = 2k_3 ax - k_5 bz
\end{cases}
$$

где k_i, a, b, f - константы, а x, y, z - концентрации веществ, которые существенно изменяются в реакции.

2 Постановка задачи

Задачу Коши для системы ОДУ реакции Белоусова-Жаботинского запишем в виде

$$
\begin{cases}
\frac{dy_1}{dt} = 77.27(y_2 + y_1 - y_1 y_2 - q y_1^2) \\
\frac{dy_2}{dt} = \frac{1}{77.27}(y_3 - y_2 - y_1 y_2) \\
\frac{dy_3}{dt} = 0.16(y_1 - y_3)
\end{cases}
$$

$$0 \le t \le 400,\ y_1(0) = 1,\ y_2(0) = 2,\ y_3(0) = 3,$$

где y_1, y_2, y_3 - концентрации веществ, а q - параметр, который влияет на колебательные свойства решения системы.

Требуется численными методами, а именно использовать явный и неявный методы Рунге-Кутты 4 порядка, найти решение системы, т.е. найти зависимости концентраций веществ y_1, y_2, y_3 от времени, а также исследовать сходимость численного решения по сетке.

3 Численный алгоритм

Рассмотрим систему ОДУ

$$\frac{d\bar{y}}{dt} = \bar{f}(t, \bar{x}),\ t > 0,\ \bar{x}(0) = \bar{a}$$

в 3-мерном евклидовом пространстве.

Введем на отрезке $[0,\ T]$ расчетную сетку

$$\omega_n = \{t_n = nh;\ n = 0, \ldots, N\}$$

и сеточную функцию u_n, значения которой определены в узлах сетки ω_n:

$$u_n = u(t_n)$$

Класс методов Рунге-Кутты записывается в общем параметричеком виде:

$$x(t_n + h) = x(t_n) + \Delta_n x = x(t_n) + h\sum_{i=1}^{r} b_i k_i + O(h^{r+1}),$$

где r - число стадий, коэффициенты k_i для явных методов вычисляются по формулам:

$k_1 = f(t_n, x_n),$
$k_2 = f(t_n + c_2 h, x_n + h a_{21} k_1),$
$k_3 = f(t_n + c_3 h, x_n + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)),$
$\ldots$
$k_3 = f(t_n + c_r h, x_n + h(a_{r1} k_1 + a_{r2} k_2 + \ldots + a_{r,r-1} k_{r-1})),$
здесь $a_{ij},\ b_i,\ c_i$ - определяющие конкретный метод Рунге-Кутты коэффициенты, которые обычно представляют в виде таблицы Бутчера:

$$\begin{array}{c|ccccc}
0 & & & & & \\
c_2 & a_{21} & & & & \\
c_3 & a_{31} & a_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & & & & \\
c_r & a_{r1} & a_{r2} & \ldots & a_{r,r-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \ldots & b_{r-1} & b_r
\end{array}$$

Для неявных метов Рунге-Кутты таблица Бутчера оказывается полностью заполненной:

$$\begin{array}{c|cccc}
c_1 & a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1r} \\
c_2 & a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2r} \\
\vdots & \vdots & & & \\
c_r & a_{r1} & a_{r2} & \ldots & a_{r,r} \\
\hline
 & b_1 & b_2 & \ldots & b_r
\end{array}$$

Неявные методы отличаются тем, что на каждом шаге необходимо решать систему нелинейных уравнений для нахождения коэффициентов k_i, а также они обладают большей устойчивостью в жестких системах ОДУ.

В нашей задаче будем использовать следующую таблицу Бутчера для явного метода Рунге-Кутты 4 порядка точности:

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & & & \\
1/2 & 1/2 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6
\end{array}$$

Для неявного метода Рунге-Кутты 4 порядка (метод Гаусса-Лежандра) таблица Бутчера будет иметь следующий вид:

$$\begin{array}{c|cc}
1/2 - \sqrt{3}/6 & 1/4 & 1/4 - \sqrt{3}/6 \\
1/2 + \sqrt{3}/6 & 1/4 + \sqrt{3}/6 & 1/4 \\
\hline
 & 1/2 & 1/2
\end{array}$$

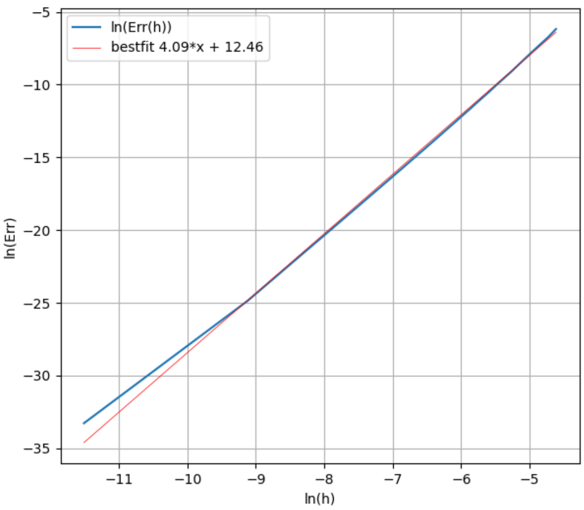
На каждом шаге будем использовать метод Ньютона для решения системы нелинейных уравнений и нахождения k_i.

4 Тестирование сходимости

Решение u_h разностной задачи
$$P_h u_h = f_h$$
сходится к решению U дифференциальной задачи
$$PU = f,$$
если выполняется условие
$$\|u_h - U\| \xrightarrow[h \to 0]{} 0.$$
Если, кроме этого, имеет равенство
$$\|u_h - U\| \leq Ch^p,$$
где $p > 0,\ C \neq C(h),\ C > 0$, то говорят о сходимости p-го порядка.

Пусть точное решение нашей задачи Y, а y_h и y_{2h} вычисленные решения с шагом h и 2h соответсвенно, спроецируем Y на сетки наших решений и получим Y_h и Y_{2h} тогда выполнено
$$y_h(t_i) - Y_h(t_i) = Ch^p + O(h^{p+1})$$
$$y_{2h}(t_i) - Y_{2h}(t_i) = C(2h)^p + O(h^{p+1})$$
и тогда найдем разность
$$y_h(t_i) - y_{2h}(t_i) = C_1 h^p + O(h^{p+1})$$
таким образом будем исследовать сходимость.

Изобразим график зависимости ошибки от величины шага в логарифмическом масштабе, чтобы сравнить с линейной зависимостью:



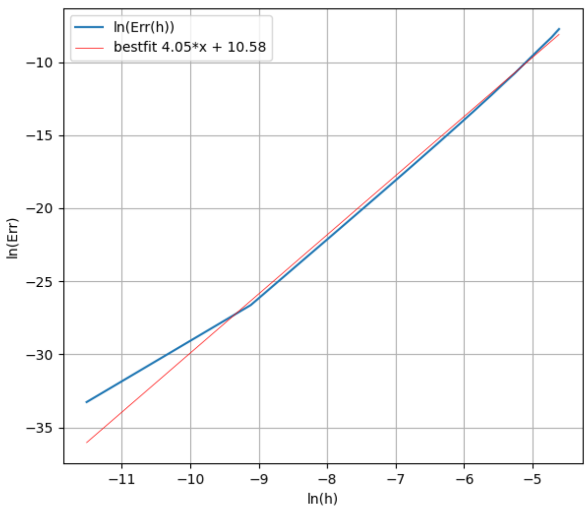


Рис. 1: График зависимости $ln(Err)$ от $ln(h)$ с прямой аппроксимации. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

Видно, что наши численные методы имеют порядок 4, как явный, так и неявный.

5 Результаты

Приведем ниже результаты решения задачи Коши для системы ОДУ реакции Белоусова-Жаботинского явным и неявным методами Рунге-Кутты 4 порядка точности с разным параметром q. Использовался шаг 0.001, для него погрешность составляет не более 10^{-15}.

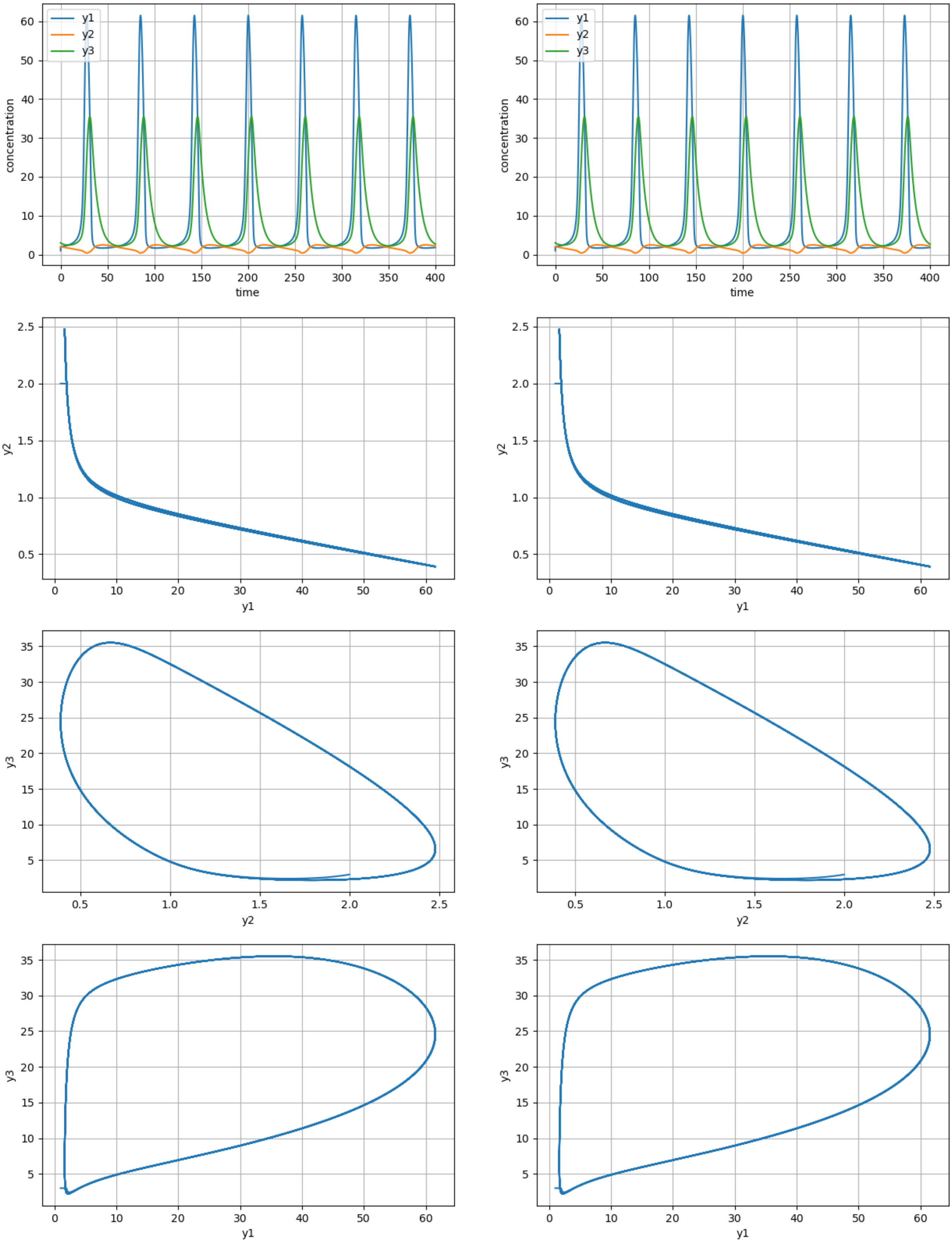


Рис. 2: Графики зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, $q = 0.01$. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

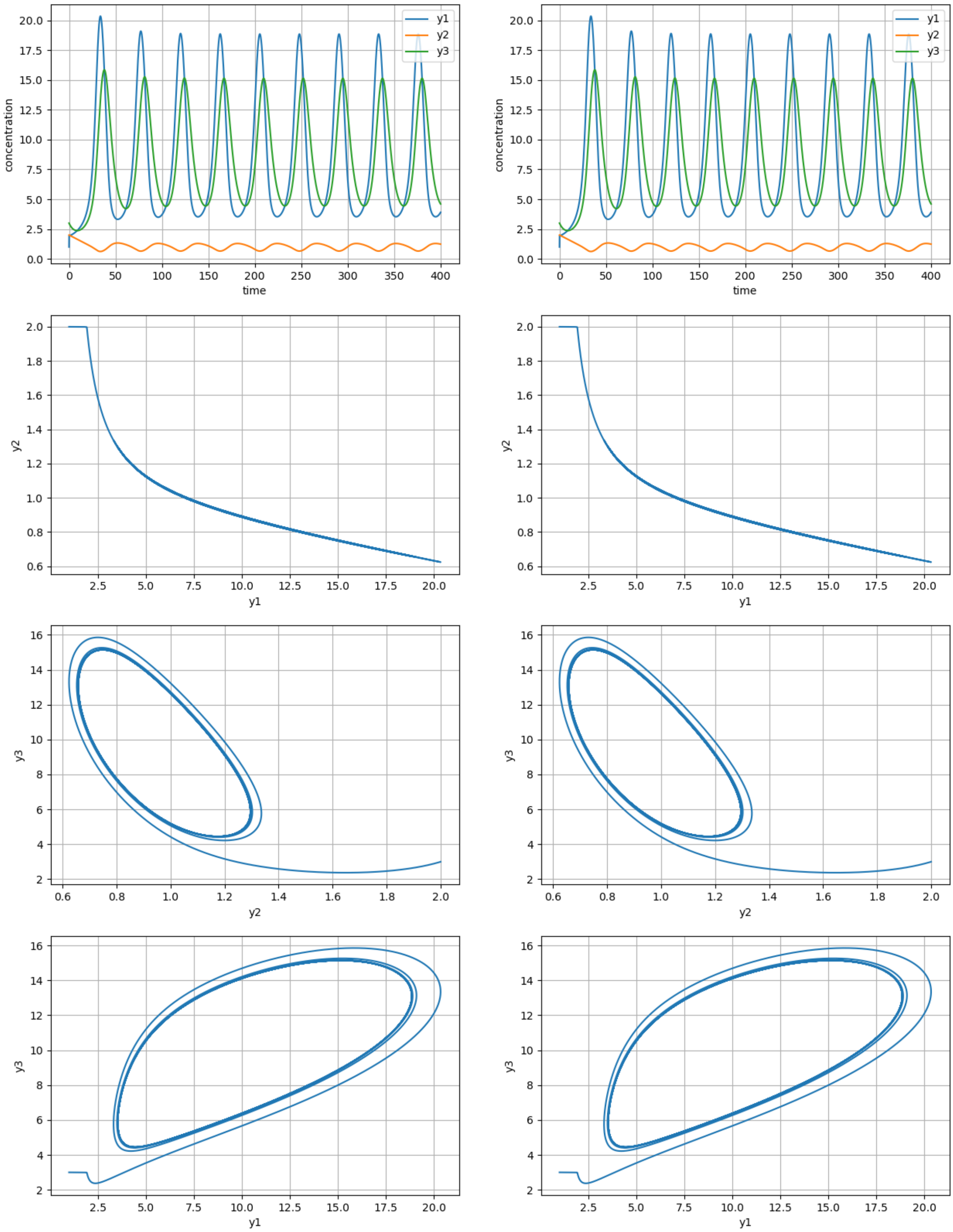


Рис. 3: Графики зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, $q = 0.02$. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

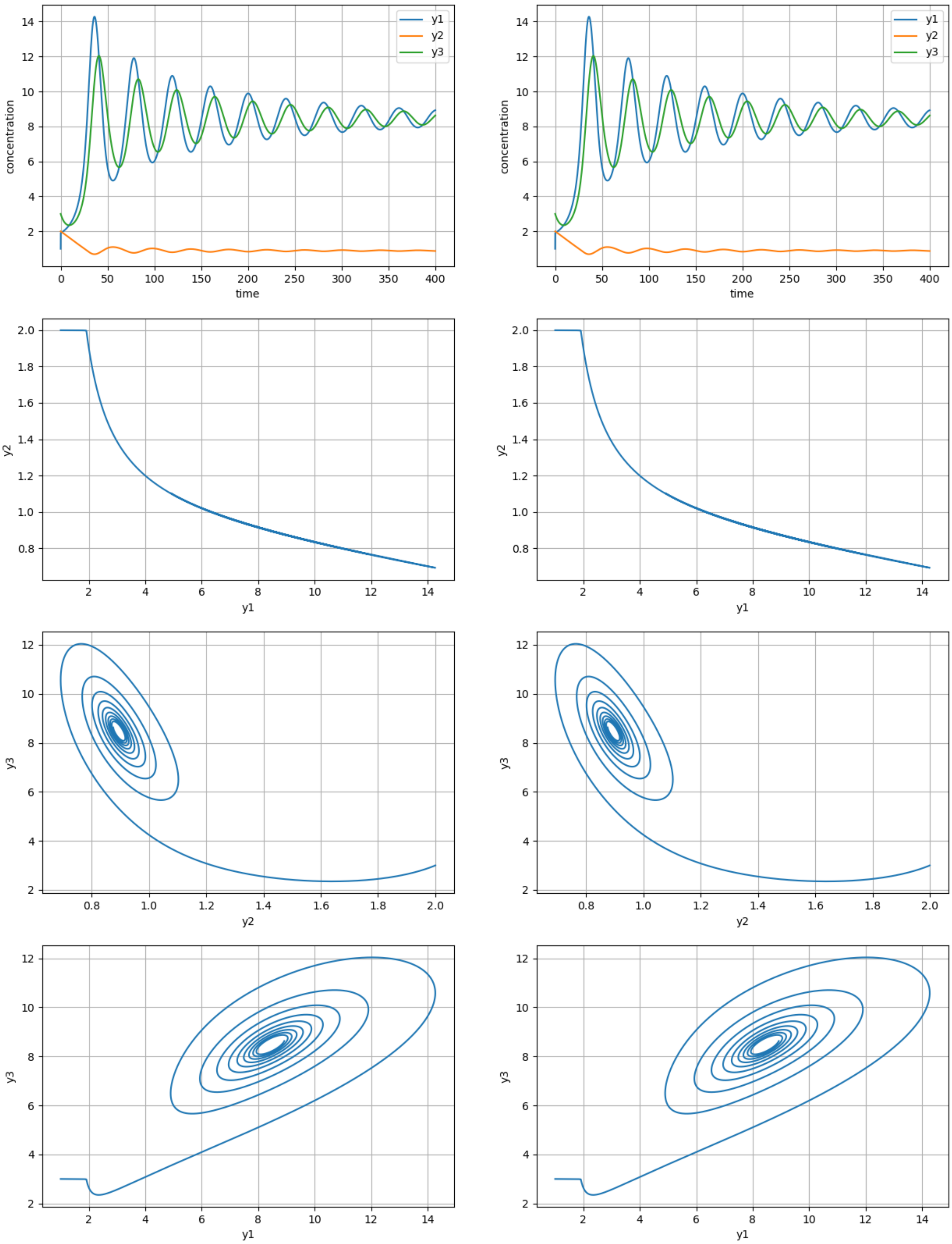


Рис. 4: Графики зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, $q = 0.025$. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

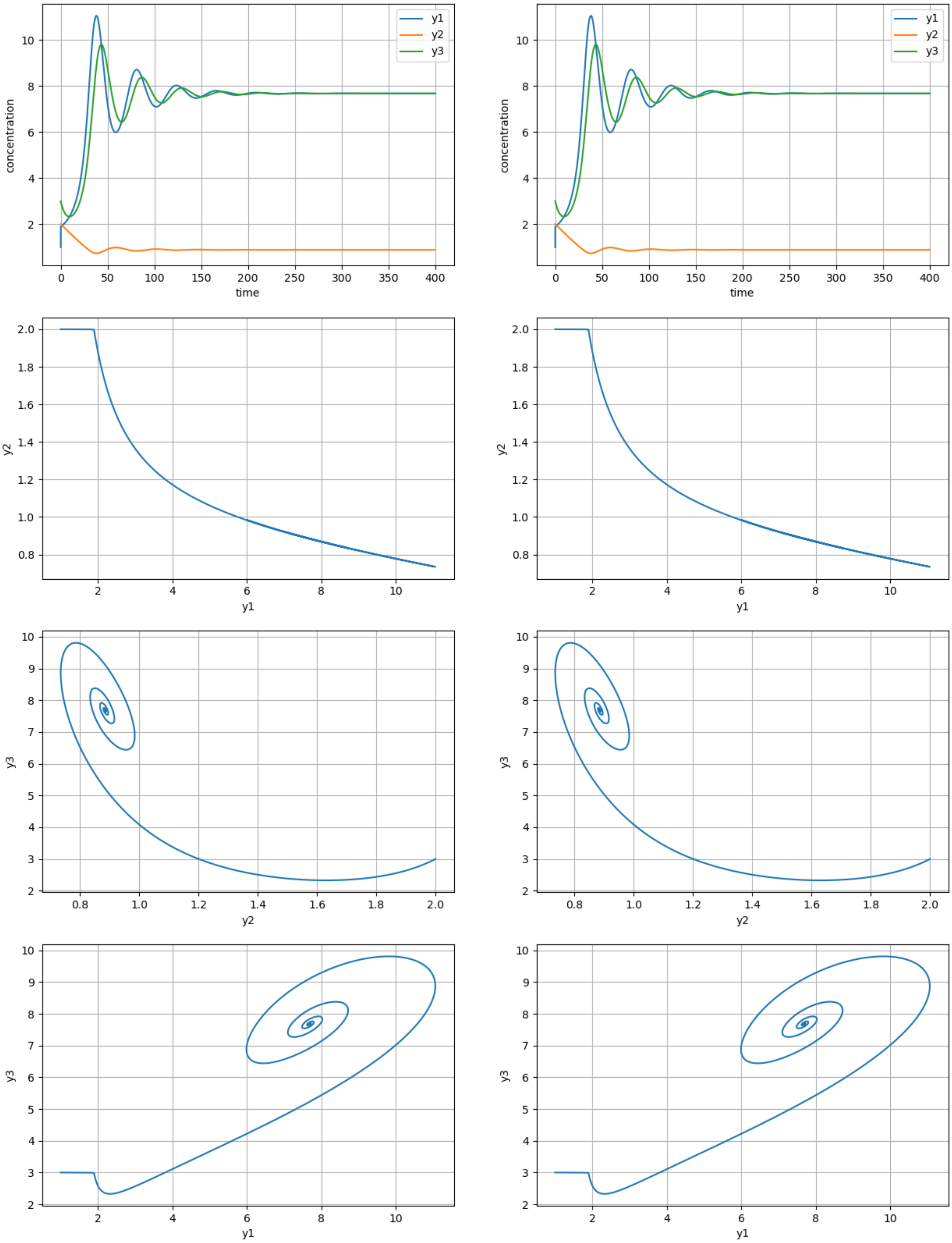


Рис. 5: Графики зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, $q = 0.03$. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

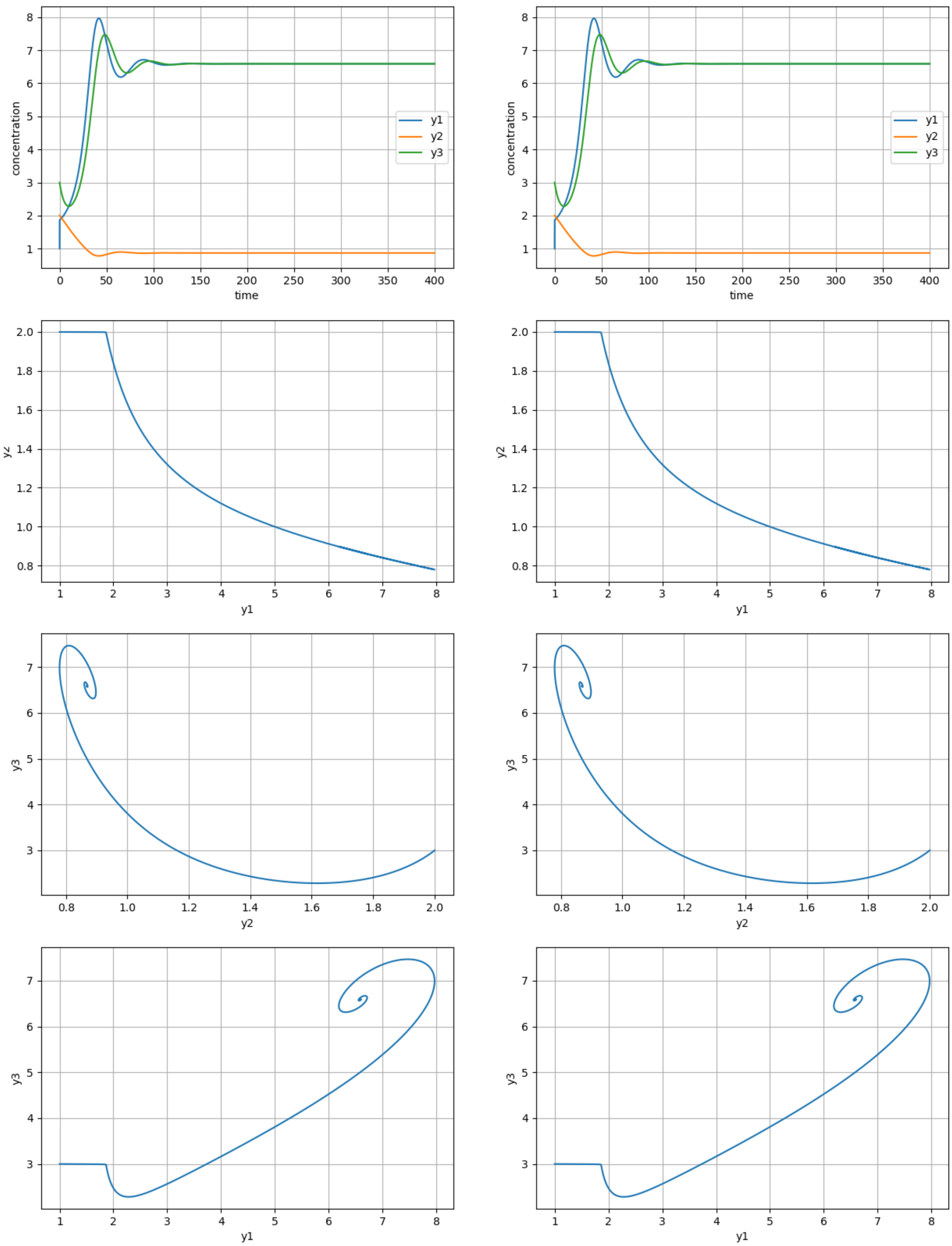


Рис. 6: Графики зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, $q = 0.04$. Слева явный метод Рунге-Кутты, справа неявный.

Отметим зависимость вида графика от параметра q. Эта величина пропорциональна коэффициенту затухания колебаний концентраций. Чем больше q, тем быстрее затухают колебания. Также эта величина обратна пропорциональна начальной амплитуде колебаний.

6 Заключение

Были представлены численные методы решения задачи Коши для системы ОДУ реакции Белоусова-Жаботинского, а именно методы Рунге-Кутты 4 порядка тосчности. Исследования сходимости явного и неявного метода показали что они одинаково ведут себя в системах ОДУ и имеют схожий порядок сходимости. Были приведены зависимости $y_i(t)$ и $y_i(y_j)$, а тавже исследован параметр задачи q

7 Список литературы

Петров И. Б., Лобанов А. И. Лекции по вычислительной математике. М.: Интуит, Бином, 2006

Петров И. Б. Вычислительная математика для физиков - Москва : Физматлит, 2021

Iserles, Arieh, A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations, Cambridge University Press, 1996