

Modello del Problema Chimico "Oregonator"

Il seguente problema descrive il comportamento del problema chimico "Oregonator" descritto da un sistema di equazioni differenziali che modellano reazioni chimiche dovute a tre sostanze. Queste dopo un periodo di inattività, presentano oscillazioni in cui cambia struttura e colore.

Il sistema di equazioni differenziali è un problema **"Stiff"** ed è risolvibile attraverso gli strumenti messi a disposizione dal Matlab. Uno strumento che ci consente la risoluzione è **"ode15s"**. In questo documento il problema viene risolto e vengono proposti dei grafici in funzione dei parametri di uscita e in scala logaritmica che descrivono il comportamento di questo fenomeno.

Modello Matematico del Problema

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1' = \frac{qy_2 - y_1 y_2 + y_1(1 - y_1)}{e} \\ y_2' = \frac{-qy_2 - y_1 y_2 + f y_3}{g} \\ y_3' = y_1 - y_3 \\ t \in [0, 50] \\ y_1(0) = y_2(0) = y_3(0) = 0.2 \\ q = 9 \times 10^{-5} \\ e = 10^{-2} \\ g = 2.5 \times 10^{-5} \\ f = 0.8 \end{array} \right.$$

Risoluzione del Modello

In questa sezione proponiamo un metodo di risoluzione del modello attraverso le routine del MATLAB **"ode45, ode15s e odeset"**, viene calcolato il modello di equazioni differenziali sopra descritto. In particolare la routine **"odeset"** permette di specificare la "Tolleranza Relativa e Assoluta" di errore utilizzata ai fini della precisione del risultato.

Per completezza richiamiamo uno script appositamente creato che effettua i calcoli sopra descritti.

```
[tempo45,y45,tempo15s,y15s]=Risolve_Oregonator();
```

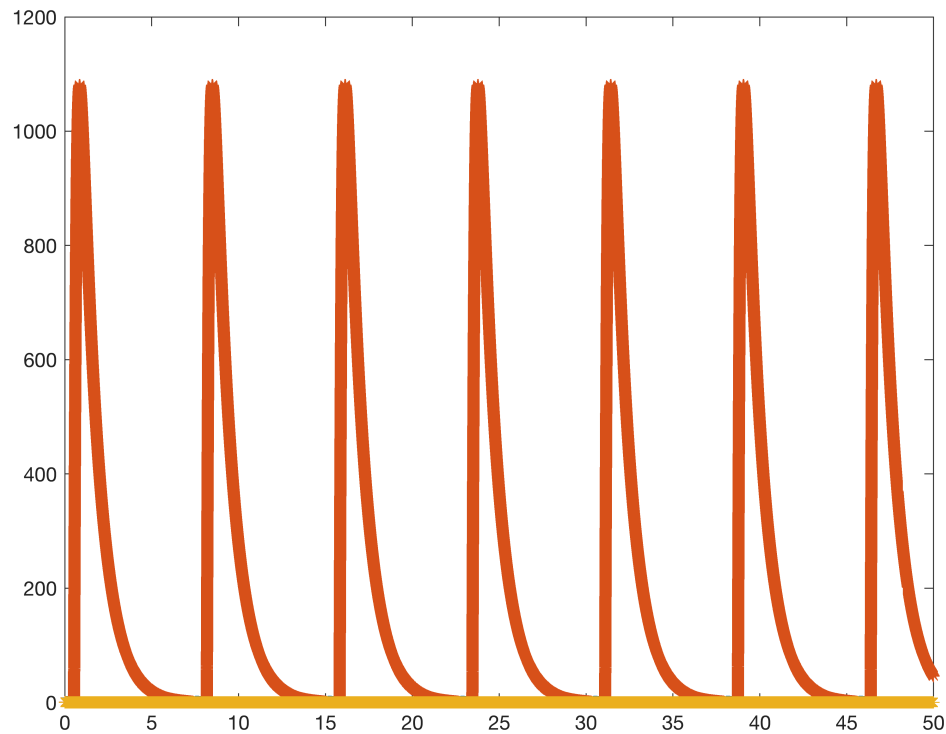
```
[ODE45],Tempo: 2.831721e+01 , Numero di punti: 1398453  
[ODE15s],Tempo: 1.194081e+00 , Numero di punti: 2556
```

Si noti che, per il modello di equazioni differenziali sopra descritto, ode45 impiega un tempo notevolmente superiore rispetto ode15s, inoltre anche il numero dei punti considerati da ode15s è molto più piccolo, quindi il sistema di equazioni differenziali considerato è stiff.

Grafico dei Tempi di Risposta: Uso di Plot

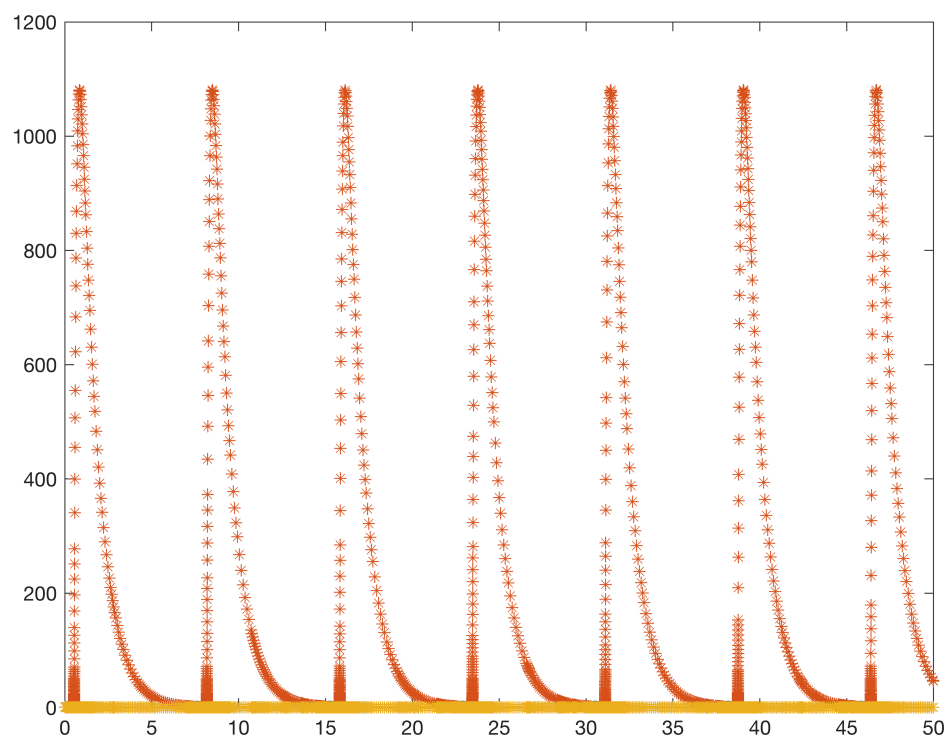
Una volta calcolati i tempi di risposta e le soluzioni attraverso le due routine del MATLAB, mostriamo ora un grafico in cui sono illustrati i valori restituiti da ode45 per il sistema di equazioni differenziali in input.

```
figure()
plot(tempo45,y45(:,1),'*',tempo45,y45(:,2),'*',tempo45,y45(:,3),'*')
```



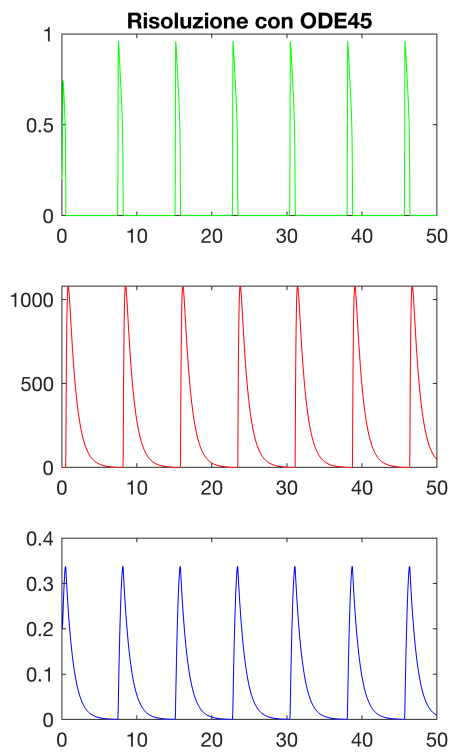
Mostriamo ora un grafico in cui sono illustrati i valori restituiti da ode15s per il sistema di equazioni differenziali in input.

```
figure()
plot(tempo15s,y15s(:,1),'*',tempo15s,y15s(:,2),'*',tempo15s,y15s(:,3),'*')
```

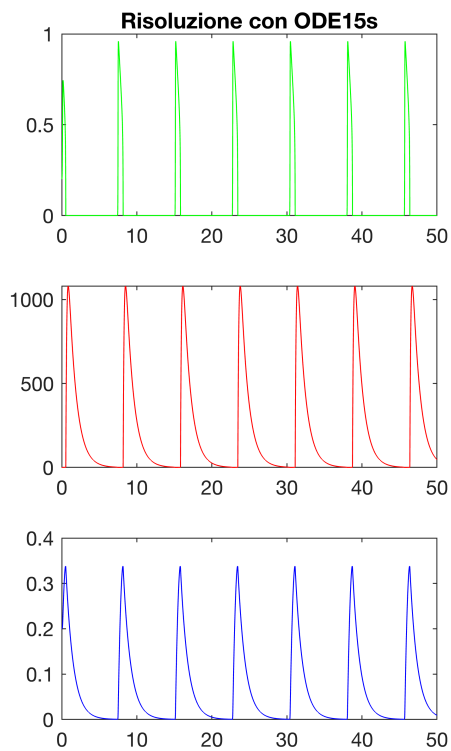


Si nota che, in entrambi i casi, i valori restituiti per le tre diverse equazioni differenziali sono notevolmente diversi, per la prima e per la terza equazione oscillano in un intervallo compreso tra 0 e 1, mentre per la seconda assume valori enormi, quindi si è preferito illustrare anche un grafico in cui sono rappresentati separatamente gli andamenti delle tre equazioni differenziali del sistema.

```
figure();
subplot(3,2,1);
plot(tempo45,y45(:,1),'g');
title('Risoluzione con ODE45');
subplot(3,2,3);
plot(tempo45,y45(:,2),'r');
subplot(3,2,5);
plot(tempo45,y45(:,3),'b');
```



```
figure();
subplot(321);
plot(tempo15s,y15s(:,1),'g');
title('Risoluzione con ODE15s');
subplot(323);
plot(tempo15s,y15s(:,2),'r');
subplot(325);
plot(tempo15s,y15s(:,3),'b');
```



Una volta calcolati i tempi di risposta e le soluzioni attraverso le due routine del MATLAB, mostriamo ora un confronto dei due metodi attraverso un grafico.

```
figure()
plot(tempo45,y45(:,1),':',tempo15s,y15s(:,1),'--','LineWidth',2);
legend('ODE45','ODE15s');
title('Confronto');
```

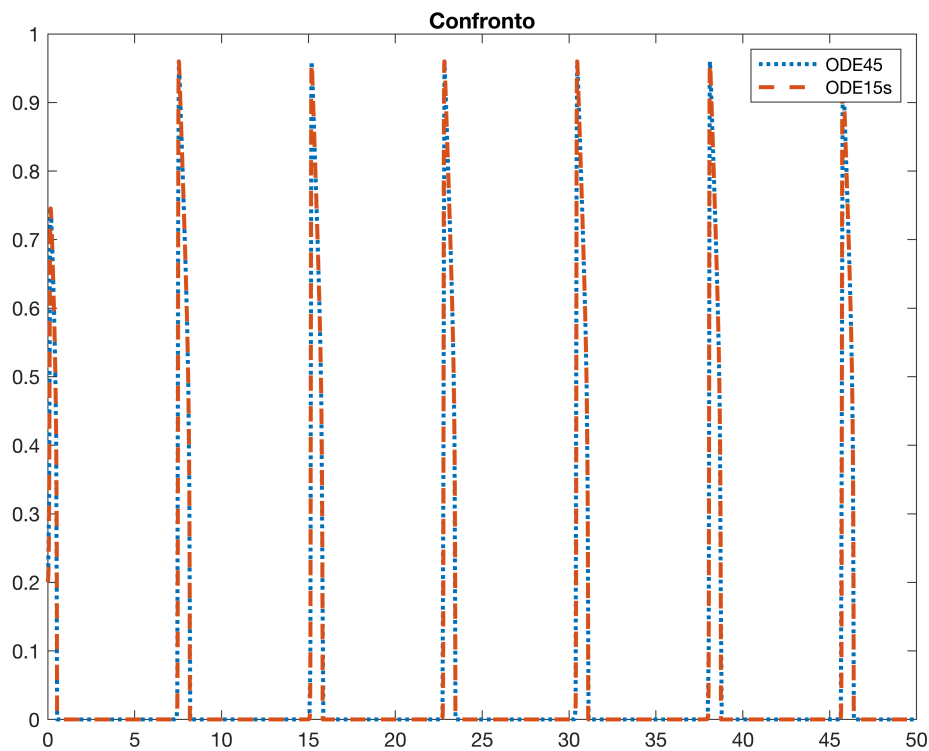
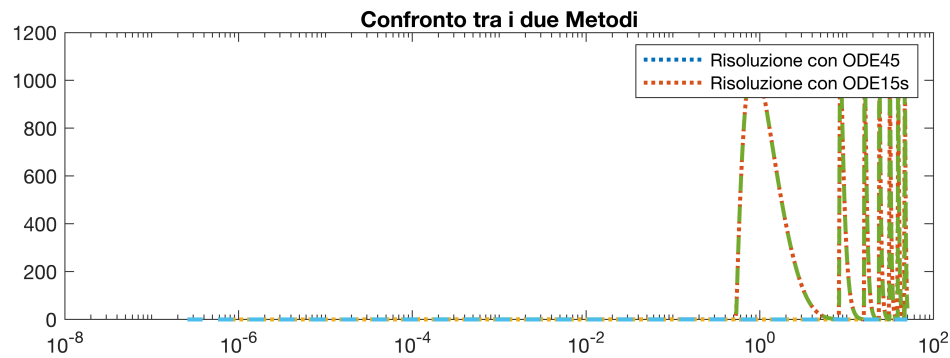
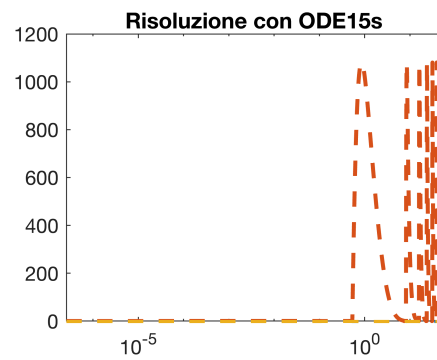
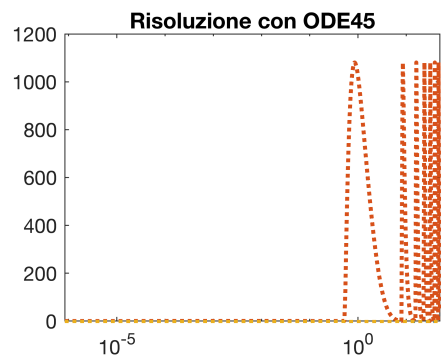


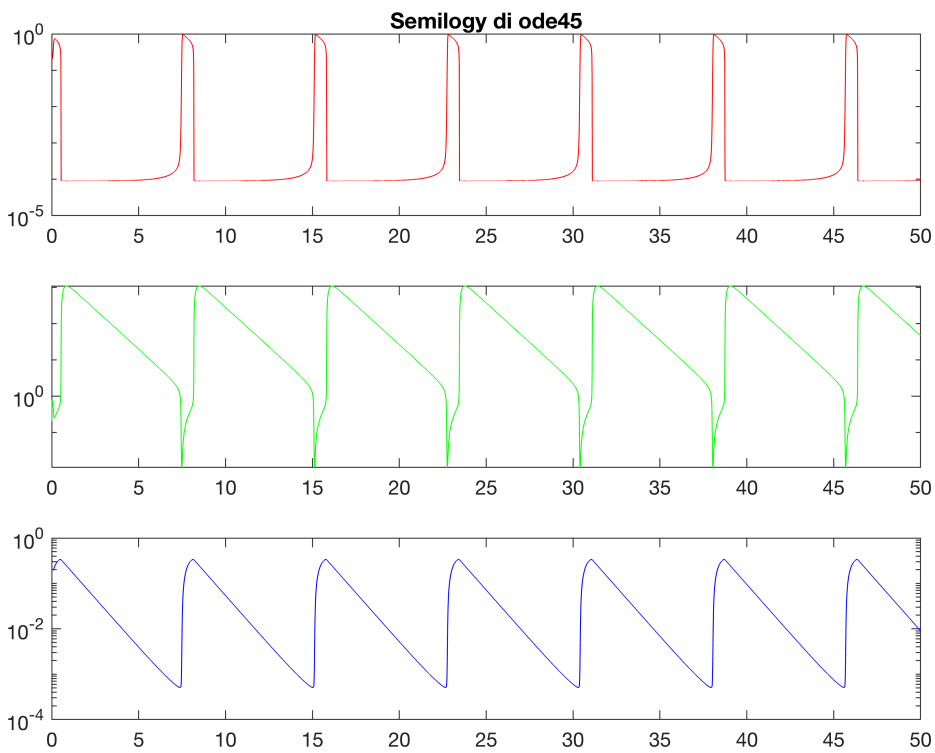
Grafico dei Tempi di Risposta: Uso di Semilog

In contrapposizione all'uso di Plot, mostriamo lo stesso risultato con l'ausilio di Semilog

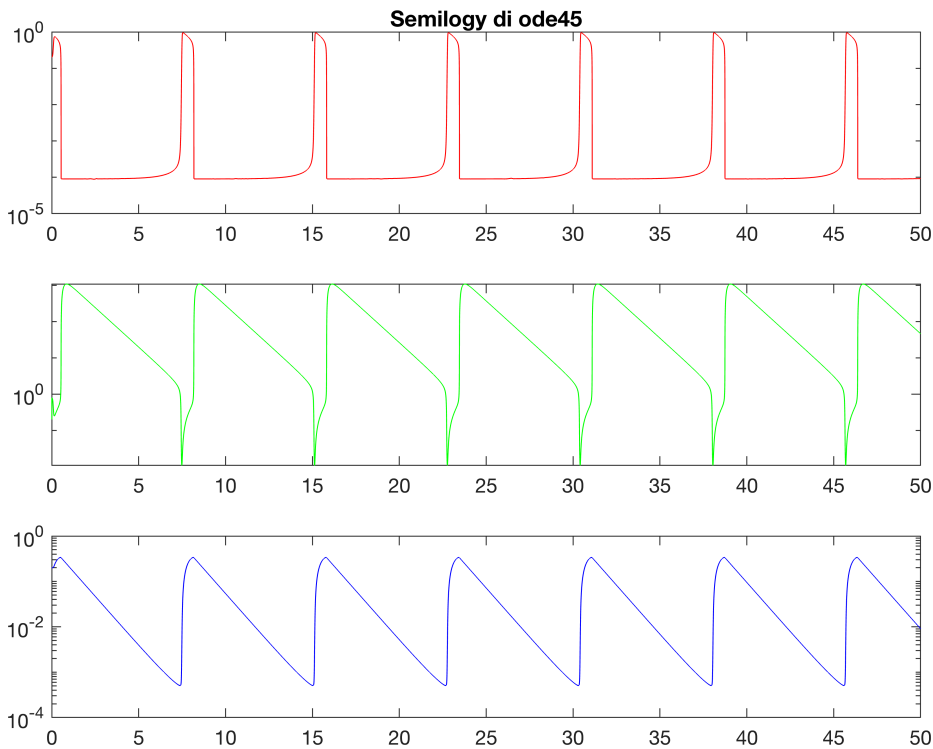
```
figure();
subplot(2,2,1)
semilogx(tempo45,y45,':','LineWidth',2)
title('Risoluzione con ODE45');
subplot(2,2,2)
semilogx(tempo15s,y15s,'--','LineWidth',2)
title('Risoluzione con ODE15s');
subplot(2,2,[3,4])
semilogx(tempo45,y45,':',tempo15s,y15s,'--','LineWidth',2)
legend('Risoluzione con ODE45','Risoluzione con ODE15s')
title('Confronto tra i due Metodi');
```



```
figure()
subplot(3,1,1);
semilogy(tempo45,y45(:,1),'r');
title('Semilogy di ode45');
subplot(3,1,2);
semilogy(tempo45,y45(:,2),'g');
subplot(3,1,3);
semilogy(tempo45,y45(:,3),'b');
```



```
figure()
subplot(3,1,1);
semilogy(tempo15s,y15s(:,1),'r');
title('Semilogy di ode45');
subplot(3,1,2);
semilogy(tempo15s,y15s(:,2),'g');
subplot(3,1,3);
semilogy(tempo15s,y15s(:,3),'b');
```

Profile Summary

Profile Summary

Generated 10-May-2019 12:08:38 using performance time.

Function Name	Calls	Total Time	Self Time*	Total Time Plot (dark band = self time)
Risolve_Oregonator	1	31.514 s	2.016 s	
ode45	1	28.056 s	16.685 s	
Oregonator_ODE	2236646	6.271 s	6.271 s	
funfun\private\ntpr45split	349613	5.033 s	5.033 s	
ode15s	1	1.394 s	1.236 s	
funfun\private\odefinalize	2	0.114 s	0.114 s	
funfun\private\odenumjac	205	0.096 s	0.091 s	

Dall'analisi del Profile Summary, notiamo che la soluzione del sistema di equazioni differenziali dato, in base alla funzione con la quale viene risolto (ode45 oppure ode15s), è calcolata con un tempo molto più efficiente nel caso di ode15s rispetto al tempo impegnato con ode45. Dunque, deduciamo che il sistema è STIFF.