

Computergestütztes wissenschaftliches Rechnen II

(SoSE 2014)

## Abschluß-Hausarbeit

(Abgabe: 18.08.2014, 12:00 Uhr)

## Projekt 005: Chemische Kinetik

Die Dichten u und v von 2 chemischen Molekülsorten (dimensionslos gemacht) werden als kontinuierlich aufgefasst und entwickeln sich gemäß der Gleichungen

$$\frac{du}{dt} = a - u + u^2 v$$

$$\frac{dv}{dt} = b - u^2 v \,,$$

wobei a > 0, b > 0.

- a) Erstellen Sie ein Programm, das die Bewegungsgleichungen mit Hilfe des Runge Kutta Verfahrens 4. Ordnung und dem Euler Algorithmus löst. Vergleichen Sie im Folgenden die mit beiden Algorithmen erhaltenen Ergebnisse und diskutieren Sie die Unterschiede. Anfangswerte und die Parameter a,b sollen vom Programm über die Kommandozeile eingelesen werden. Wählen Sie als Zeitschritt zunächst  $\Delta t = 0.001$ . Beachten Sie, dass u und v immer positiv sein müssen.
- b) Wählen Sie ein b < 1. Plotten Sie die Trajektorien u(t), v(t) gegen t, sowie u(t) gegen v(t) für einige a zwischen 0 und 1. Wie sieht die Bewegung für große Zeiten aus?
- c) Variieren Sie nun b und a systematisch (zwischen 0 und 1) und bestimmen Sie den Bereich, in dem Sie für große t periodische Lösungen finden.