

COMPUTERGESTÜTZTES WISSENSCHAFTLICHES RECHNEN
DER FAKULTÄT FÜR PHYSIK,
UNIVERSITÄT GÖTTINGEN

Abschlussarbeit
Projekt 5 - Chemische Kinetik

Student: Michael Lohmann
E-Mail: m.lohmann@stud.uni-goettingen.de
Betreuer: Burkhard Blobel
Versuchsdatum: 11.8.2014

Note:

Inhaltsverzeichnis

1 Aufgaben	3
2 Runge-Kutta-Algorithmus	3
3 Durchführung	4
4 Auswertung	4
5 Diskussion	4
Literatur	4

1 Aufgaben

Die Bewegung von Teilchen zu bestimmen ist eine wichtige Voraussetzung um Prognosen zu erstellen, wie sich ein System verhält. Insbesondere ist es interessant (nicht nur für Chemiker) die Entwicklung der Dichte zweier verschiedener Stoffsorten, welche vermischt sind, zu beobachten, da diese in großem Maße für die Reaktionsfähigkeit entscheidend sind. Die Gleichungen, welche dieses System beschreiben lauten

$$\frac{du(t)}{dt} = a - u(t) + u^2(t) \cdot v(t) = f_u(u, t) \quad (1)$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = b - u^2(t) \cdot v(t) = f_v(v, t) \quad (2)$$

wobei $u(t)$ und $v(t)$ die Dichten der beiden Molekülsorten sind und a und b zwei Konstanten, welche größer 0 sind. Außerdem kann die Dichte eines Stoffes natürlich nicht negativ werden, so dass $u(t)$ und $v(t)$ ebenfalls immer positiv sein müssen.

2 Runge-Kutta-Algorithmus

Der Runge-Kutta-Algorithmus ist ein Ansatz, Differentialgleichungen numerisch zu lösen. Er ist eine einfache und dabei relativ robuste Möglichkeit, Näherungen zu bekommen. Der wohl am häufigsten benutzte ist dabei derjenige 4. Ordnung. In der diskretisierten Form berechnet sich das folgende Glied aus dem vorherigen nach [1, S.130] durch

$$y_{i+1} = y_i + (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4)/6$$

mit

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta t \cdot f(y_i, t_i) \\ k_2 &= \Delta t \cdot f(y_i + k_1/2, t_i + \Delta t/2) \\ k_3 &= \Delta t \cdot f(y_i + k_2/2, t_i + \Delta t/2) \\ k_4 &= \Delta t \cdot f(y_i + k_3, t_i + \Delta t) \end{aligned}$$

wobei $\dot{y} = f(y, t)$.

3 Programmstruktur

Das Programm beginnt mit der Definition der beiden Funktionen

4 Auswertung

5 Diskussion

Literatur

- [1] J. PITT-FRANCIS AND J. WHITELEY (2012): *Guide To Scientific Computing in C++*, 1. Auflage, Springer London