

COMPUTERGESTÜTZTES WISSENSCHAFTLICHES RECHNEN
DER FAKULTÄT FÜR PHYSIK,
UNIVERSITÄT GÖTTINGEN

CWR2 Abschlussarbeit
Projekt 5 - Chemische Kinetik

Student: Michael Lohmann
E-Mail: m.lohmann@stud.uni-goettingen.de
Betreuer: Burkhard Blobel
Abgabedatum: 18.8.2014

Note:

Inhaltsverzeichnis

1 Aufgaben	3
2 Runge-Kutta-Algorithmus	3
3 Programmstruktur	4
4 Auswertung	4
5 Stabilität der Algorithmen	4
6 Mögliche Verbesserungen	8
Literatur	8

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.

Ein selbstgeschriebenes Programm soll die Startwerte und Parameter einlesen und daraus mithilfe des Euler- sowie des Runge-Kutta-Algorithmus die zeitliche Entwicklung berechnen.

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

$$k_1 = \Delta t \cdot f(y_i, t_i)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f(y_i + k_1/2, t_i + \Delta t/2)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f(y_i + k_2/2, t_i + \Delta t/2)$$

$$k_4 = \Delta t \cdot f(y_i + k_3, t_i + \Delta t)$$

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

Für kompliziertere Differentialgleichungen ist eventuell eine höhere Ordnung nötig, oder aber eine komplett andere Herangehensweise, die auch mit komplexeren DGLs zurechtkommt. Für viele Probleme reicht aber der Runge-Kutta-Algorithmus 4. Ordnung aus. Der Euler-Algorithmus berechnet den nächsten Schritt nur mit $y_{i+1} = y_i + k_1$ und ist dadurch in der Regel ungenauer (gleiche Ergebnisse lassen sich nur bei konstanten Funktionen erwarten).

3 Programmstruktur

Das Programm beginnt mit der Definition der beiden Funktionen f_u und f_v , welche die jeweiligen Werte aus den Daten von u bzw. v berechnen. In der *main* werden zunächst die Variablen deklariert und soweit möglich initialisiert. Folgend werden die restlichen per Benutzereingabe eingelesen. Dabei wird auch überprüft, ob sie der Voraussetzung entsprechend > 0 sind. Sollte dies nicht der Fall sein, so werden sie so lange erneut abgefragt, bis sie > 0 sind. Sind alle 4 Werte korrekt eingegeben, so werden sie in die erste Stelle der Arrays eingetragen. Dies sind 4 Stück: je eins für u und eins für v zu den beiden Algorithmen.

Eine zunächst auskommentierte Schleife beinhaltet die Möglichkeit, für ein festes b zu verschiedenen Werten von a die Berechnung durchzuführen.

Im folgenden wird mit einer Hilfskonstruktion aus Stringstreams und Strings der Dateiname für die spätere Ausgabedatei erstellt. Diese wird nun zum Schreiben geöffnet und in ihre ersten beiden Zeilen werden die Beschriftungen der Spalten und die Startparameter eingetragen.

Dann beginnt die Berechnung. Eine Schleife geht jeden Zeitschritt durch bis die Endzeit erreicht ist. Zunächst schreibt er in die erste Spalte den aktuellen Schritt. Aus diesem berechnet er den Wert für den darauf folgenden. Dabei berechnet er zunächst mit dem Euler-Verfahren und dann nach Runge-Kutta und schreibt die aktuellen Ergebnisse in die Ausgabedatei.

Da u und v des nächsten Schritts jedoch voneinander abhängen, kann der Runge-Kutta-Algorithmus nicht zunächst die eine und dann die andere Berechnung machen. Das Problem wurde dadurch gelöst, dass die Koeffizienten k_{1_u} bis k_{4_u} immer abwechselnd mit k_{1_v} bis k_{4_v} berechnet werden und die Zwischenergebnisse mit in die Berechnungen mit einfließen. Diese werden wie auch beim Euler-Verfahren jeweils mithilfe der als erstes im Programm definierten Funktionen f_u und f_v berechnet. Die dafür nötigen Werte werden ihnen übergeben und der Rückgabewert wird mit Δt multipliziert um die Koeffizienten zu erhalten. Sind alle berechnet, so wird aus diesen der nächste Schritt berechnet.

4 Auswertung

Wie man in den Abb. 1 bis 6 sieht, nimmt mit größer werdendem Parameter a nicht nur der Grenzwert von u zu (von v ab), sondern die Schwingung von u und v wird im Verlauf der Zeit deutlich schneller abgebremsst.

5 Stabilität der Algorithmen

Es ist keinesfalls beliebig, welchen Algorithmus man verwendet. Dies kann man insbesondere an der Abbildung 7 erkennen, welche in Teil a) für Schrittweiten von $\Delta t = 0.1$ die Ergebnisse des Runge-Kutta-Algorithmus zu den Eingabewerten $a = 0.01$, $b = 0.99$, $u_0 =$

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.4, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

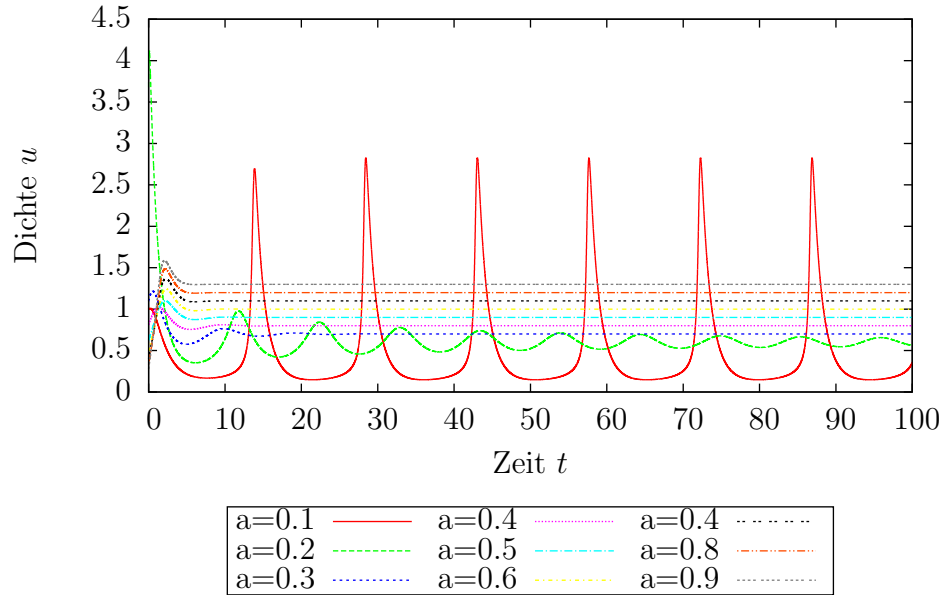


Abbildung 1: b04

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.4, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

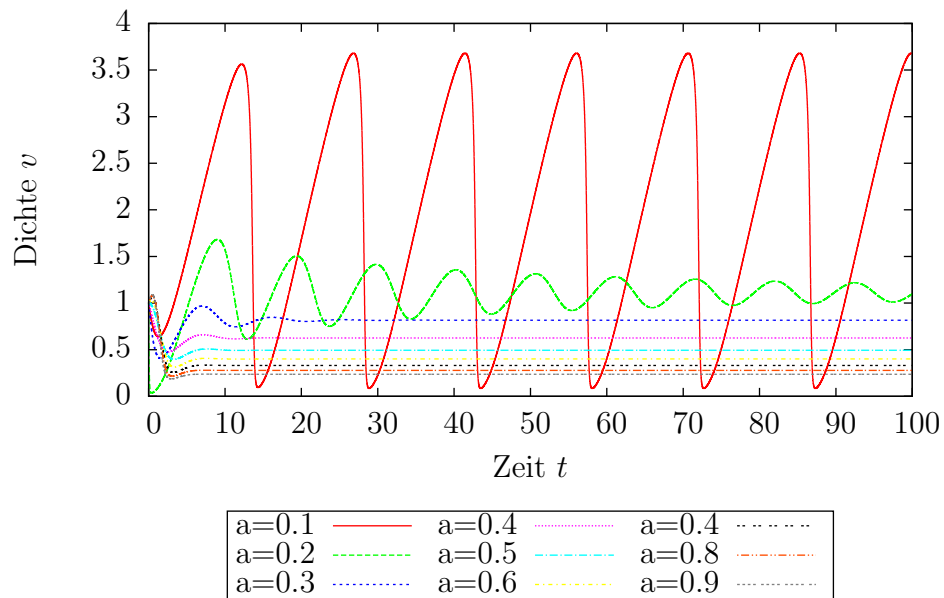


Abbildung 2: b04v

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.4, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

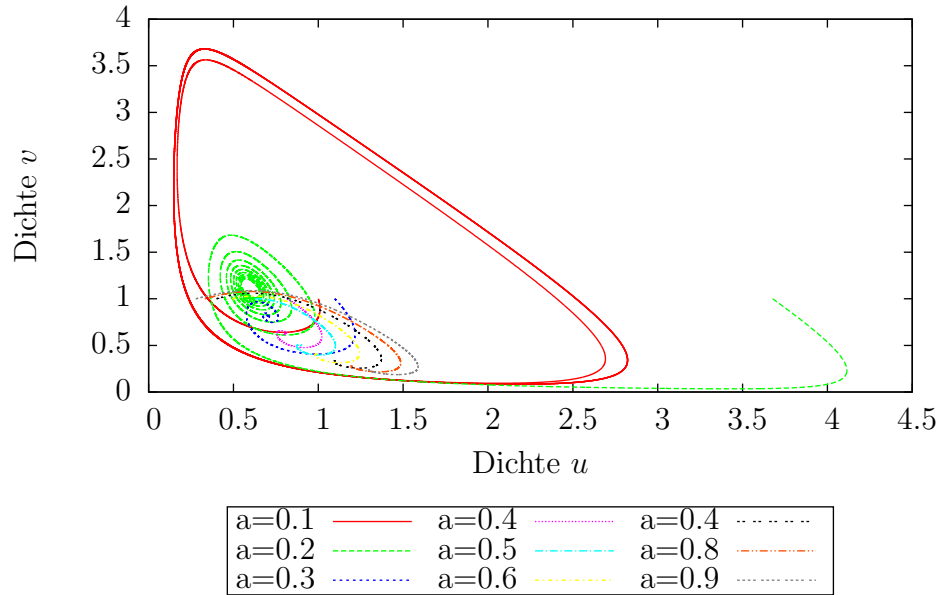


Abbildung 3: b04uv

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.7, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

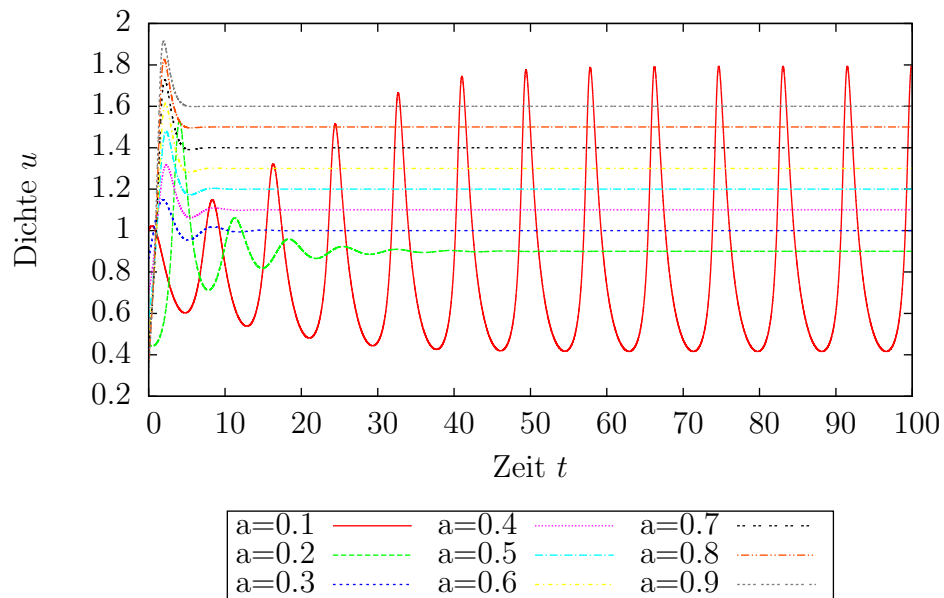


Abbildung 4: b07

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.7, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

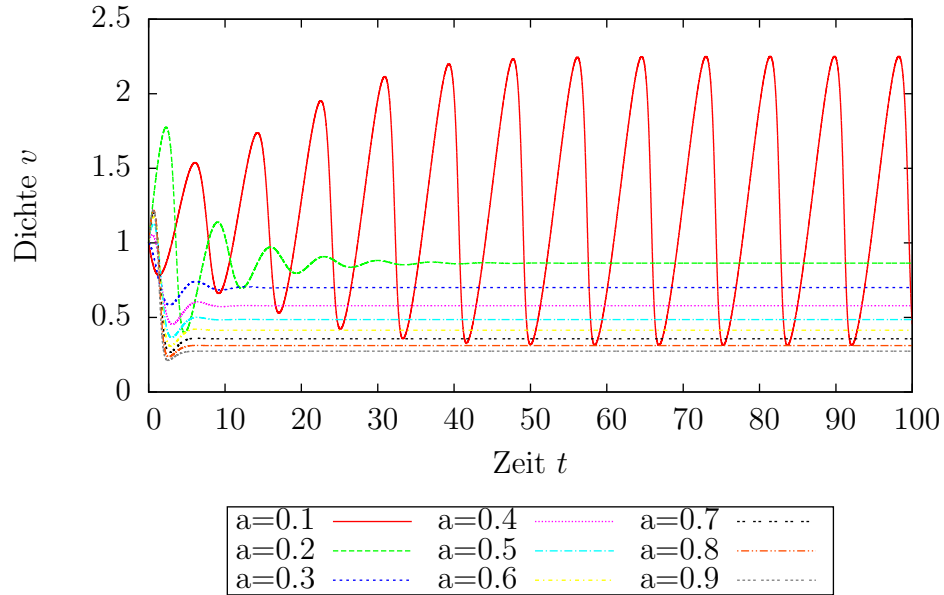


Abbildung 5: b07v

Parameter: $a = 0.1 \dots 0.9, b = 0.7, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.001$

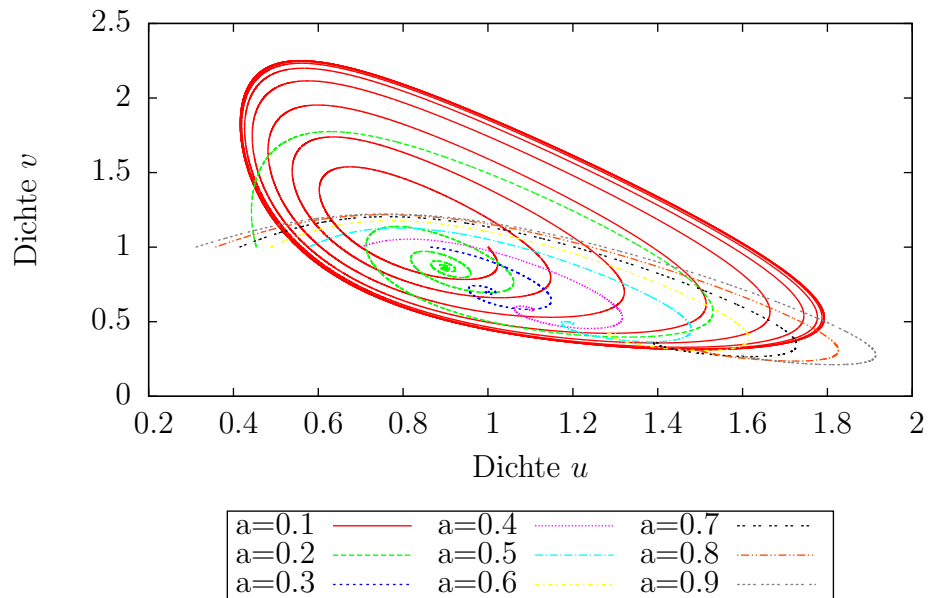


Abbildung 6: b07uv

$v_0 = 1$ zeigt. Hierbei ist eine deutliche Konvergenz zu einem Grenzwert von 1 erkennen. Guckt man sich das zweite Bild an, welches zusätzlich noch für die selben Startwerte den Euler-Algorithmus auswertet, so erkennt man, dass komplett gegenteilige Aussagen entstehen. Der grün dargestellte Euler-Algorithmus divergiert bis er konstante Schwingungen bei einer Amplitude von 1.2 ausführt.

Die Startwerte für diese Bilder habe ich durch wiederholtes Ausprobieren ermittelt, bis ein möglichst eindeutiges Bild entstand.

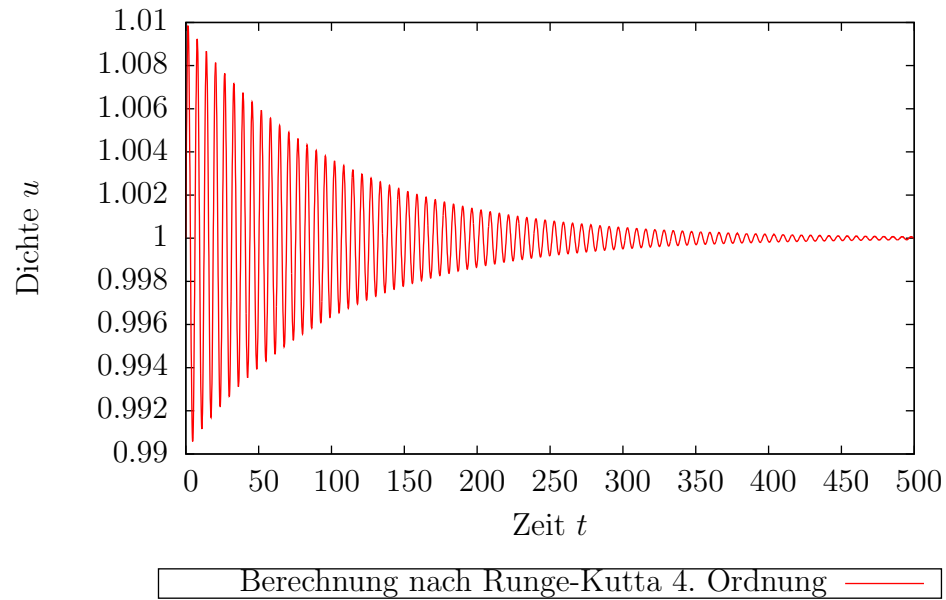
6 Mögliche Verbesserungen

Als zusätzliche Verbesserung des Runge-Kutta-Algorithmus 4. Ordnung mit konstanten Zeitschritten wäre es möglich, die Zeitschritte je nach Zeitpunkt unterschiedlich zu wählen. Es ist z.B. wichtig, wenn sich schnell etwas ändert, möglichst kleine Schritte zu machen. Ändert sich jedoch wenig, so ist eine kleine Schrittweite nur rechenintensiv und trägt nur unwesentlich zu einer genaueren Berechnung bei.

Literatur

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

Parameter: $a = 0.01, b = 0.99, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.1$



Parameter: $a = 0.01, b = 0.99, u_0 = v_0 = 1$ bei einer Schrittweite von $\Delta t = 0.1$

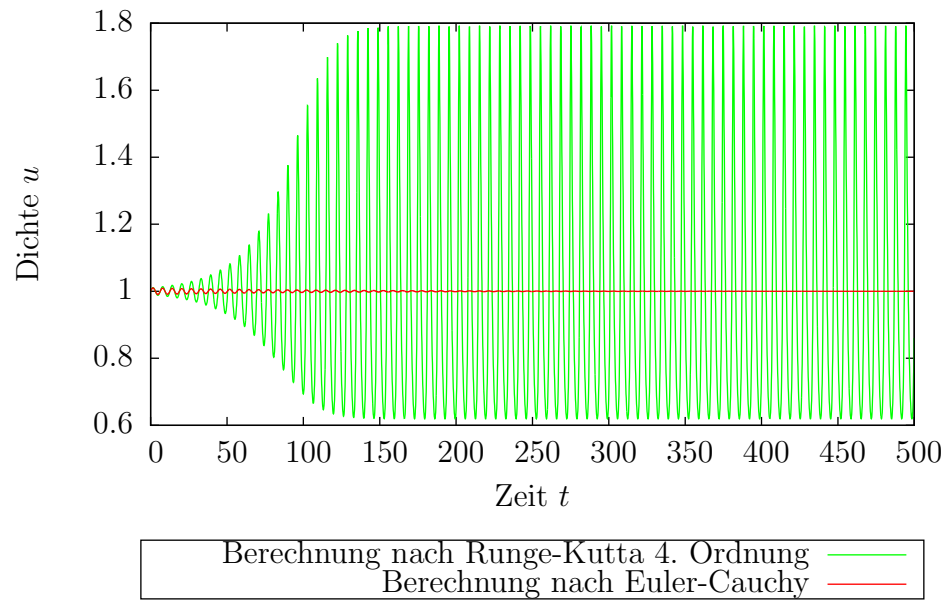


Abbildung 7: Unterschiedliche Algorithmen im Vergleich