Mathematische Modellierung
SS17, Übungsblatt 3

Ausarbeitung bis 28. März 2017

1. Mit Dimensionsanalyse leiten Sie das dritte Keplersche Gesetz her: *Die Quadrate der Umlaufzeiten zweiter Planeten verhalten sich wie die Kuben ihrer großen Halbachsen.* (Hinweis: Sehen Sie Seite 19 im Skriptum `http://imsc.uni-graz.at/thaller/lehre/mpt/skriptum.pdf`, und geben Sie Acht, dass die Voraussetzungen des Buckingham Pi Satzes erfüllt sind.)

2. Lösen Sie das Anfangswertproblem analytisch

$$\begin{cases} P'(t) &=& \dfrac{P(t)}{\tau}\left[1-\dfrac{P(t)}{K}\right], \quad t > t_0 \\ P(t_0) &=& P_0 \end{cases}$$

   und numerisch mit Matlab (wobei die Parameter vom Benutzer eingegeben werden), und vergleichen Sie die Ergebnisse graphisch.

3. Für die chemische reversible Reaktion,

$$A + B \underset{\kappa_2}{\overset{\kappa_1}{\rightleftharpoons}} C + D$$

   sind die Anfangskonzentrationen

$$[A](0) = 3 \text{ Mol/Liter}, [B](0) = 2 \text{ Mol/Liter}, [C](0) = 1 \text{ Mol/Liter und } [D](0) = 0 \text{ Mol/Liter}.$$

   Die Reaktionskonstanten sind $\kappa_1 = 2$ (Liter·Minuten/Mol) für die Vorwärtsreaktion und $\kappa_2 = 2$ (Liter·Minuten/Mol) für die Rückwärtsreaktion. Finden Sie die Konzentrationen $[A](t)$, $[B](t)$, $[C](t)$ und $[D](t)$ als Funktionen von der Reaktionszeit t Minuten, und stelle diese gemeinsam graphisch dar. Finde die Gleichgewichtskonzentrationen dieser Chemikalien. Zeige dass diese Gleichgewichte stabil sind.

4. Gegeben sei die chemische Reaktion,

$$kA + lB \underset{\kappa_2}{\overset{\kappa_1}{\rightleftharpoons}} mC + nD$$

   mit folgenden Parametern:

$$k = 2, \quad l = 1, \quad m = 2, \quad n = 1$$

$$[A](0) = 2, \quad [B](0) = 2, \quad [C](0) = 2, \quad [D](0) = 1.$$

   Bestimmen Sie das Anfangswertproblem

$$x'(t) = f(x(t); \kappa_1, \kappa_2), \quad x(0) = x_0$$

   wobei

$$[A](t) = [A](0) - kx(t), \quad [B](t) = [B](0) - lx(t)$$

$$[C](t) = [C](0) + mx(t), \quad [D](t) = [D](0) + nx(t).$$

Schreiben Sie die Gleichung $f(x^*; \kappa_1, \kappa_2) = 0$ in die Form um,

$$0 < \kappa_2/\kappa_1 = r(x^\star)$$

um eine Beziehung zwischen Gleichgewichten $x^\star$ und dem Quotienten κ_2/κ_1 herzuleiten. (Bemerken Sie, wegen der Form von r bedeutet die Bedingung $\kappa_2/\kappa_1 > 0$, dass ein Gleichgewicht $x^\star \in (-1, 2)$ erfüllen muss.) Zeigen Sie, die Gleichgewichte $x^\star$ mit $r'(x^\star) < 0$ sind (lokal asymptotisch) stabil, während die Gleichgewichte $x^\star$ mit $r'(x^\star) > 0$ instabil sind. (Hinweise: Es gilt $f'(x^\star; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = 4r'(x^\star)(1 + x^\star)^3$.) Leite eine entsprechende Potential-Landschaft $p(x, R)$ her, wobei $f(x; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = -p_x(x, \kappa_2/\kappa_1)$. Stellen Sie $p(x, R)$ für verschiedene Werte von R auf dem Intervall $0 \leq x \leq 2$ grafisch dar, um Hysterese für das System zu zeigen.