Mathematische Modellierung für LAK
Übungsblatt 2 unter Ersatzbetreuung von Keeling
2.Juni 2016

1. Für die chemische 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 der Reaktionszeit t (Minuten), und stellen Sie diese gemeinsam graphisch dar. Finden Sie die Gleichgewichtskonzentrationen dieser Chemikalien und bestimmen Sie ob diese stabil sind oder nicht.

2. Die chemische Reaktion
$$kA + lB \underset{\kappa_2}{\overset{\kappa_1}{\rightleftharpoons}} mC + nD$$
sei gegeben mit den 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 der Form um,
$$\kappa_2/\kappa_1 = r(x^\star)$$
um eine Beziehung zwischen Gleichgewichten und dem Quotienten κ_2/κ_1 herzustellen. (Bemerken Sie, die Bedingung $\kappa_2/\kappa_1 > 0$ impliziert durch die Form von r, dass ein Gleichgewicht $x^\star > -1$ erfüllen muss.) Zeigen Sie, jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit $r'(x^\star) < 0$ ist (lokal asymptotisch) stabil, während jedes Gleichgewicht $x^\star$ mit $r'(x^\star) > 0$ instabil ist. (Hinweis: Es gilt $f'(x^\star; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = 4r'(x^\star)(1 + x^\star)^3$.) Leiten Sie eine entsprechende Potential-Landschaft $p(x, \kappa_2/\kappa_1)$ her, wobei $f(x; \kappa_1, \kappa_2)/\kappa_1 = -p_x(x, \kappa_2/\kappa_1)$. Für verschiedene Werte von κ_2/κ_1 stellen Sie $f(x; \kappa_1, \kappa_2)$ und $p(x, \kappa_2/\kappa_1)$ im Intervall $0 \le x \le 3$ grafisch dar, um Hysterese zu zeigen.

3. Schreiben Sie einen Matlab Code, um das Anfangswertproblem des letzten Beispiels numerisch zu lösen, und bestimmen Sie experimentiell, ob die Nullstellen der Funktion f stabile oder nicht stabile Gleichgewichte sind.

4. Schreiben Sie einen Matlab Code zur Bestimmung des dynamischen Zustandes eines Masse-Feder-Systems, das so modelliert wird:

$$mu''(t) + cu'(t) + ku(t) = f, \quad u(0) = u_0, \quad u'(0) = u_1$$

Die Parameter sind: $m > 0$ die Masse, $u : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ die Auslenkung vom Ruhestand, $c > 0$ die Dämpfung, $k > 0$ die Federkonstante, $f : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ die äußere Kraft, u_0 die Anfangsauslenkung und u_1 die Anfangsgeschwindigkeit. Achtung: Diese Differentialgleichung zweiter Ordnung muss für Matlab in erste Ordnung umgeschrieben werden. Stellen Sie die Ergebnisse grafisch dar (a) dynamisch mit der Zeit und (b) in der Phasenebene mit Koordinaten (u, u'). Bestimmen Sie experimentiell, welche Parameter führen zu Schwingungen und welche nicht.