

Progetto 22 ODE

Reazioni chimiche non lineari

Risolvere numericamente un sistema di equazioni differenziali ordinarie non lineari che rappresentano delle reazioni chimiche con ODE non lineari.

Il sistema di ODE sotto riportato, descrive il comportamento di un fenomeno che evolve nel tempo, in particolare, questo, è rappresentato da tre differenti reazioni chimiche di natura non lineare.

$$\begin{aligned}y_1' &= -\alpha y_1 + \beta y_2 y_3 \\y_2' &= \alpha y_1 - \beta y_2 y_3 - \gamma y_2^2 \\y_3' &= \gamma y_2^2\end{aligned}\tag{1}$$

Dove α , β , γ sono costanti del problema che valgono rispettivamente:

$$\alpha = 4 \times 10^{-2}, \beta = 10^4, \gamma = 3 \times 10^7.$$

Si considerino le seguenti condizioni iniziali: $y_1(0) = 1$, $y_2(0) = y_3(0) = 0$.

L'intervallo di integrazione in cui calcolare la soluzione va da $t = 0$ sino a $t = 3$.

Il sistema deve essere risolto mediante metodi numerici differenti, in particolare, occorre studiarne la natura stiffness, e utilizzare eventualmente metodi adeguati.

Confrontare l'efficienza dei metodi numerici .