Institut für Numerische und Angewandte Mathematik
FB Mathematik und Informatik der Universität Münster
Prof. Dr. Christian Engwer, Dipl. Math. Dipl. Inf. Sebastian Westerheide 22.05.2012

Übung zur Vorlesung

Wissenschaftliches Rechnen

SS 2012 — Blatt 5

Abgabe: 05.06.2012, 10:00 Uhr, Briefkasten 89
Code zusätzlich per e-mail an `sebastian.westerheide@uni-muenster.de`

Aufgabe 1 (Turing-Modell mit Operator-Splitting) (9 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie das Turing-Modell

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= D_a \Delta a + g_1(a,b) \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D_b \Delta b + g_2(a,b) \end{aligned}\right\} \quad \text{in} \quad \Omega \times (0,T] \tag{1}$$

mit Neumann Randbedingungen

$$\left.\begin{aligned} \nabla a \cdot n &= 0 \\ \nabla b \cdot n &= 0 \end{aligned}\right\} \quad \text{auf} \quad \partial\Omega \times [0,T] \tag{2}$$

und Anfangsbedingungen

$$\left.\begin{aligned} a(0,\cdot) &= a_0 \\ b(0,\cdot) &= b_0 \end{aligned}\right\} \quad \text{in} \quad \Omega \tag{3}$$

kennengelernt. Das partielle Differentialgleichungssystem (1) lässt sich mittels $c := (a,b)^T$ und durch additives Splitting des elliptischen Differentialoperators auf der rechten Seite ausdrücken als

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c) + g(c)$$

mit einem Operator f für den diffusiven und einem Operator g für den reaktiven Anteil.

(a) Laden Sie sich das Programmskelett zum Turing-Modell von der Vorlesungshomepage und machen Sie sich damit vertraut.

(b) Implementieren das Turing-Modell unter Verwendung des Programmskeletts für ein rechteckiges Gebiet $\Omega = [0,d]^2 \subset \mathbb{R}^2$ in C++. Verwenden Sie dabei das aus der Vorlesung bekannte Strang-Splitting.

- Betrachten Sie die beiden Gleichungen $\frac{\partial c}{\partial t} = f(c)$ und $\frac{\partial c}{\partial t} = g(c)$ im Sinne des Splittings zunächst separat
- Verwenden Sie die Linienmethode zur Entkopplung des jeweiligen Orts- und Zeitproblems
- Diskretisieren Sie das Ortsproblem mit dem zellzentrierten Finite-Volumen-Verfahren in 2D; gehen Sie dabei komponentenweise vor; benutzen Sie wie in der Vorlesung ein reguläres, äquidistantes Gitter auf Ω, welches aus rechteckigen Zellen besteht; die Datei `turing_grid.hh` stellt dafür einige Infrastruktur bereit
- Verwenden Sie beim diffusiven Anteil $\frac{\partial c}{\partial t} = f(c)$ für die Zeitdiskretisierung das explizite Euler-Verfahren
- Verwenden Sie beim reaktiven Anteil $\frac{\partial c}{\partial t} = g(c)$ für die Zeitdiskretisierung das implizite Euler-Verfahren mit dem Newton-Verfahren als Gleichungslöser; bedienen Sie sich dabei der Musterlösung von Blatt 4, Aufgabe 2
- Achten Sie auf eine gute schriftliche Dokumentation, so dass Ihre Ansätze nachvollziehbar sind; dies wird Ihnen auch bei Ihren eigenen Überlegungen weiterhelfen

(c) Testen Sie Ihre Implementierung mit den im Programmskelett gewählten Anfangswerten a_0 und b_0 an dem konkreten Modell

$$\begin{aligned} g_1(a,b) &:= 1/\epsilon_0 \left(w_0(b)\,a + w_1(a)\,b - a^2\right), \qquad & w_0(b) &:= (1.0 - mb)/(1.0 - mb + \epsilon_1),\\ g_2(a,b) &:= w_0(b)\,a - b, & w_1(a) &:= p(q-a)/(q+a), \end{aligned}$$

$$\text{mit} \quad \begin{array}{cccc} D_a = 1.0, & D_b = 10.0, & \epsilon_0 = 2.2, & \epsilon_1 = 0.02, \\ q = 0.0002, & p = 1.1, & m = 0.0007. & \end{array}$$

Dieses Modell beschreibt chemische Experimente für die Belousov-Zhabotinsky Reaktion, die in [Bánsági 2011] präsentiert werden. Die Experimente führen zu einer (eigentlich dreidimensionalen) Musterbildung, welche mit Hilfe eines Tomographen beobachtet werden kann.

(d) Das explizite Euler-Verfahren ist nicht uneingeschränkt stabil. Es muss die CFL-Bedingung eingehalten werden, welche eine Beschränkung der Zeitschrittweite mit sich bringt. Wählen Sie diese in (c) geeignet. Optimal wäre es, wenn Sie die Zeitschrittweite in jedem Zeitschritt basierend auf den aktuellen diffusiven Flüssen wählen.

Aufgabe 2 (Vorbereitendes) (3 Punkte)

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Zeigen Sie die Äquivalenz folgender Aussagen:

(a) A ist invertierbar und $(A^{-1})_{i,j} \geq 0$ für alle $i, j \in \{1, \ldots, n\}$,

(b) Für Vektoren $v, w \in \mathbb{R}^n$ gilt komponentenweise $Av \geq Aw \Rightarrow v \geq w$.